孤立量子系での「平衡」への緩和の時間スケール

田崎 晴明

Sheldon Goldstein

原 隆

2014 年 3 月 11 日

第 2 回 統計物理学懇談会

どういう話をするか？

背景

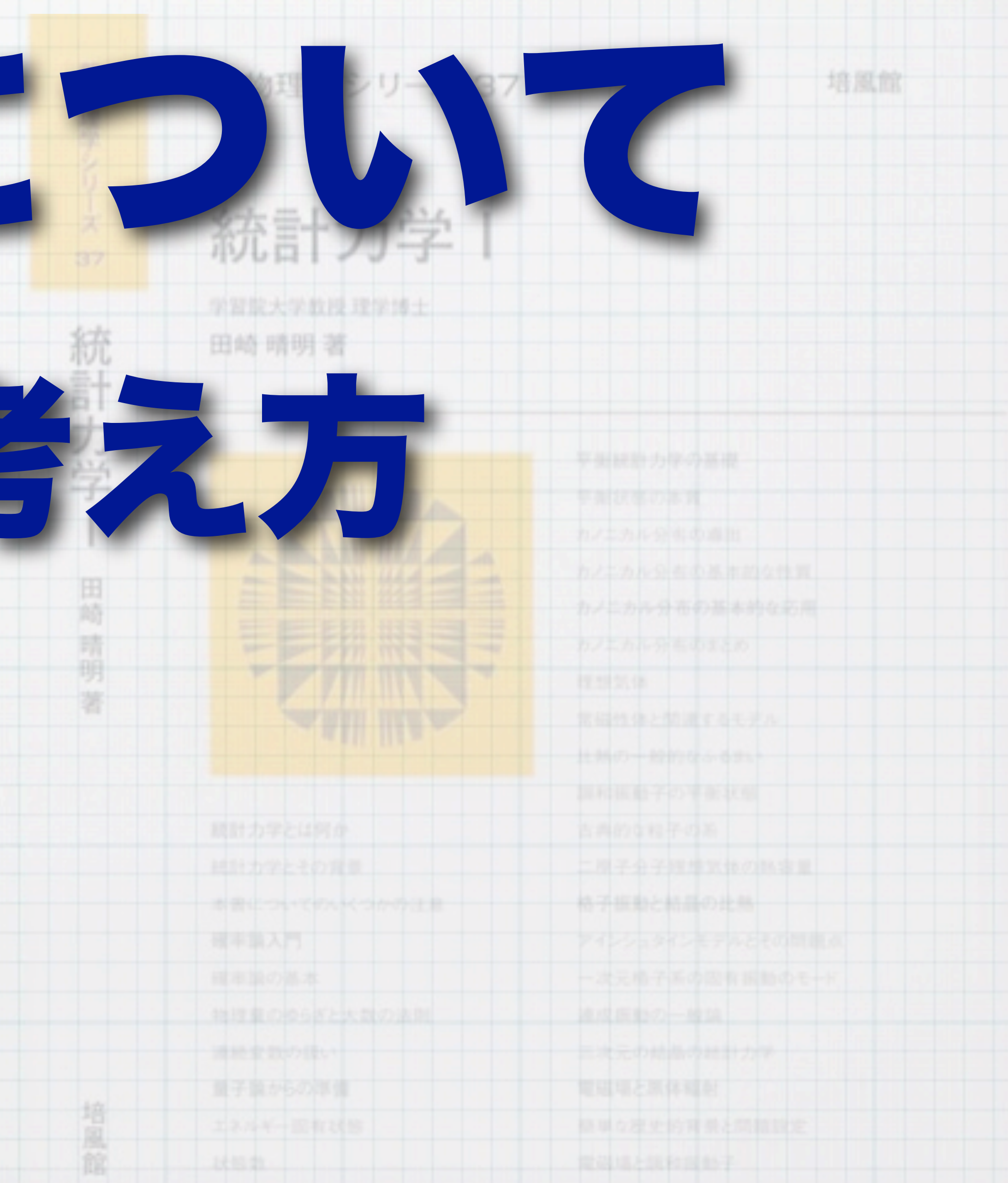
マクロ系の平衡状態を単一の量子力学的純粋状態で記述できる
（しかも、そういう純粋状態はありふれている）

ここで考えること

孤立した量子系における純粋状態のユニタリー時間発展によって平衡状態への緩和を記述し、緩和の時間スケールについて考察する

平衡状態について

基本的な考え方



平衡状態　マクロな視点

孤立したマクロな系の状態は、平衡状態に緩和する

例：純物質の系

平衡状態

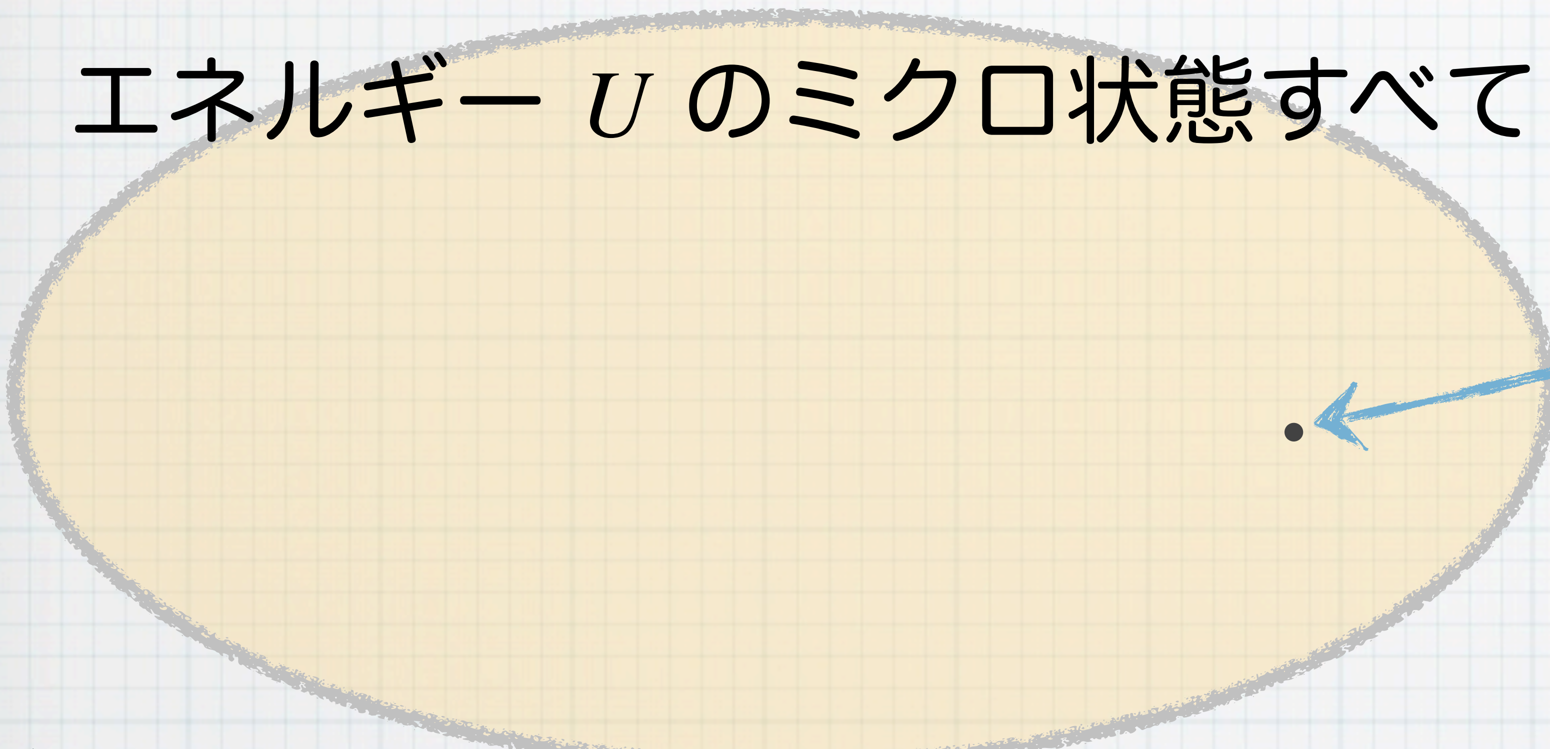
マクロな時間変化なし、マクロな流れなし

少数のマクロな変数（全エネルギー U）を指定すれば、平衡状態は一意的に定まる

（分子数 N と体積 V は固定）

平衡状態　ミクロな視点

ミクロに見れば、エネルギー U の状態は無数にある



$(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N, p_1, \ldots, p_N)$

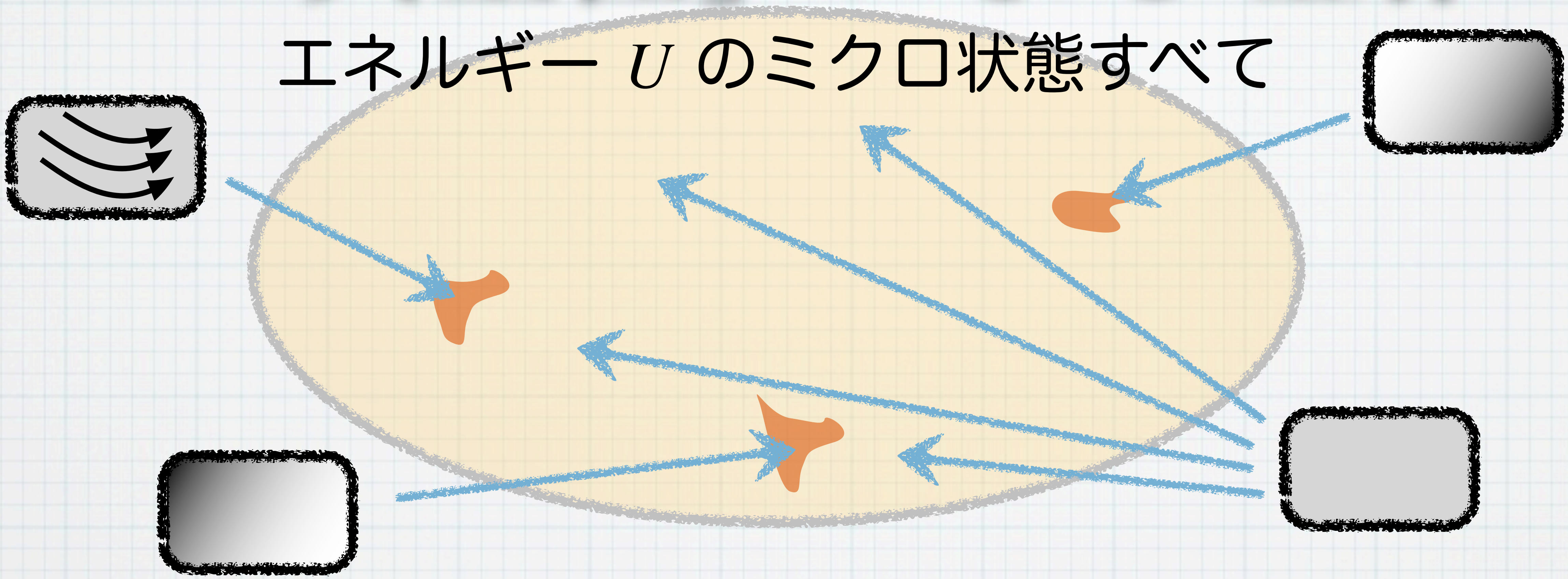
全ての分子の位置
と運動量

統計力学の処方箋
(等重率の原理)

すべてのミクロ状態が等しい重みで出現する確率分布（ミクロカノニカル分布）が平衡状態を記述

何故、これでいいのか？？

「典型性」による理解

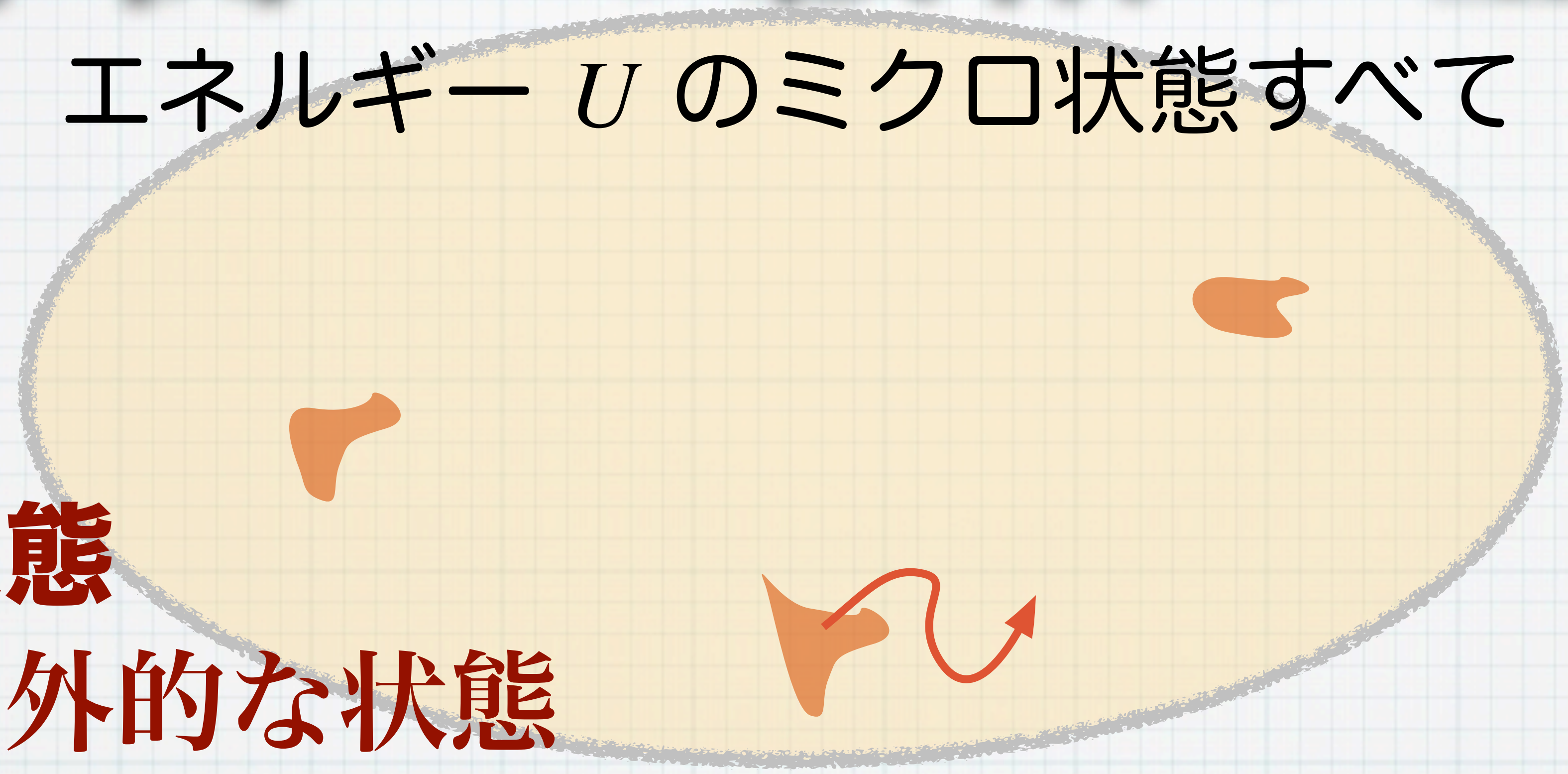


マクロな系では、エネルギー U のミクロ状態のほとんど全ては、マクロに見れば、そっくり

平衡状態　そっくりなミクロ状態が共有する性質
（一様平均すれば、この性質が見える）

単一の（典型的な）ミクロ状態が平衡状態を表現しうる

平衡への緩和の理解



非平衡状態
少数の例外的な状態

緩和

平衡状態
大多数の典型的な状態

Humpty Dumpty sat on a wall,
Humpty Dumpty had a great fall.
All the king's horses and all the king's men
Couldn't put Humpty together again

緩和現象は、ダイナミクスの詳細によらず、きわめて普遍的に見られる（と期待される）

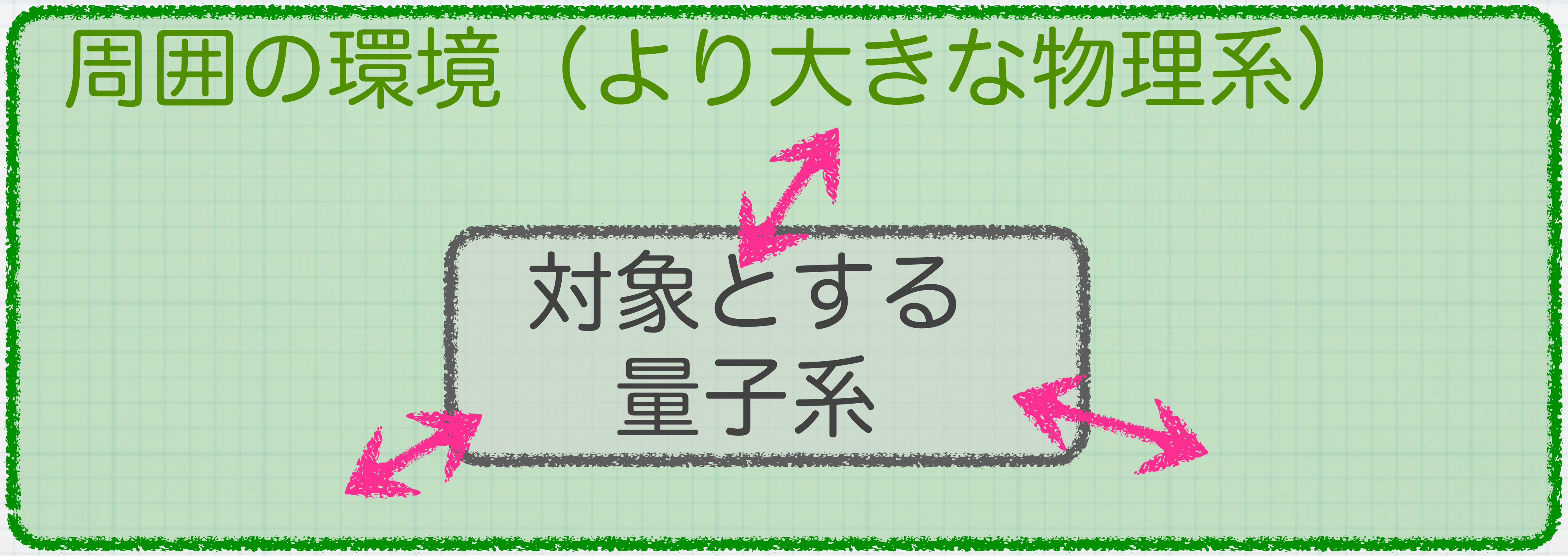
HUMPTY DUMPTY: Original 1912 Nursery Rhyme Childrens Art Print by Henriette Willebeeck le Mair

設定

孤立系量子系

設定についての注意

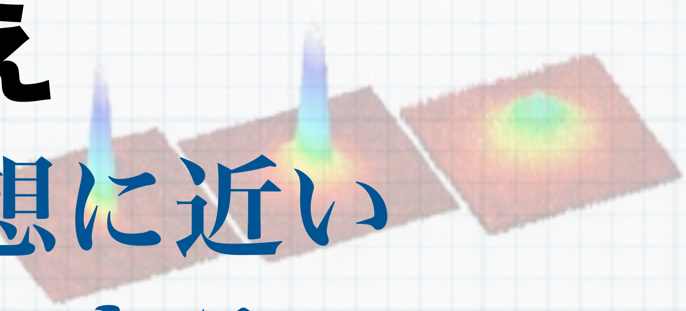
通常の（現実的な）設定



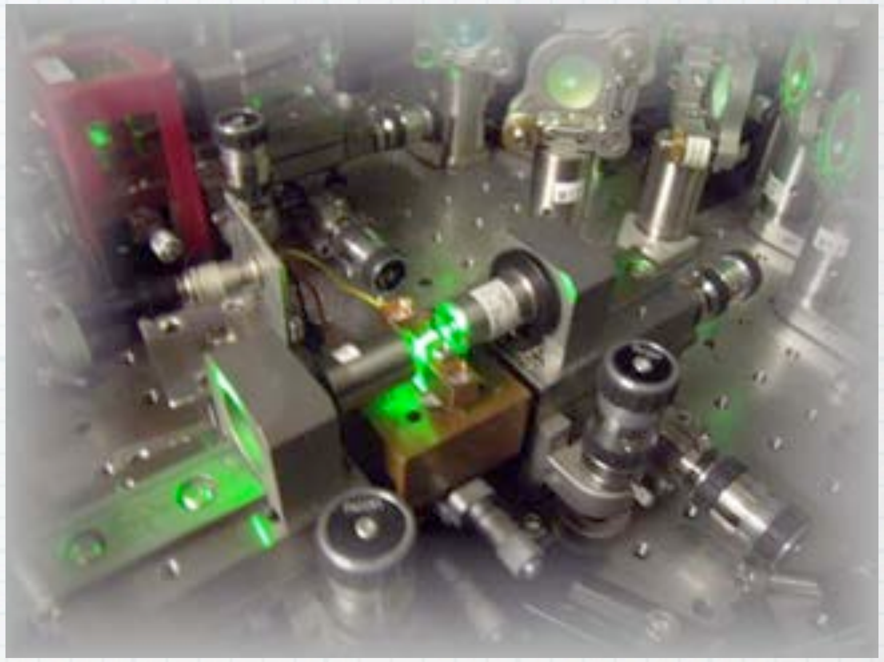
われわれの（明らかに非現実的な）設定

外界から完全に孤立

なぜ孤立量子系か？



普通の（今風の）答え



冷却原子系で、理想に近い
孤立量子系が実現できる

10^7 個の原子集団を 10^{-7} K に冷却

私の（今風でない）答え

これは基礎的な研究で、まだ実際の応用からは限りなく遠い

孤立系では何がおこりえて、何がおこりえないのかをまず知りたい

その上で、必要に応じて、環境との相互作用が果たす役割を研究しよう

ミクロカノニカル部分空間

全ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{tot}}$　　ハミルトニアン $\hat{H}$

エネルギー固有状態 $\hat{H}|\psi_j\rangle = E_j|\psi_j\rangle$　$\langle\psi_j|\psi_j\rangle = 1$

マクロに見れば小さなエネルギー幅

$$U - \Delta U \le E_j \le U$$

任意のエネルギー（固定）

を満たす j に対応する $|\psi_j\rangle$ が張る部分空間 $\mathcal{H}_{\cancel{U}}$

ミクロカノニカル部分空間 $\mathcal{H}$

D 次元 $(D \sim e^{\sigma V})$ 基底は $|\psi_j\rangle$　$j = 1, \ldots, D$

平衡状態の抽象的な扱い

ミクロカノニカル部分空間を「平衡の部分」と「非平衡の部分」に直和分解

射影演算子

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathrm{eq}} \oplus \mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$$

$$|\varphi\rangle = (1 - \hat{P}_{\mathrm{neq}})|\varphi\rangle + \hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi\rangle$$

$\|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi\rangle\|^2 = \langle\varphi|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi\rangle \ll 1$ ならば

$|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ は平衡状態を表わす　$\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$

ミクロカノニカル部分空間 $\mathcal{H}$　次元 $D \sim e^{\sigma V}$

「非平衡」部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$　次元 $d \sim e^{\tilde{\sigma} V}$

$d \ll D$ 平衡状態の典型性

$\tilde{\sigma} < \sigma$　V は体積

非平衡部分空間の具体例

一つのマクロな物理量 $\hat{A}$ に注目　　$O(\hat{A}) = 1$

$\bar{A}$ ミクロカノニカル分布での $\hat{A}$ の期待値

$\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$　演算子 $(\hat{A}-\bar{A})^2$ の δ 以上の固有値に対応する固有状態の張る空間　　$\delta \ll 1$

$$\langle\varphi|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi\rangle \ll 1 \longleftrightarrow \langle\varphi|(\hat{A}-\bar{A})^2|\varphi\rangle \ll 1$$

状態 $|\varphi\rangle$ において物理量 $\hat{A}$ を測定すると、1 に近い確率で $\bar{A}$ に近い値が得られる

純粋状態 $|\varphi\rangle$ は平衡状態！

時間発展と
平衡への接近

平衡への接近と緩和時間

初期状態 $|\varphi(0)\rangle \in \mathcal{H}$ 時間発展 $|\varphi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\varphi(0)\rangle$

いくつかの場合に

$\tau > 0$ について $\displaystyle \frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt \langle\varphi(t)|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi(t)\rangle \ll 1$

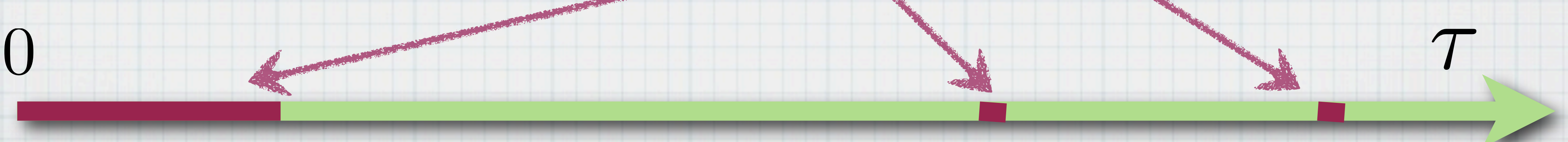
が示される

ほとんどの $t \in (0,\tau]$ について $\langle\varphi(t)|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi(t)\rangle \ll 1$

（$|\varphi(t)\rangle$ は平衡！）

τ は緩和時間の目安

例外（非平衡）



平衡への接近に関する定理 (1)

energy eigenstate thermalization
を仮定する定理

von Neumann 1929

Goldstein, Lebowitz, Mastrodonato, Tumulka, Zanghi 2010

各々のエネルギー固有状態が平衡！

$j \neq j'$ ならば $E_j \neq E_{j'}$

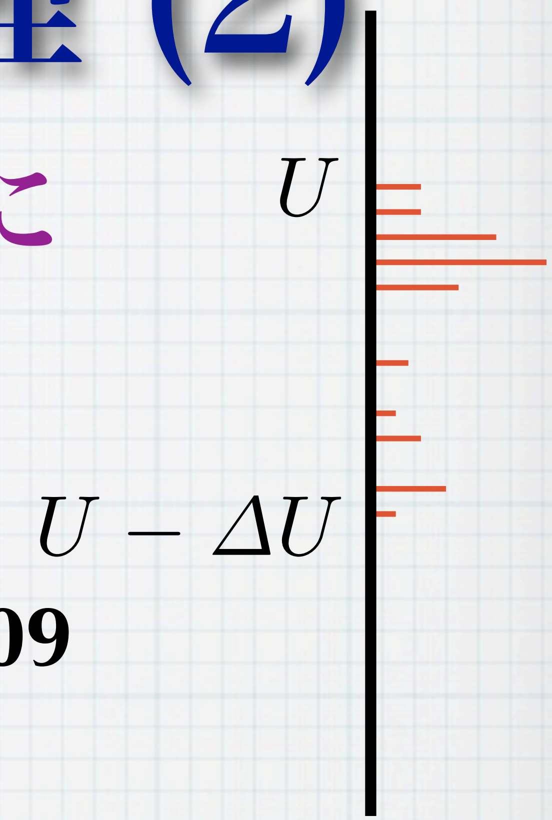
すべての $j = 1, \ldots, D$ について $\langle \psi_j | \hat{P}_{\mathrm{neq}} | \psi_j \rangle \ll 1$

任意の $|\varphi(0)\rangle \in \mathcal{H}$ と十分大きな $\tau > 0$ について

$$\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle \varphi(t) | \hat{P}_{\mathrm{neq}} | \varphi(t) \rangle \ll 1$$ が成り立つ

平衡への接近に関する定理 (2)

初期状態のエネルギー分布が少数の準位に集中していないことを仮定する定理



Tasaki 1998, Reimann 2008

Linden, Popescu, Short, Winter 2009

$j \neq j'$ ならば $E_j \neq E_{j'}$

すべての $j=1,\ldots,D$ について $\bigl|\langle\psi_j|\varphi(0)\rangle\bigr|^2 \ll \dfrac{1}{d}$

$\boxed{\text{十分大きな } \tau>0 \text{ について } \dfrac{1}{\tau}\displaystyle\int_0^\tau dt\langle\varphi(t)|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi(t)\rangle \ll 1 \text{ が成り立つ}}$

（今回の話はこの定理とは直結しない）

証明

初期状態 $|\varphi(0)\rangle = \sum_{j=1}^{D} \alpha_j |\psi_j\rangle$ $\sum_{j=1}^{D} |\alpha_j|^2 = 1$

時間発展 $|\varphi(t)\rangle = \sum_{j=1}^{D} \alpha_j \, e^{-iE_j t} |\psi_j\rangle$

$$\langle\varphi(t)|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi(t)\rangle = \sum_{j,k} \alpha_j^* \alpha_k \, e^{i(E_k - E_j)t} \langle\psi_j|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\psi_k\rangle$$

準周期的　緩和しない

長時間平均をとると

$$\lim_{\tau\uparrow\infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle\varphi(t)|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi(t)\rangle = \sum_j |\alpha_j|^2 \langle\psi_j|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\psi_j\rangle$$

energy eigenstate thermalization を仮定

$$\leq \Big(\sum_j |\alpha_j|^2\Big) \max_j \langle\psi_j|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\psi_j\rangle = \max_j \langle\psi_j|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\psi_j\rangle \ll 1$$

初期状態がエネルギー分布をもつことを仮定

$$\leq \Big(\max_j |\alpha_j|^2\Big) \sum_j \langle\psi_j|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\psi_j\rangle = \Big(\max_j |\alpha_j|^2\Big) \mathrm{Tr}[\hat{P}_{\mathrm{neq}}] \ll \frac{1}{d}\, d = 1$$

証明（続き）

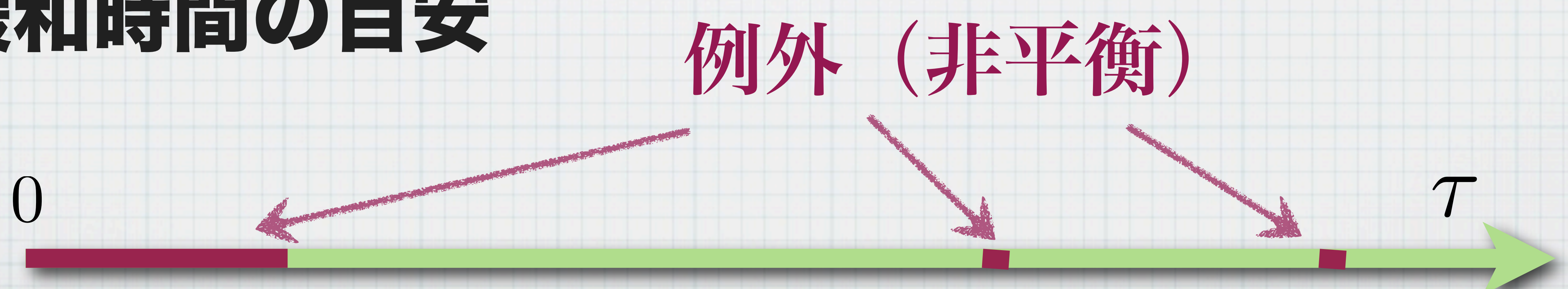
長時間平均について $\displaystyle \lim_{\tau\uparrow\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt\langle\varphi(t)|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi(t)\rangle =: \varepsilon \ll 1$

十分大きい τ について $\displaystyle \frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt\langle\varphi(t)|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi(t)\rangle \le 2\varepsilon \ll 1$

時間スケールの問題

この証明からでは、τ をどれくらい大きく取れば十分なのかわからない

τ は緩和時間の目安



緩和の時間スケール

部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ についての注意

実際の物理系での非平衡部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ は
着目する物理量などから自然に決まる

具体的な系で、あるいは一般的に、$\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ を
特徴づけるのは（今は）困難 → 将来の課題

$\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ を $\mathcal{H}$ の一般的な部分空間として扱う

ミクロカノニカル部分空間 $\mathcal{H}$ 次元 D

「非平衡」部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ 次元 d

$d \ll D$ 平衡状態の典型性

異常に遅い緩和がありうる

定理　energy eigenstate thermalization の仮定を満たす d 次元部分空間 $\mathcal{H}_{\rm neq}\subset\mathcal{H}$ が存在し、任意の $|\varphi(0)\rangle\in\mathcal{H}_{\rm neq}$ と $0<\tau\le\dfrac{h}{12\Delta U}d$ について

$$\frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt\langle\varphi(t)|\hat{P}_{\rm neq}|\varphi(t)\rangle\ge\frac{3}{\pi}>0.95$$

Goldstein, Hara, Tasaki, Phys. Rev. Lett. 111 (2013)

任意の $|\eta\rangle\in\mathcal{H}$ に対して、$|\eta\rangle$ を含む $\mathcal{H}_{\rm neq}$ が選べる

緩和時間 $\gg h\,d/\Delta U$

$d\sim e^{\tilde{\sigma}V}$ なので緩和にかかる時間はきわめて長い

数学的には、緩和時間が宇宙年齢より長い例が作れる

異常に速い緩和もありうる

定理 d 次元部分空間 $\mathcal{H}_{\rm neq} \subset \mathcal{H}$ が存在し、
任意の $|\varphi(0)\rangle \in \mathcal{H}$ と $\tau > 0$ について

$$\frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt\langle\varphi(t)|\hat{P}_{\rm neq}|\varphi(t)\rangle \le 6\sqrt{\frac{\hbar}{\tau\,\Delta U}}$$

Goldstein, Hara, Tasaki, Phys. Rev. Lett. 111 (2013)

緩和時間 $\sim h/\Delta U$

これは一般にきわめて短時間

しかも $\Delta U \propto V$ とすれば系のサイズが大きいほど
緩和が速いことになる！

緩和の時間スケール？

d 次元部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{neq}} \subset \mathcal{H}$ を（人工的に）作れば

緩和時間 $\gg h\,d/\Delta U$ **異常に遅い緩和**

緩和時間 $\sim h/\Delta U$ **異常に速い緩和**

がある

Goldstein, Hara, Tasaki, Phys. Rev. Lett. 111 (2013)

一般的な d 次元部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{neq}} \subset \mathcal{H}$
に対応する緩和時間は？

もし一般的な部分空間に「まっとうな緩和時間」が対応するなら、現実的な部分空間に「まっとうな緩和時間」が対応する有力な裏付けになるだろう

「典型的」な系での緩和

$d \ll D$

Goldstein, Hara, Tasaki, 2014

$\mathcal{H}$ の d 次元部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ をランダムに選ぶ

定理　1 に近い確率で以下が成立する

任意の初期状態 $|\varphi(0)\rangle \in \mathcal{H}$ について

$$\frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt\langle\varphi(t)|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi(t)\rangle \lesssim \frac{\tau_{\mathrm{B}}}{\tau}$$

Boltzmann 時間 $\tau_{\mathrm{B}} := h/(k_{\mathrm{B}}T)$

$$k_{\mathrm{B}}T = \left\{\partial \log \rho(U)/\partial U\right\}^{-1}$$

$\rho(E)$ 状態密度

$\tau \gg \tau_{\mathrm{B}}$ ならば、系はほぼ完全に緩和する

$T \sim 300$ K $\longrightarrow$ $\tau_{\mathrm{B}} \sim 10^{-13}$ s

ほとんど全ての量子系は 1 μs 以下で平衡化する！

典型的な系と現実の系

「典型的な」量子系は 1 μs 以下で平衡化する！
（系の詳細にも大きさにもよらない！！！）

別の状況でも類似の速い緩和 Brandao et al., Cramer, Marabalba et al. Ikeda and Watanabe

「典型的な」系と現実の系のふるまいは違う！

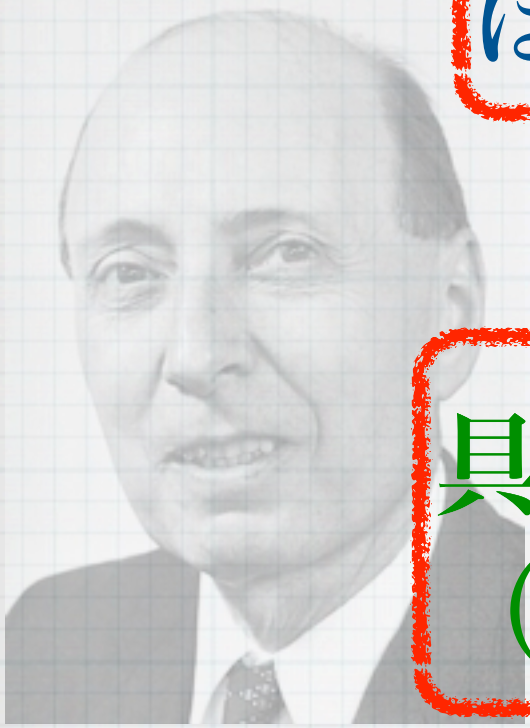
この定理での $\mathcal{H}_{\rm neq}$

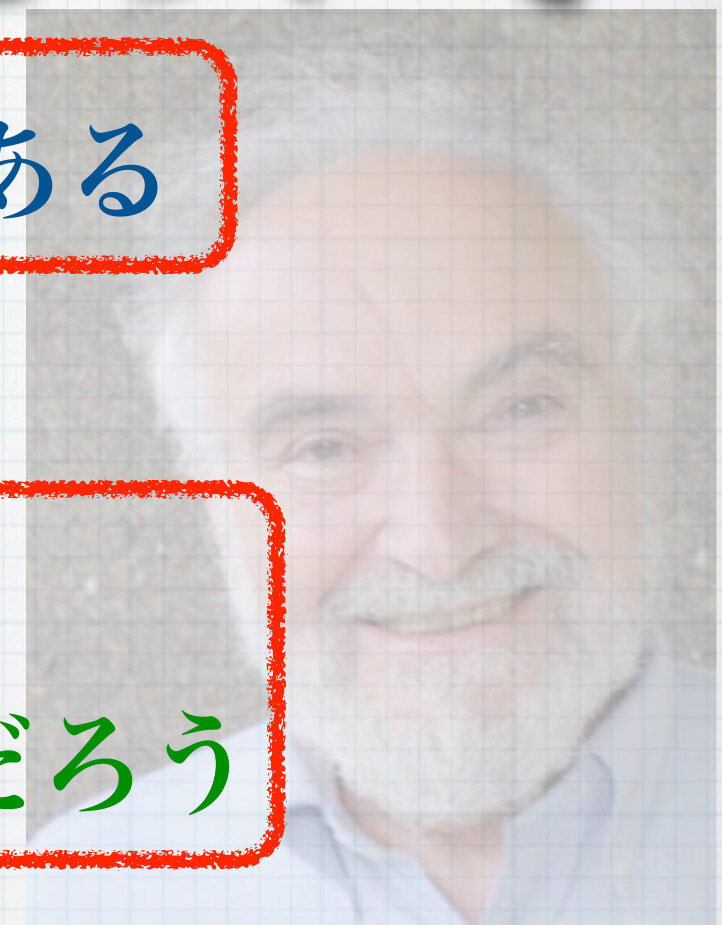
ランダムな d 次元の部分空間

現実的な $\mathcal{H}_{\rm neq}$

われわれが興味をもっている物理量（多くは、局所的な保存量の和）の値に基づいて定まる d 次元の部分空間

「典型性による論法」について



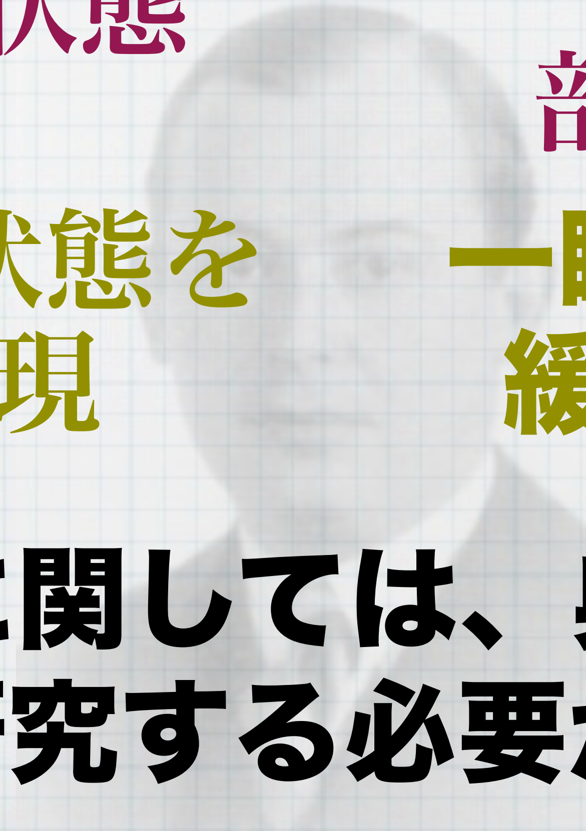


ほとんど全ての⬟で、★である

↓

具体的な（現実的な）⬟でも、
（特別の理由がなければ）★だろう

⬟	少数多体系のモデルハミルトニアン	純粋状態	非平衡部分空間
★	Wigner 半円則が成立	平衡状態を表現	一瞬で平衡に緩和！！！



量子系における平衡への緩和に関しては、典型性を超えて、具体的な系の性質を研究する必要がある

典型的な系での緩和

$d \ll D$

Goldstein, Hara, Tasaki 2014

$\mathcal{H}$ の d 次元部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ をランダムに選ぶ

定理　1 に近い確率で以下が成立する

任意の初期状態 $|\varphi(0)\rangle \in \mathcal{H}$ について

$$\frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt \langle\varphi(t)|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi(t)\rangle \lesssim \frac{\tau_{\mathrm{B}}}{\tau}$$

Boltzmann 時間 $\tau_{\mathrm{B}} := h/(k_{\mathrm{B}}T)$

$$k_{\mathrm{B}}T = \left\{\partial \log \Omega(U)/\partial U\right\}^{-1} \qquad \Omega(E) \text{ 状態数}$$

$\tau \gg \tau_{\mathrm{B}}$ ならば、系はほぼ完全に緩和する

$T \sim 300$ K $\longrightarrow$ $\tau_{\mathrm{B}} \sim 10^{-13}$ s

ほとんど全ての量子系は 1 μs 以下で平衡化する！

証明の流れ (1/2)

初期状態 $|\varphi(0)\rangle = \sum_{j=1}^{D} \alpha_j |\psi_j\rangle \qquad \sum_{j=1}^{D} |\alpha_j|^2 = 1$

時間発展 $|\varphi(t)\rangle = \sum_{j=1}^{D} \alpha_j \, e^{-iE_j t} |\psi_j\rangle$

$$\frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt \langle\varphi(t)|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\varphi(t)\rangle = \frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt \sum_{j,k=1}^{D} \alpha_j^* \alpha_k e^{i(E_j - E_k)} P_{jk}$$

$$= \sum_{j,k=1}^{D} \alpha_j^* \, Q_{jk} \, \alpha_k \le \lambda_{\max}$$

行列 Q の最大固有値

$\boxed{Q_{jk} = P_{jk} \, S_{jk}}$ **Hadamard 積**

ランダムな射影行列

$$P_{jk} = \langle\psi_j|\hat{P}_{\mathrm{neq}}|\psi_k\rangle$$

時間平均行列

$$S_{jk} = \frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt \, e^{i(E_j - E_k)t/\hbar}$$

証明の流れ (2/2)

$Q_{jk} = P_{jk}\, S_{jk}$ Hadamard 積

ランダムな射影行列

$$P_{jk} = \langle \psi_j | \hat{P}_{\mathrm{neq}} | \psi_k \rangle$$

時間平均行列

$$S_{jk} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt\, e^{i(E_j - E_k)t/\hbar}$$

$\lambda_{\max}$ 行列 Q の最大固有値

$\mu_{\max}$ 行列 S の最大固有値

$\boxed{\textbf{定理}\quad \textbf{1 に近い確率で } \lambda_{\max} \lesssim \frac{\mu_{\max}}{D}}$

命題 行列 S の最大固有値について $\mu_{\max} \lesssim D\, \frac{\tau_{\mathrm{B}}}{\tau}$

これら二つから

$$\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle \varphi(t) | \hat{P}_{\mathrm{neq}} | \varphi(t) \rangle \le \lambda_{\max} \lesssim \frac{\tau_{\mathrm{B}}}{\tau}$$

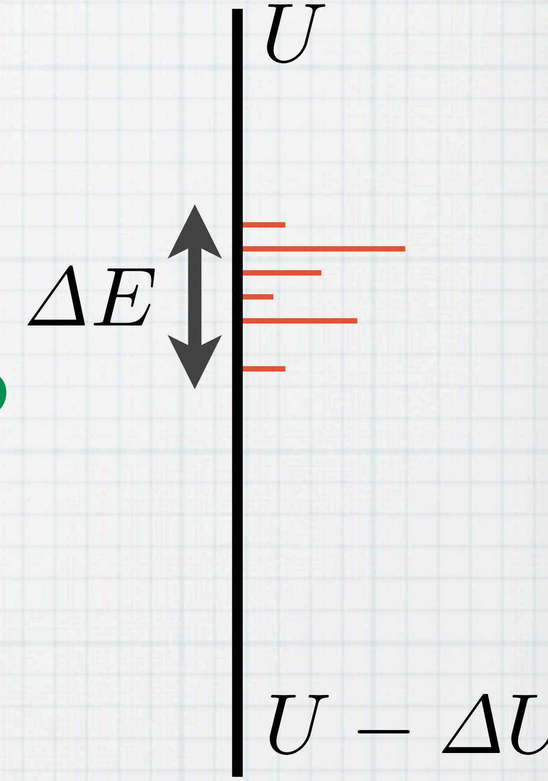
時間スケールを決める要因

一つの状態からの脱出時間

エネルギー幅 ΔE の任意の状態 $|\xi\rangle = \sum_{j=1}^{D} \xi_j |\psi_j\rangle$

$$E_j \in [\bar{E}, \bar{E} + \Delta E] \subset [U - \Delta U, U]$$

でなければ ξ_j は実質的に無視できる



時間発展する状態

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_{j=1}^{D} \alpha_j \, e^{-iE_j t} |\psi_j\rangle$$

$|\xi\rangle$ との重なり

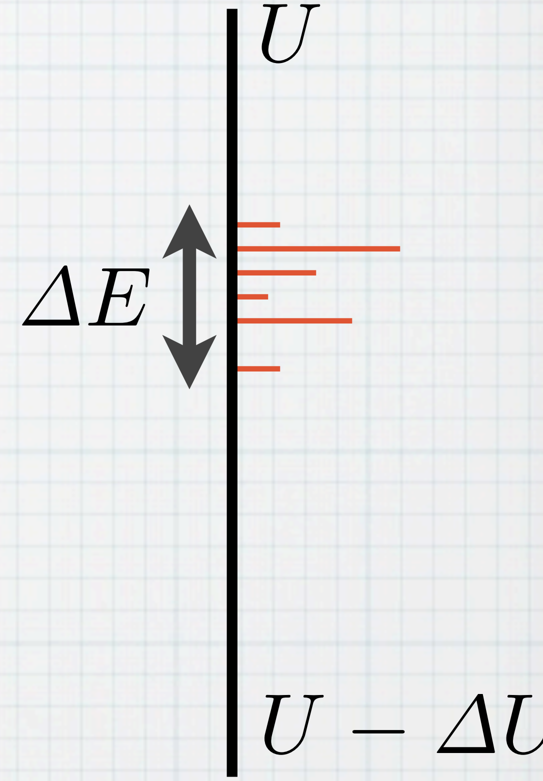
$$\langle \xi | \varphi(t) \rangle = \sum_{j=1}^{D} \xi_j^* \alpha_j \, e^{-iE_j t}$$

一つの状態からの脱出時間

$$\langle\xi|\varphi(t)\rangle = \sum_{j=1}^{D} \xi_j^* \alpha_j \, e^{-iE_j t}$$

ΔE 以下

$$\boxed{\left|\langle\xi|\varphi(t)\rangle\right|} = \left|\sum_{j=1}^{D} \xi_j^* \alpha_j \, e^{-i(E_j - \bar{E})t}\right|$$



$\dfrac{\hbar}{\Delta E}$ 程度の時間で変化

（「時間とエネルギーの不確定性関係」）

$|\xi\rangle$ の近傍から脱出するのに必要な時間 $\tau_{\mathrm{esc}} \sim \dfrac{\hbar}{\Delta E}$

部分空間からの脱出時間（緩和時間）

d 次元部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ の基底 $|\xi^{(1)}\rangle, \ldots, |\xi^{(d)}\rangle$

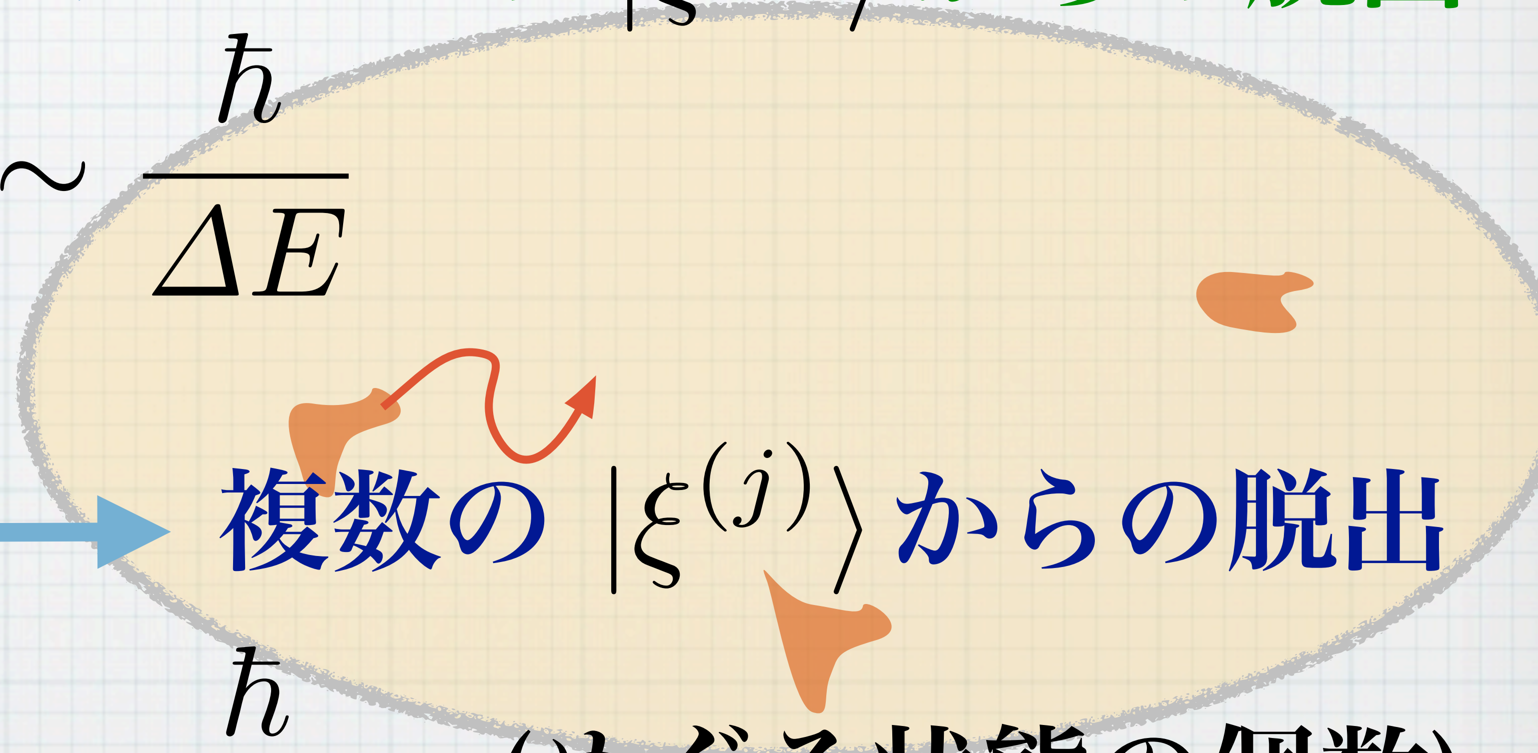
各々の $|\xi^{(j)}\rangle$ のエネルギー幅 ΔE

簡単なシナリオ 1（これまでの例はこれにあてはまる）

$\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ からの脱出 $\longleftrightarrow$ 一つの $|\xi^{(j)}\rangle$ からの脱出

$$\text{緩和時間} \sim \frac{\hbar}{\Delta E}$$

簡単なシナリオ 2



$\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ からの脱出 $\longleftrightarrow$ 複数の $|\xi^{(j)}\rangle$ からの脱出

$$\text{緩和時間} \sim \frac{\hbar}{\Delta E} \times (\text{めぐる状態の個数})$$

現実的な非平衡部分空間では？？？

緩和の時間スケールについて

緩和時間が宇宙年齢よりも長くなるような部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ が存在する

遅すぎる！

現実はこれら二つの定理の間にある
われわれは未だ緩和の本質を理解していない

速すぎる！

典型的な $\mathcal{H}_{\mathrm{neq}}$ については、
緩和時間はボルツマン時間のオーダー

まとめ

平衡状態＝「マクロな系でのありふれた状態の共通の性質」という描像に基づき、孤立量子系での平衡状態への緩和を議論した

いくつかの仮定（energy eigenstate thermalization, 初期状態のエネルギー分布）のもとで平衡状態への緩和があることを証明できる

緩和が異常に遅い例、異常に速い例を人工的に作ることができる

「典型的」な非平衡部分空間については、緩和に必要な時間はボルツマン時間のオーダーである