
非平衡量子ダイナミクスに関する 近年の理論的進展

濱崎立資

(理化学研究所 非平衡量子統計力学理研白眉研究チーム)

CREST workshop 2023/3/27-29, online

Ref) Z. Gong and R. Hamazaki, International Journal
of Modern Physics B 36 (31), 2230007 (2022).

本講演のモチベーション

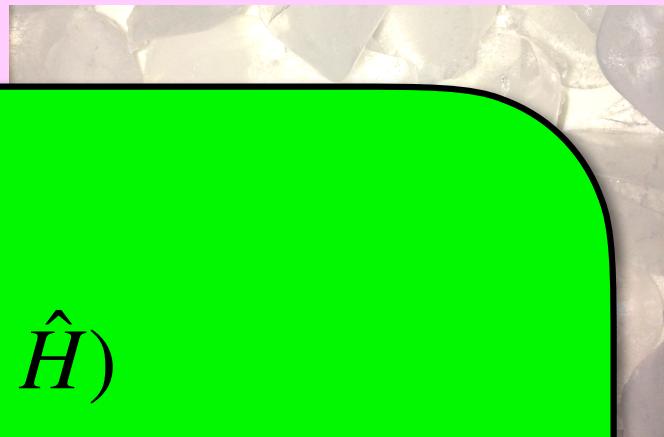
古典力学・量子力学
(ミクロスケール)

原子・分子等の動力学



熱力学
(マクロスケール)

温度、体積、圧力、…



統計力学

$$\hat{\rho}_{\text{mic}} \propto \delta(E - \hat{H})$$

平衡統計力学がなぜ正しいかは未解明
非平衡統計力学は基本原理すら不明

本講演のモチベーション

古典力学・量子力学
(ミクロスケール)
原子・分子等の動力学

ミクロな量子力学から
量子統計力学の普遍性を
追求したい

統計力学

$$\hat{\rho}_{\text{mic}} \propto \delta(E - \hat{H})$$

平衡統計力学がなぜ正しいかは未解明
非平衡統計力学は基本原理すら不明

本講演のアウトライン

Part I. 平衡統計力学の量子力学からの基礎づけ

Part II. 非平衡遷移に関する厳密なバウンド

Part III. 外界と接触した量子系の非平衡ダイナミクス
(時間があれば)

Part I.
平衡統計力学の量子力学からの基礎づけ

Part Iのアウトライン

1. モチベーション
2. 孤立量子系の熱平衡化の基礎理論
3. (非) 可積分性と熱平衡化
4. 热平衡化しない非可積分系
5. ETHの普遍性 (我々の研究の紹介)

1. イントロダクション

参考文献：

(多体ダイナミクスの理論的オーバービュー)

*A. Polkovnikov et al., Rev. Mod. Phys. 83, 863 (2011)

*J. Eisert et al., Nature Physics 11, 124–130 (2015)

孤立量子系の統計力学の目標

ミクロな動力学から平衡統計力学を正当化したい

$$\langle \psi(0) | \hat{O} | \psi(0) \rangle \xrightarrow[\text{ユニタリー時間発展}]{\text{?}} \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{mic}} \hat{O}]$$

ミクロカノニカル分布
(平衡統計力学)

1929年のJ. von Neumannに始まる問題

2000年代後半から急速に発展



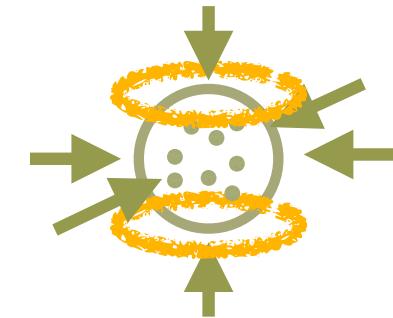
https://en.wikipedia.org/wiki/John_von_Neumann#/media/File:JohnvonNeumann-LosAlamos.gif

人工量子系を用いた孤立量子系の実現

冷却原子系

- mK以下に冷却した原子集団をレーザーで真空中に閉じ込め

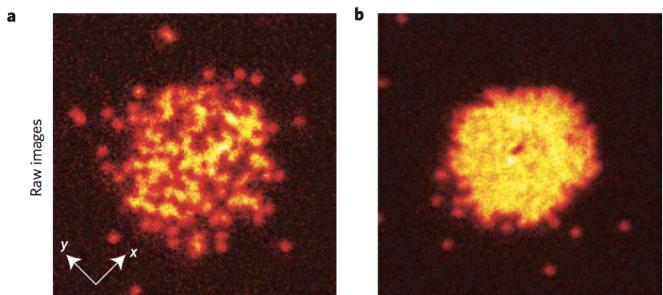
超高真空、極低温



→ ほとんど孤立した量子系、ノイズフリーなSchrödinger方程式

→ ハミルトニアンを比較的自由に制御！
(相互作用、格子の形、次元など)

- 観測技術の発展
(運動量空間・実空間の粒子分布)



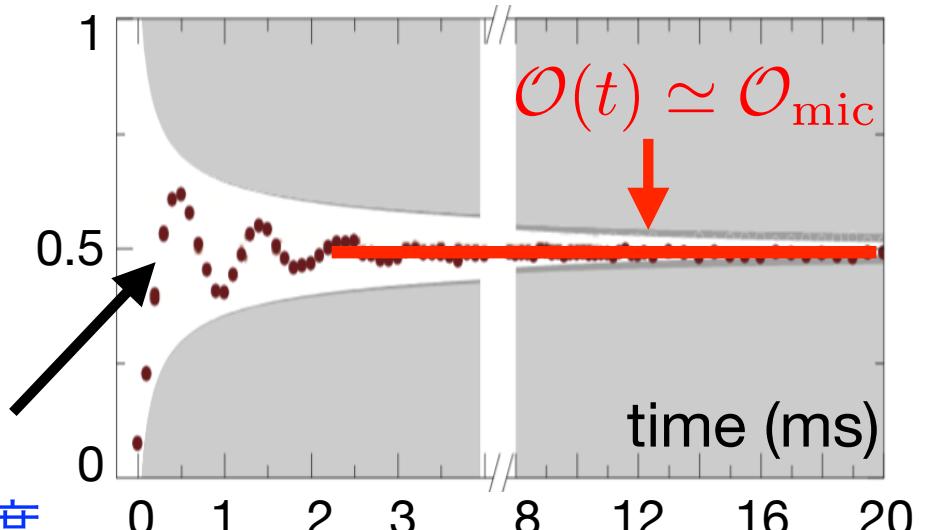
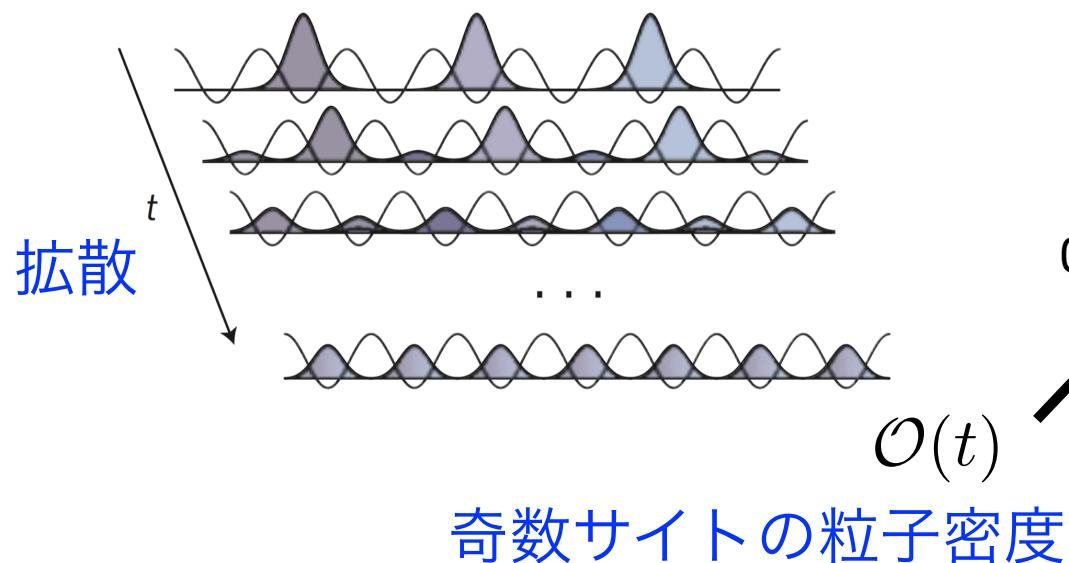
その他イオン系、Rydberg原子系など

J. F. Sherson et al.,
Nature 467,
68–72 (2010)

熱平衡化の冷却原子実験

格子上の原子集団の熱平衡化

初期状態：偶数サイトのみに粒子を局在



S. Trotzky et al.,

Nat. Phys. 8, 325–330 (2012).

非熱平衡化の実験も存在

T. Kinoshita et al., Nature (2006).; T. Langen et al., Science (2015).

熱平衡化が起こるかは非自明な問題

2. 孤立量子系の熱平衡化の基礎理論

参考文献：

(Eigenstate thermalization hypothesisと量子カオス)

*L. D'Alessio et al., Advances in Physics 65.3 (2016)

(数学的議論)

*T. Mori et al., Journal of Physics B 51 (11), 112001 (2018)

*C. Gogolin and J. Eisert, Reports on Progress in Physics 79.5 (2016)

純粹状態による熱平衡状態の記述

初期状態を純粹状態に取る

$$|\psi\rangle$$

→ 時間発展後も純粹状態のまま

$$|\psi_t\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi\rangle$$

状態のレベルではミクロカノニカル分布とは異なる

$$\hat{\rho}_t = |\psi_t\rangle \langle \psi_t| \neq \hat{\rho}_{\text{mic}} \quad \hat{\rho}_{\text{mic}}(E) = \frac{1}{d_{\text{mic}}} \sum_{\alpha: |E_\alpha - E| \leq \delta E} |E_\alpha\rangle \langle E_\alpha|$$

統計力学で興味のある物理量 \hat{O} に着目すれば、

$\hat{\rho}_t$ が熱平衡値を与える場合がある

$$\mathcal{O}(t) = \text{Tr}[\hat{\rho}_t \hat{O}] \simeq \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{mic}} \hat{O}]$$

$\text{Tr}[\hat{\rho}\hat{O}] \simeq \text{Tr}[\hat{\sigma}\hat{O}]$ とは、熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ で sub-extensive な

項を無視して一致すること

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{|\text{Tr}[\hat{\rho}\hat{O}] - \text{Tr}[\hat{\sigma}\hat{O}]|}{\|\hat{O}\|_\infty} = 0$$

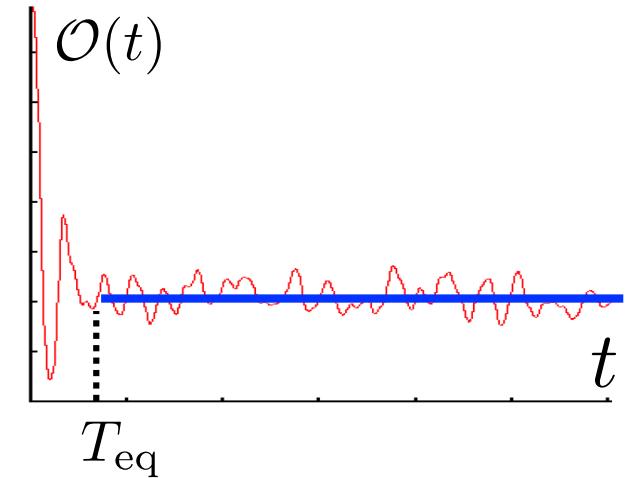
熱平衡化とは？

ある緩和時間 T_{eq} が存在し

$\forall t \geq T_{\text{eq}}$ において

$\mathcal{O}(t) \simeq \mathcal{O}_{\text{mic}}$ を要求？

$$\mathcal{O}(t) = \langle \psi_t | \hat{\mathcal{O}} | \psi_t \rangle, \quad \mathcal{O}_{\text{mic}} = \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{mic}} \hat{\mathcal{O}}]$$



有限次元のヒルベルト空間（有限サイズのスピン系など）
では再帰現象のため上式は成り立たない

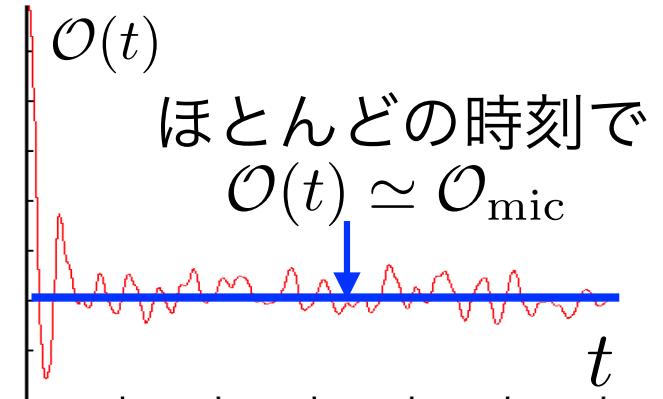
任意の $\epsilon > 0$ に対しある T_{rec} が存在し $\| |\psi(T_{\text{rec}}) \rangle - |\psi_0 \rangle \| \leq \epsilon$

熱平衡化とは？

本発表での熱平衡化の定義：

ほとんどの時刻で $\mathcal{O}(t) \simeq \mathcal{O}_{\text{mic}}$ の時、

「 $\hat{\mathcal{O}}$ が熱平衡化する」と定義する



(注：文献によって定義は異なる)

正確には任意の $\delta > 0$ に対し

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \text{Prob}_{t \in [0, T]} \left[\frac{|\text{Tr}[\hat{\rho}_t \hat{\mathcal{O}}] - \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{mic}}(E) \hat{\mathcal{O}}]|}{\|\hat{\mathcal{O}}\|_\infty} > \delta \right] = 0$$

一様測度

以下では一般性を失わず $\|\hat{\mathcal{O}}\|_\infty = 1$ とする

熱平衡化の条件

ほとんどの時間で $\mathcal{O}(t) \simeq \mathcal{O}_{\text{mic}}$ となるには？

① 定常状態へ緩和するか

ほとんどの時間で $\mathcal{O}(t) \simeq \overline{\mathcal{O}(t)}$ を要求

$\leftarrow \Delta \mathcal{O}_t^2 := \overline{[\mathcal{O}(t) - \overline{\mathcal{O}(t)}]^2}$ が十分小さい

時間揺らぎ

正確には $\lim_{N \rightarrow \infty} \Delta \mathcal{O}_t = 0$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \text{Prob}_{t \in [0, T]} \left[|\mathcal{O}(t) - \overline{\mathcal{O}(t)}| > \delta' \right] < \frac{\Delta \mathcal{O}_t^2}{\delta'^2}$$

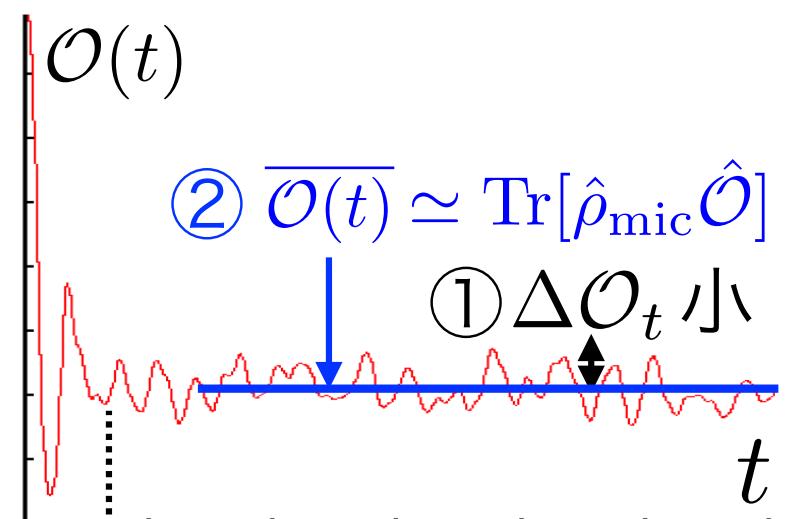
② 長時間平均が熱平衡分布で記述されるか

$$\overline{\mathcal{O}(t)} \simeq \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{mic}} \hat{\mathcal{O}}]$$

$$\overline{A} := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(t) dt$$

J. von Neumann,
Zeit. fur. Phys. (1929)

M. Srednicki, PRE (1994)



量子系での熱平衡化

初期状態の時間発展 $\hat{\rho}(t) = e^{-i\hat{H}t} |\psi_0\rangle \langle\psi_0| e^{i\hat{H}t}$

スペクトル分解 $\hat{H} = \sum_{\alpha} E_{\alpha} |E_{\alpha}\rangle \langle E_{\alpha}|$ を利用し

$$\mathcal{O}(t) = \text{Tr}[\hat{\rho}(t)\hat{\mathcal{O}}] = \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha}^* c_{\beta} e^{i(E_{\alpha} - E_{\beta})t} \mathcal{O}_{\alpha\beta}$$

$$\mathcal{O}_{\alpha\beta} := \langle E_{\alpha} | \hat{\mathcal{O}} | E_{\beta} \rangle \quad c_{\alpha} := \langle E_{\alpha} | \psi_0 \rangle$$

エネルギー固有値についての仮定

(非縮退) $E_{\alpha} = E_{\beta} \Rightarrow \alpha = \beta$

(非共鳴) $E_{\alpha} - E_{\beta} = E_{\gamma} - E_{\delta} \neq 0 \Rightarrow \alpha = \gamma, \beta = \delta$

→ 時間平均が実行可能

量子系での熱平衡化

時間平均を実行

- ① ある定常状態へ緩和するか

$$\Delta \mathcal{O}_t^2 = \sum_{\alpha \neq \beta} |c_\alpha|^2 |c_\beta|^2 |\mathcal{O}_{\alpha\beta}|^2 \text{ が小さい}$$

$$c_\alpha := \langle E_\alpha | \psi_0 \rangle$$

$$\mathcal{O}_{\alpha\beta} := \langle E_\alpha | \hat{\mathcal{O}} | E_\beta \rangle$$

正確には $\lim_{N \rightarrow \infty} \Delta \mathcal{O}_t = 0$

- ② 長時間平均が熱平衡分布で

記述されるか

$$\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 \mathcal{O}_{\alpha\alpha} \simeq \mathcal{O}_{\text{mic}}$$

一般には初期状態と行列要素に依存

← 行列要素に関してETHを仮定すると、

初期状態の詳細に依存せず条件を達成

Eigenstate thermalization hypothesis (ETH)

物理量の行列要素に着目 $\mathcal{O}_{\alpha\beta}$

・ $\hat{\mathcal{O}}$ についての非対角項に関するETH：

(興味あるエネルギー領域内の)

全ての $|E_\alpha\rangle, |E_\beta\rangle$ に対し $\mathcal{O}_{\alpha\beta} \rightarrow 0$ (熱力学極限 $V \rightarrow \infty$)
 $(E_\alpha \neq E_\beta)$

→任意の初期状態について $\hat{\mathcal{O}}$ の定常状態への緩和を正当化

$$\Delta \mathcal{O}_t^2 = \sum_{\alpha \neq \beta} |c_\alpha|^2 |c_\beta|^2 |\mathcal{O}_{\alpha\beta}|^2$$

J. von Neumann, Zeit. fur. Phys. (1929);
M. Srednicki, PRE (1994)

$$\leq [\max_{\alpha \neq \beta} |\mathcal{O}_{\alpha\beta}|]^2 \sum_{\alpha\beta} |c_\alpha|^2 |c_\beta|^2$$

$$\leq [\max_{\alpha \neq \beta} |\mathcal{O}_{\alpha\beta}|]^2 \rightarrow 0$$

ETH

Eigenstate thermalization hypothesis (ETH)

- \hat{O} についての（対角項に関する）ETH

エネルギーシェル $[E - \delta E/2, E + \delta E/2]$ 内の全ての $|E_\alpha\rangle$ に対し
 $|\mathcal{O}_{\alpha\alpha} - \mathcal{O}_{\beta\beta}|$ が熱力学極限で無視できる $[\forall \alpha \quad \mathcal{O}_{\alpha\alpha} \rightarrow O_m(E)]$
系のサイズに対し subextensive
(subextensiveな誤差は除く)

→ エネルギー揺らぎの小さいすべての初期状態に対し

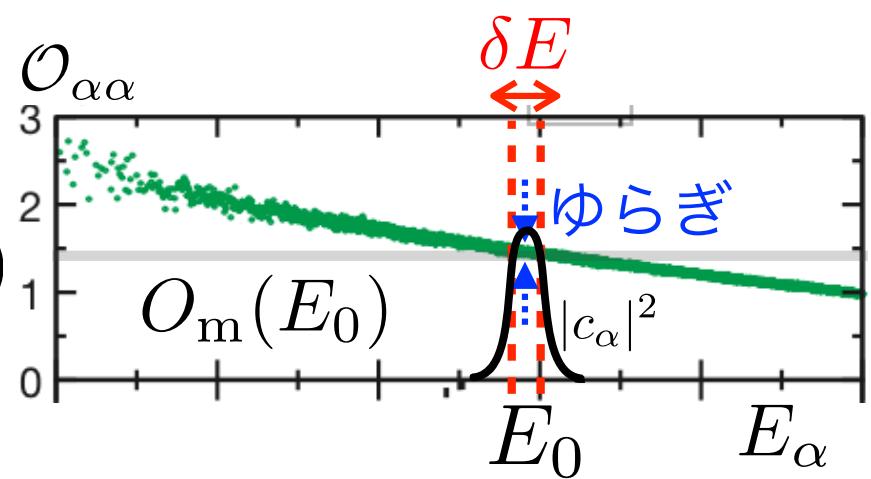
$$\overline{\mathcal{O}(t)} \simeq \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{mic}} \hat{O}] \text{を正当化}$$

$$\overline{\mathcal{O}(t)} =$$

$$\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 \frac{\langle E_{\alpha} | \hat{O} | E_{\alpha} \rangle}{\simeq O_m(E_0)} \simeq \langle \hat{O} \rangle_{\text{mic}}(E_0)$$

規格化

ETH



M. Rigol et al., Nature 452, 854–858 (2008)

ここまでまとめ

熱平衡化では、再起現象を考慮し、ほとんどの時間で
量子期待値が熱平衡値に近いことを要求する

ほとんどの時間で量子期待値が熱平衡値に近い
←ほとんどの時間である定常値にとどまる
& その定常値が熱平衡値である

ETH（ハミルトニアンに対する仮説）を認めれば、
初期状態によらず熱平衡化を示せる

3. (非) 可積分性と熱平衡化

参考文献 :

(非可積分系の熱平衡化)

*L. D'Alessio et al., Advances in Physics 65.3 (2016)

(可積分系と一般化Gibbs分布)

*L. Vidmar and M. Rigol, J. Stat. Mech. (2016) 064007

*F. H. L. Essler and M. Fagotti, J. Stat. Mech. (2016) 064002

量子多体系の分類

非可積分系...可積分系ではない系

→多くの模型でETH、熱平衡化が確認されている

$$\hat{H} = \sum \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + g \hat{\sigma}_i^x + h \hat{\sigma}_i^z$$

可積分系

多くの系で
ETHが成立

ETHの破れ

同一エネルギーシェル内で、局所スピンの異なる二つの固有状態が取れる

例) $|E_1\rangle = |\{\sigma_i^z\}_{i=1}^L\rangle = |1, -1, 1, 1, -1, \dots\rangle$

$$|E_2\rangle = |\{\sigma_i^{z'}\}_{i=1}^L\rangle = |-1, 1, 1, -1, 1, \dots\rangle$$

$$\rightarrow \langle E_1 | \hat{\sigma}_{i=1}^z | E_1 \rangle = 1, \langle E_2 | \hat{\sigma}_{i=1}^z | E_2 \rangle = -1, \langle \hat{\sigma}_{i=1}^z \rangle_{\text{mic}} = 0$$

ETHが（ほぼ自明に）やぶれている

量子多体系の分類

非可積分系...可積分系ではない系

→多くの模型でETH、熱平衡化が確認されている

$$\hat{H} = \sum \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + g \hat{\sigma}_i^x + h \hat{\sigma}_i^z$$

可積分系

- ・相互作用しないスピン系
- ・1D 横磁場Ising模型、1D XY模型など
(準粒子の二次形式にマップできる)
- ・1D XXZ模型、1D Lieb-Liniger模型など (Bethe ansatz)

局所保存量（量子数）の組により固有状態が決定

→局所保存量のためETH、熱平衡化が破れる

多くの系で
ETHが成立

↓
ETHの破れ

(近) 可積分系での実験

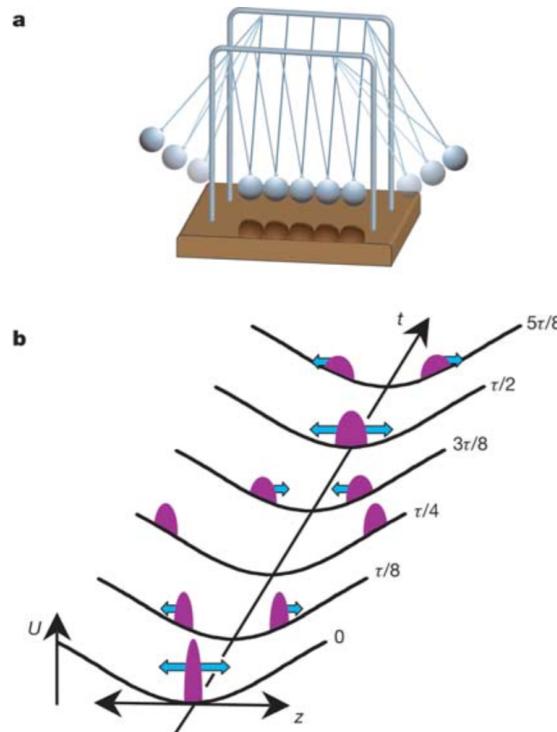
一次元ボーズ気体

$$\hat{H} = \hat{H}_{LL} + \hat{V}$$

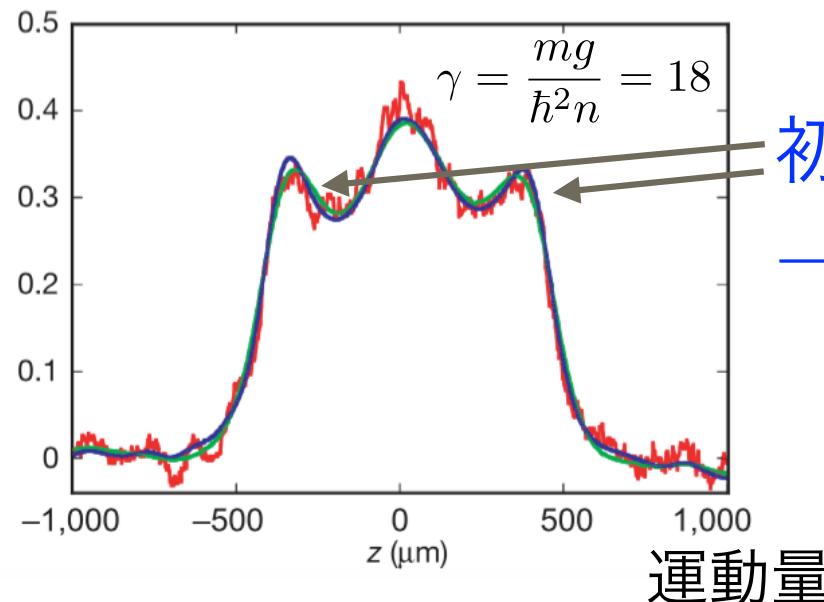
$$\hat{H}_{LL} = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i>j} g\delta(x_i - x_j)$$

: Lieb-Liniger模型 (可積分)

\hat{V} : ト ラップポテンシャル



定常状態の運動量分布



非可積分性と熱平衡化

M. Rigol, Phys. Rev. Lett. 103, 100403 (2009).

可積分性を調整できるハードコアボゾン系

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^L \left\{ -t \left(\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} + \text{H.c.} \right) + V \left(\hat{n}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i+1} - \frac{1}{2} \right) \right. \\ \left. - t' \left(\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+2} + \text{H.c.} \right) + V' \left(\hat{n}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i+2} - \frac{1}{2} \right) \right\}$$

(一次元、PBC)

$t' = V' = 0$: 可積分系

$\neq 0$: 非可積分系

パラメーターを時刻0で変化させる :

$t' = V'$ 固定 $t = 0.5, V = 2.0 \rightarrow t = 1.0, V = 1.0$

初期状態 : 初期ハミルトニアンの励起固有状態

非可積分性と熱平衡化

M. Rigol, Phys. Rev. Lett. 103, 100403 (2009).

物理量

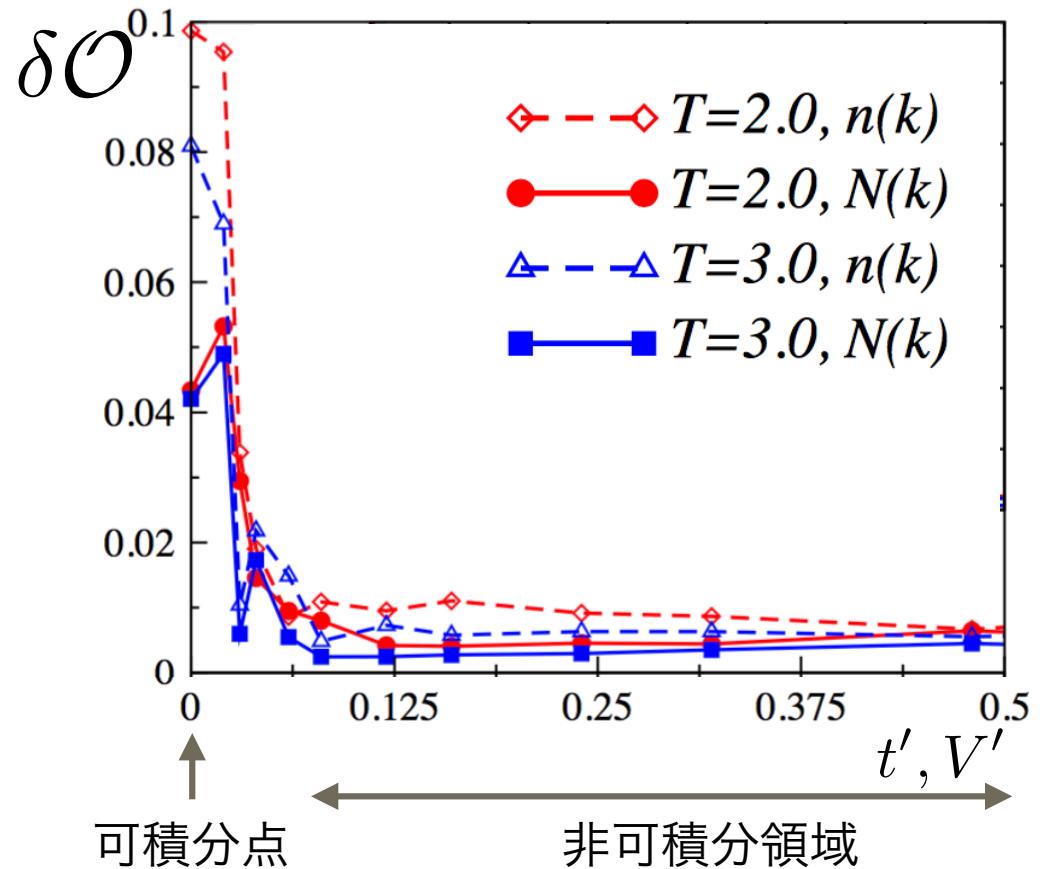
$$\hat{n}(k) = \frac{1}{L} \sum_{i,j} e^{-k(i-j)} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j$$

$$\hat{N}(k) = \frac{1}{L} \sum_{i,j} e^{-k(i-j)} \hat{n}_i \hat{n}_j$$

定常状態のミクロ
カノニカル分布の精度

$$\delta \mathcal{O} = \frac{\sum_k |(\mathcal{O}_k)_{\text{mic}} - \overline{\mathcal{O}_k(t)}|}{\sum_k \overline{\mathcal{O}_k(t)}}$$

可積分点を離れると
差は小さくなる
→熱平衡化！



非可積分性とETH

可積分性を変化できる格子スピン系
ETHのサイズ依存性などを検証

W. Beugeling et al., Phys. Rev. E 89 (2014).

\hat{A} :あるスピンのz成分

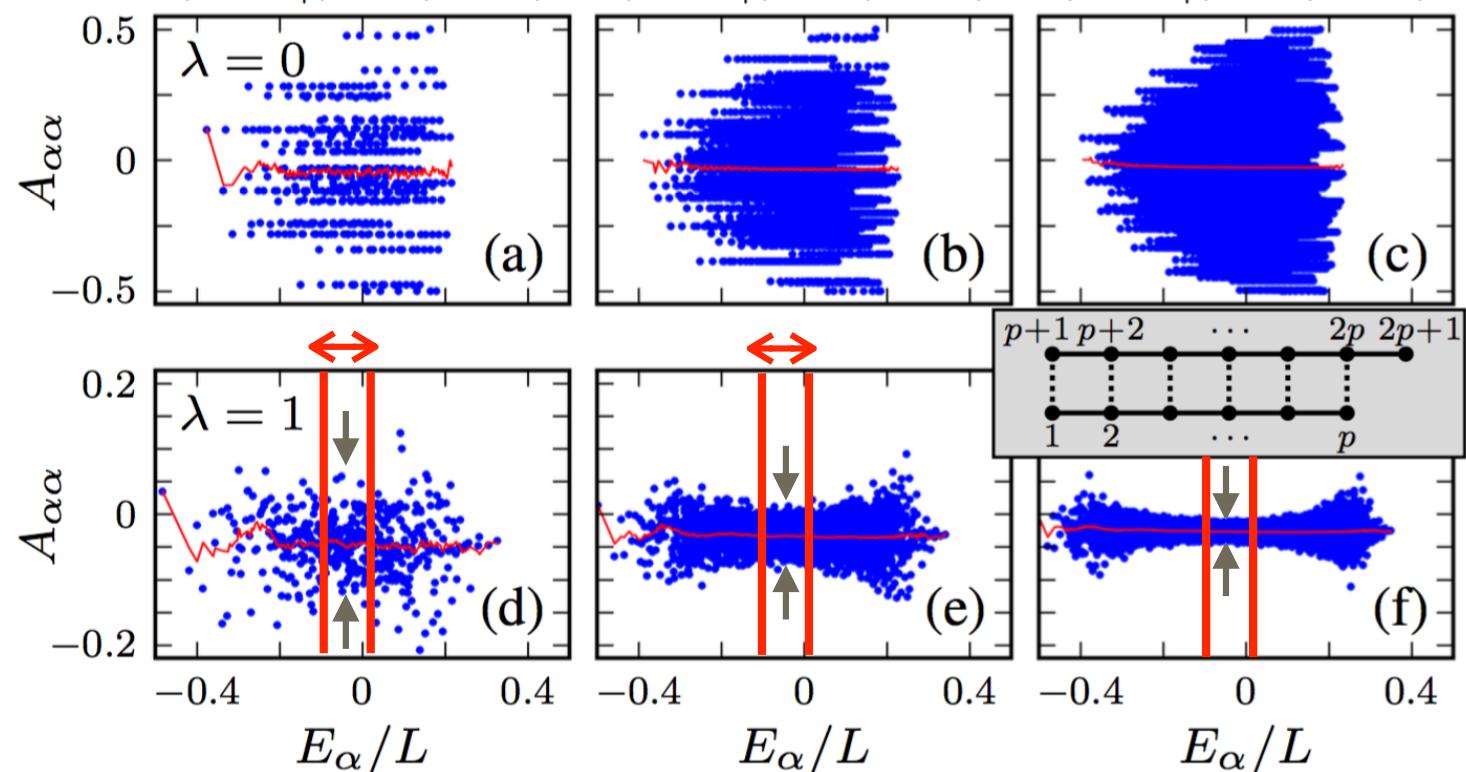
可積分系

非可積分系

$(L, N_\uparrow) = (11, 5)$

$(L, N_\uparrow) = (15, 7)$

$(L, N_\uparrow) = (19, 9)$



非可積分性とETH

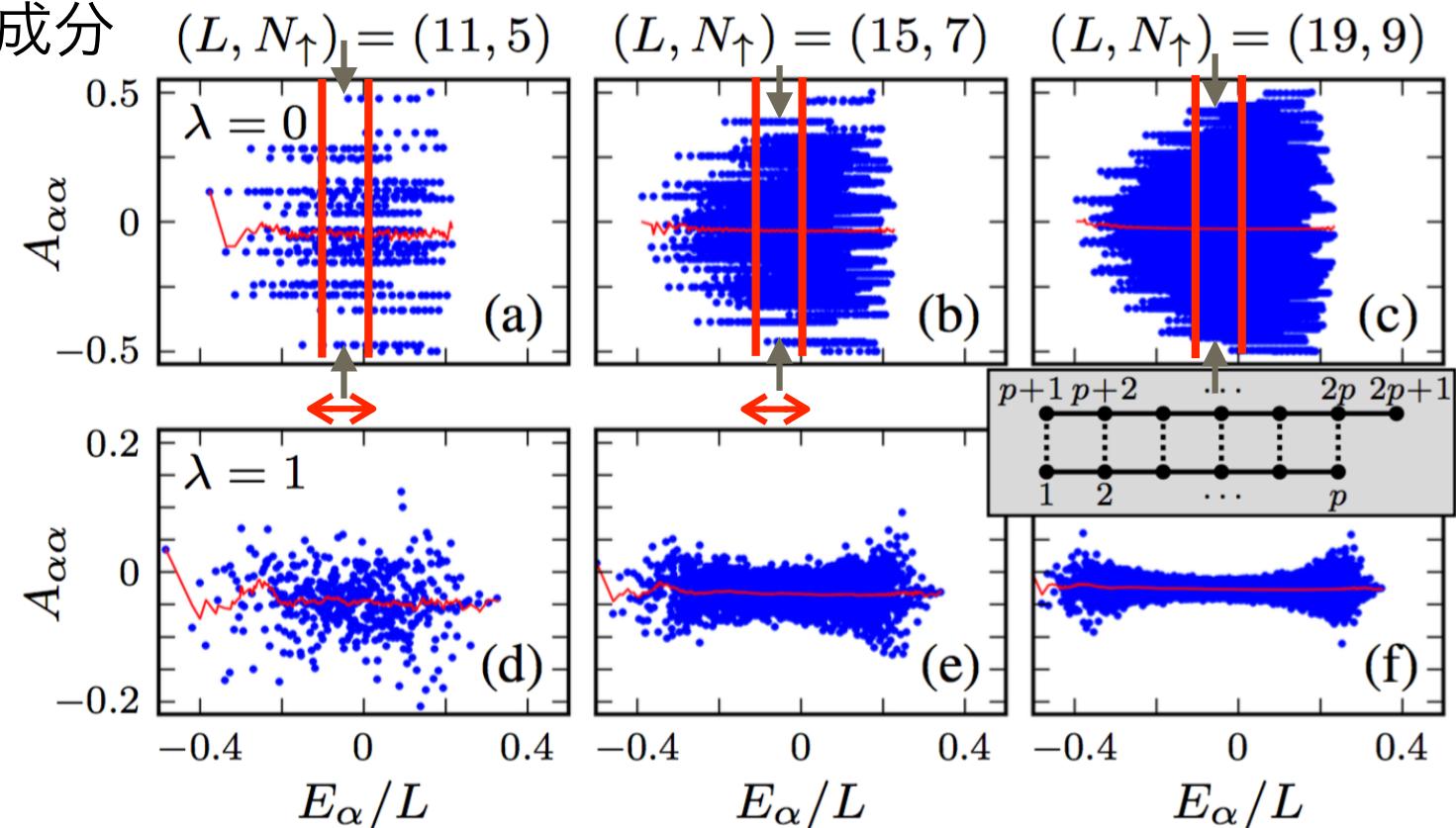
可積分性を変化できる格子スピン系
ETHのサイズ依存性などを検証

W. Beugeling et al., Phys. Rev. E 89 (2014).

\hat{A} :あるスピンのz成分

可積分系

非可積分系



可積分系とGeneralized Gibbs Ensemble

可積分系

- ・多くの局所保存量が存在
- ・ETHがやぶれる
- ・熱平衡分布への緩和が起こらない

熱平衡分布の代わりに定常状態を表す分布は存在するか？

一般化Gibbs分布 (GGE)

M. Rigol et al., PRL (2007)

$$\hat{\rho}_{\text{GGE}} = \frac{1}{Z_{\text{GGE}}} e^{-\sum_k \lambda_k \hat{I}_k}$$

↑
保存量
 $[\hat{H}, \hat{I}_k] = [\hat{I}_k, \hat{I}_{k'}] = 0 \quad (k \neq k')$
 $\langle \psi(0) | \hat{I}_k | \psi(0) \rangle = \text{Tr}[\hat{I}_k \hat{\rho}_{\text{GGE}}]$

適切な保存量の組 $\{\hat{I}_k\}$ を選ぶと $\overline{\mathcal{O}(t)} \simeq \text{Tr}[\hat{\mathcal{O}} \hat{\rho}_{\text{GGE}}]$

多くの可積分系のクエンチで確かめられている

二次形式にマップできる系

一般化Gibbs分布 (GGE)

M. Rigol et al., PRL (2007)

$$\hat{\rho}_{\text{GGE}} = \frac{1}{Z_{\text{GGE}}} e^{-\sum_k \lambda_k \hat{I}_k}$$

保存量
 $[\hat{H}, \hat{I}_k] = [\hat{I}_k, \hat{I}_{k'}] = 0 \ (k \neq k')$
 $\langle \psi(0) | \hat{I}_k | \psi(0) \rangle = \text{Tr}[\hat{I}_k \hat{\rho}_{\text{GGE}}]$

(例) 1D free fermions (PBC)

$$\hat{c}_i = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{-ikx_i} \hat{c}(k)$$

$$\hat{H} = -J \sum_{j=1}^L c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j - \mu \sum_{j=1}^L c_j^\dagger c_j = - \sum_k (2J \cos(k) + \mu) \hat{c}^\dagger(k) \hat{c}(k)$$

GGE : 保存量 $\hat{n}_k = \hat{c}^\dagger(k) \hat{c}(k)$ から $\hat{\rho}_{\text{GGE}} = \frac{1}{Z_{\text{GGE}}} e^{-\sum_k \lambda_k \hat{n}_k}$

$\langle \psi_0 | \hat{n}_k | \psi_0 \rangle = \langle \hat{n}_k \rangle_{\text{GGE}}$ となるよう λ_k を決定

→ 適切な初期状態に対し $\overline{\mathcal{O}(t)} \simeq \text{Tr}[\hat{\mathcal{O}} \hat{\rho}_{\text{GGE}}]$

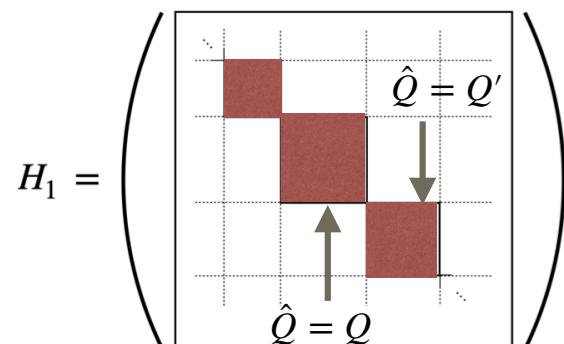
非可積分系における対称性とETH

$U(1)$ 対称性を持つ系

h_i ：弱く乱れを入れる

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{L-1} J(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x + \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y) + J_z \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + \sum_{i=1}^L h_i \hat{\sigma}_i^z$$

非可積分だが、全磁化 $\hat{Q} = \sum_{i=1}^L \hat{\sigma}_i^z$ が局所保存量を与える
 $[\hat{H}, \hat{Q}] = 0$



全磁化によりハミルトニアンがブロック対角化

全ヒルベルト空間ではETHは破れても良い

$$\langle E_\alpha^{(Q)} | \hat{A} | E_\alpha^{(Q)} \rangle \neq \langle E_\beta^{(Q')} | \hat{A} | E_\beta^{(Q')} \rangle$$

$$Q = \langle E_\alpha^{(Q)} | \hat{Q} | E_\alpha^{(Q)} \rangle \neq \langle E_\beta^{(Q')} | \hat{Q} | E_\beta^{(Q')} \rangle = Q'$$

局所保存量を指定したセクターでETHを議論する必要がある

$$\langle E_\alpha^{(Q)} | \hat{A} | E_\alpha^{(Q)} \rangle = \langle E_\beta^{(Q)} | \hat{A} | E_\beta^{(Q)} \rangle ?$$

ここまでまとめ

多くの非可積分系でETHおよび熱平衡化が成立する証拠が得られている

可積分系においては、ETHは一般に破れる

熱平衡分布の代わりに、一般化Gibbs分布が可積分系の定常状態を記述すると期待されている

4. 熱平衡化しない非可積分系

参考文献：

(Many-body localization)

*R. Nandkishore, D. A. Huse, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 6 (1), 15-38 (2018)

*D. A. Abanin et al., Rev. Mod. Phys. 91, 021001 (2019)

(量子多体スカラーとヒルベルト空間分割)

*M. Serbyn et al., Nature Physics 17, 675–685 (2021)

*S. Moudgalya et al., Rep. Prog. Phys. 85 086501 (2022)

量子多体系の分類

非可積分系...可積分系ではない系

→多くの模型でETH、熱平衡化が確認されている

多くの系で
ETHが成立

可積分系

- 1D 横磁場Ising模型、1D XY模型など
(準粒子の二次形式にマップできる)
- 1D XXZ模型、1D Lieb-Liniger模型など (Bethe ansatz)

↑
↓
ETHの破れ

Many-body localization (MBL)...乱れによる局在

量子多体系...非熱的な固有状態・空間が埋め込まれた系

Hilbert space fragmentation (HSF)...

局所保存量なしに固有空間が非熱的なものに分割

Many-body localization (MBL)

乱れを相互作用系に加える

例) $H = \sum_{i=1}^L [h_i \hat{S}_i^z + J \vec{\hat{S}}_i \cdot \vec{\hat{S}}_{i+1}] \quad h_i \in [-h, h]$

(many-body localized)

非局在相 (ETH)

MBL相

乱れの強さ

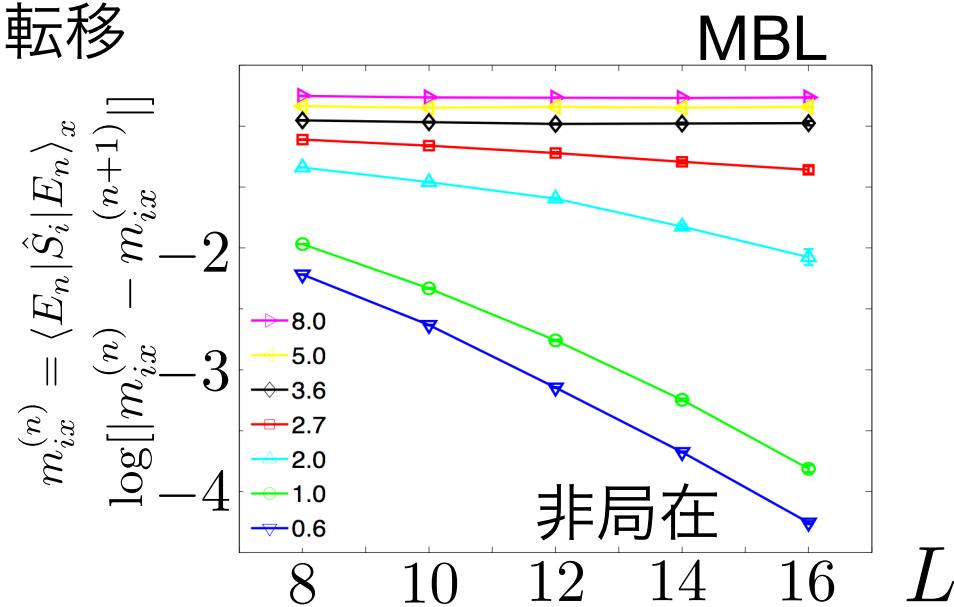
h



転移

MBL相では
ETHが破れ、熱平衡化しない！

熱平衡状態で特徴付けられない
新奇な非平衡相



MBLの実効ハミルトニアントダイナミクス

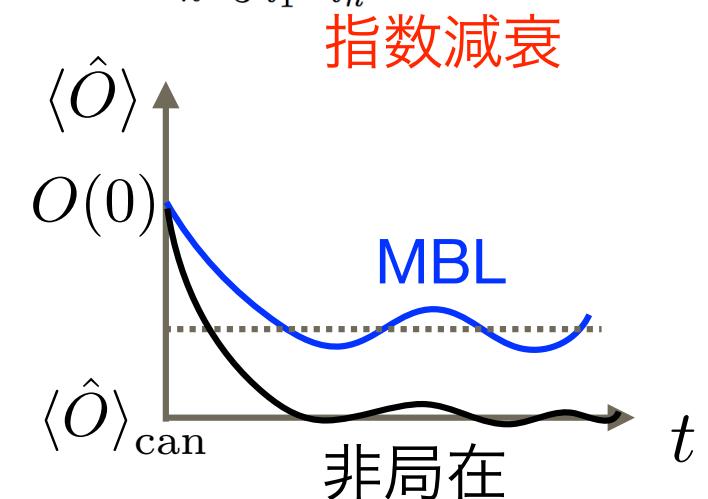
$$H = \sum_{i=1}^L [h_i \hat{S}_i^z + J \hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_{i+1}]$$

DA. Huse et al. PRB (2014)

$\hat{\tau}_i^z = U_{\text{loc}} \hat{S}_i^z U_{\text{loc}}^{-1}$: ドレストスピン

$$\rightarrow \hat{H}_{\text{eff}} = E_0 + \sum_i h'_i \hat{\tau}_i^z + \sum_{ij} J'_{ij} \hat{\tau}_i^z \hat{\tau}_j^z + \sum_{n=3} \sum_{i_1 \dots i_n} K_{i_1 \dots i_n}^{(n)} \hat{\tau}_{i_1}^z \dots \hat{\tau}_{i_n}^z$$

熱平衡化が起こらない
←ドレストスピンの保存



	典型的な非可積分系	可積分系	Anderson局在系	MBL系
ETH・熱平衡化	○	×	×	×

MBLのエンタングルメントダイナミクス

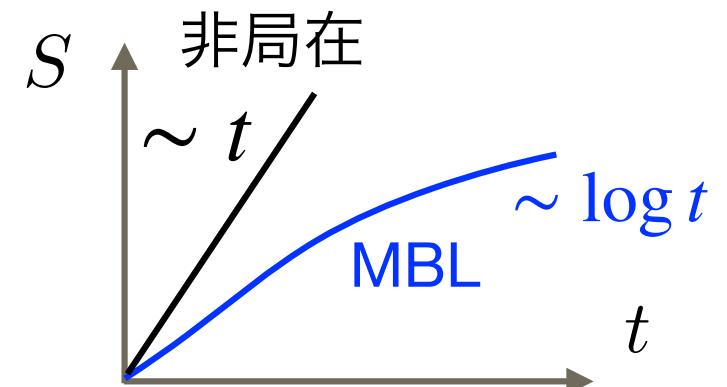
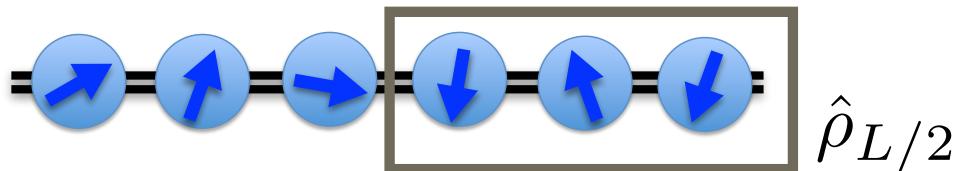
$$\hat{H}_{\text{eff}} = E_0 + \sum_i h'_i \hat{\tau}_i^z + \sum_{ij} J'_{ij} \hat{\tau}_i^z \hat{\tau}_j^z + \sum_{n=3} \sum_{i_1 \dots i_n} K_{i_1 \dots i_n}^{(n)} \hat{\tau}_{i_1}^z \dots \hat{\tau}_{i_n}^z$$

指数減衰

エンタングルメントの対数的増大（相互作用の効果）

JH. Bardarson et al., PRL (2012)

$$S = - \text{Tr}[\hat{\rho}_{L/2} \ln \hat{\rho}_{L/2}]$$



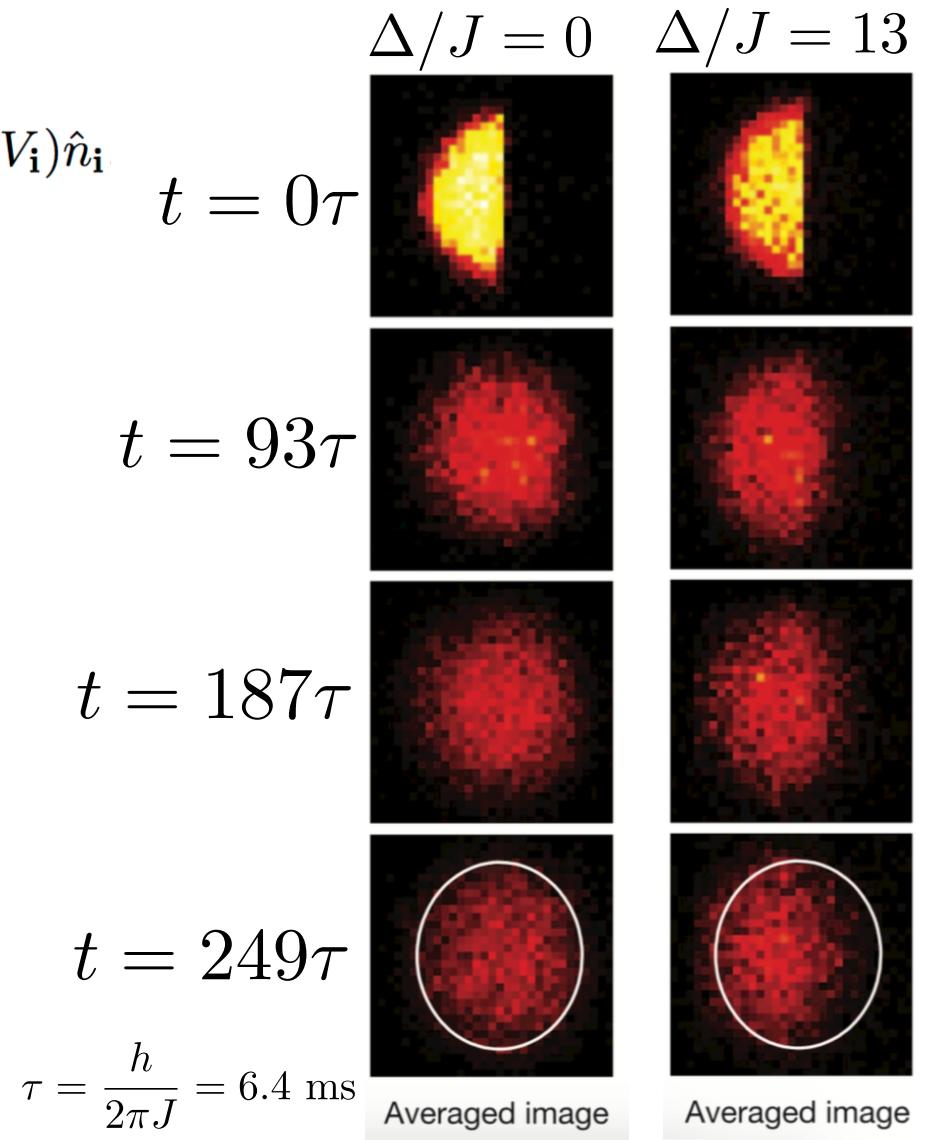
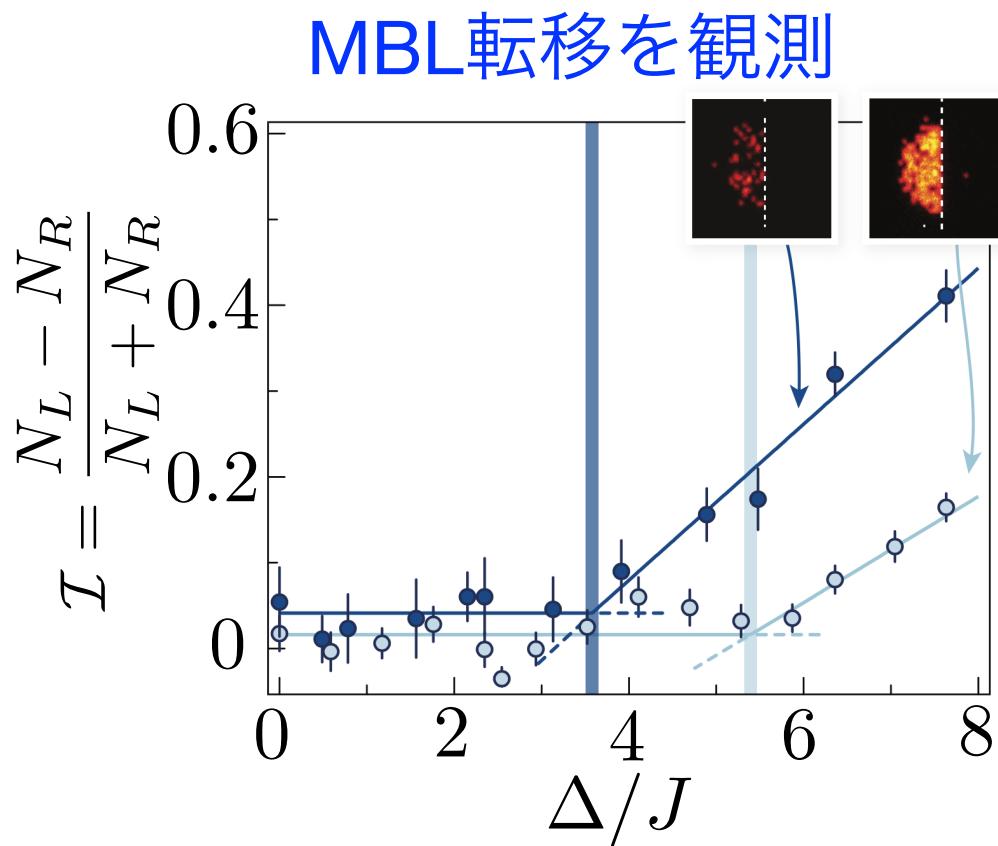
	典型的な非可積分系	可積分系	Anderson局在系	MBL系
ETH・熱平衡化	○	×	×	×
エンタングルメント	$\sim t$	$\sim t$	$\sim t^0$	$\sim \log t$

Many-body localizationの実験

二次元Bose-Hubbard模型

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \hat{a}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{j}} + \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i}} (\hat{n}_{\mathbf{i}} - 1) + \sum_{\mathbf{i}} (\delta_{\mathbf{i}} + V_{\mathbf{i}}) \hat{n}_{\mathbf{i}}$$

J. Choi et al., Science 352.6293 (2016)



Many-body localizationの実験

二次元Bose-Hubbard模型

J. Choi et al., Science 352.6293 (2016)

$\Delta/J = 0$ $\Delta/J = 13$

??

注

最近では、MBLの存在についてcontroversialな議論がある

*二次元以上では存在しない

*一次元でも存在しないかもしれない

*存在しても相転移点は数値計算の予想と大きく異なる

など

0

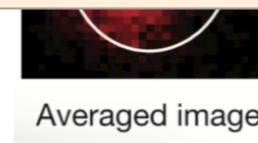
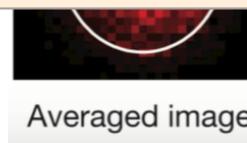
2

Δ/J

6

8

$$\tau = \frac{\hbar}{2\pi J} = 6.4 \text{ ms}$$



Averaged image

Averaged image

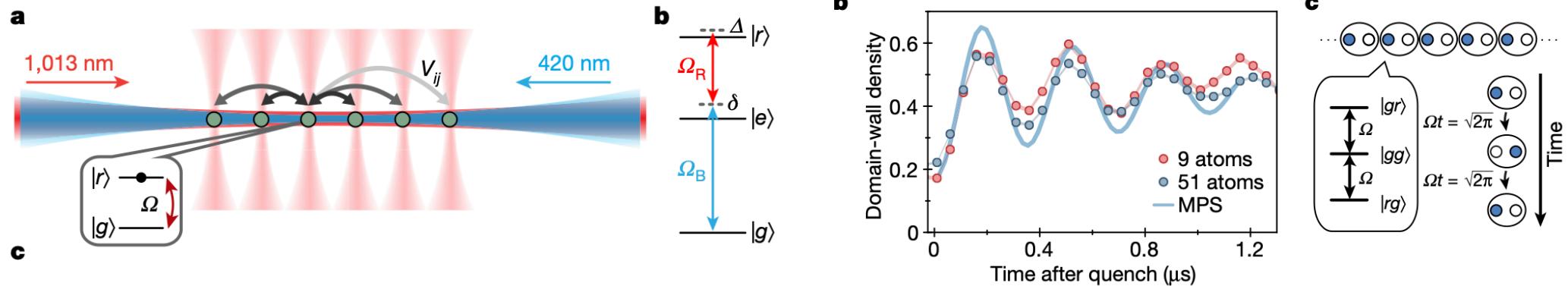
非可積分系での非熱平衡化：量子多体スカラー

一次元にRydberg原子を配列

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\Omega}{2} \hat{\sigma}_i^x - \sum_i \Delta \hat{n}_i + \sum_i V \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$$

$\Omega, \Delta \ll V$ ：隣り合う励起が抑制される (Rydberg blockade)
 $|\uparrow\downarrow\rangle$

H. Bernien et al., Nature 551, 579–584 (2017)



\mathbb{Z}_2 状態 $|\uparrow\downarrow\cdots\uparrow\downarrow\rangle$ から始めるとき振動が長時間残る

並進対称な非可積分系での非熱平衡化：量子多体スカー

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\Omega}{2} \hat{\sigma}_i^x - \sum_i \Delta \hat{n}_i + \sum_i V \hat{n}_i \hat{n}_{i+1} \quad \Delta = 0, \Omega = 2 \ll V \quad \hat{P}_i = \frac{1 - \hat{\sigma}_i^z}{2}$$

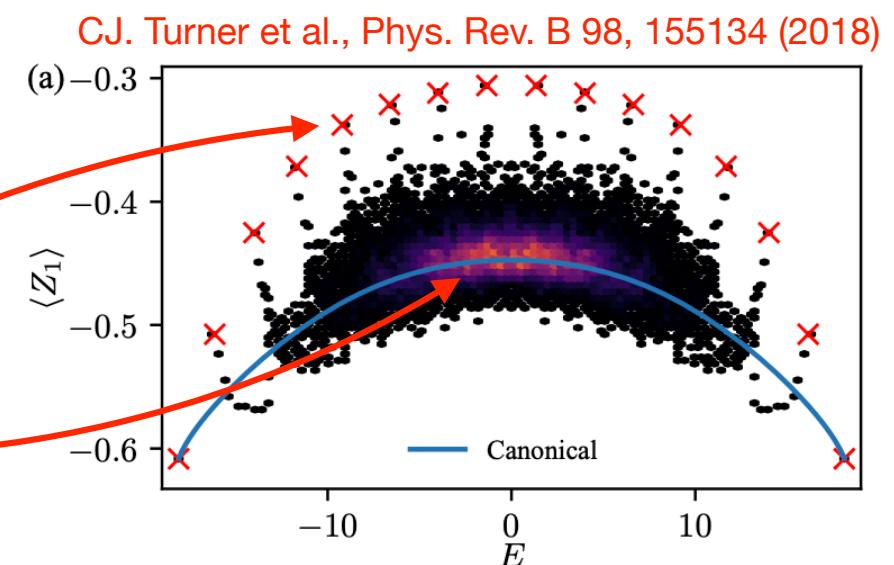
$$\rightarrow \quad \hat{H}_{\text{eff}} = \sum_i \hat{P}_i \hat{\sigma}_{i+1}^x \hat{P}_{i+2} \quad \text{PXPモデル} \\ \text{Rydberg blockade} \quad (\text{非可積分系})$$

CJ. Turner et al., Nat. Phys. (2018)

(ダイナミクスの正当化) Z. Gong, N. Yoshioka, N. Shibata, RH, PRL, PRA (2020)

「量子多体スカー」

- ETHを満たさない固有状態が存在
→ 物理量の時間発展に影響
- ほとんどの固有状態はETHを満たす
→ 典型的な初期状態は熱平衡化する



スカーと重なりが大きい初期状態は熱平衡化しない

並進対称な非可積分系での非熱平衡化：量子多体スカー

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\Omega}{2} \hat{\sigma}_i^x - \sum_i \Delta \hat{n}_i + \sum_i V \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$$

$$\hat{P}_i = \frac{1 - \hat{\sigma}_i^z}{2}$$

→ $\hat{\Pi}$ \square $\hat{D} \wedge x$ \hat{D}

PXPモデル

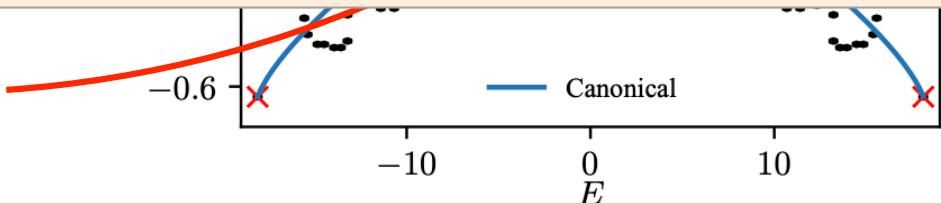
この論文の後、量子多体スカーの発現に関する
様々なメカニズムが提唱されている

*Spectrum-generating algebra $[\hat{H}, \hat{\eta}^\dagger] = \omega \hat{\eta}^\dagger$

*Shiraishi-Mori embedding

etc...

- ほとんどの固有状態はETHを満たす



→ 典型的な初期状態は熱平衡化する

スカーと重なりが大きい初期状態は熱平衡化しない

量子多体スカラーの系統的な構成方法

一次元スピニ $1/2$ 系で、次の演算子を考える

$$\hat{\mathbf{S}}_i^{3/2} = \hat{\mathbf{S}}_{i-1} + \hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_{i+1}$$

$\mathbf{S}_i^{3/2}$ = 3/2への射影演算子 $\hat{\mathcal{P}}_i^{S=3/2}$ を導入すると、

Majumdar-Ghosh模型 $\hat{H}_{\text{MG}} = \sum_i \hat{\mathcal{P}}_i^{S=3/2}$ は次の基底状態を持つ：

ダイマー状態 $|\Psi_1\rangle = \prod_{l=1}^{L/2} |\nu_{2l-1,2l}\rangle, |\Psi_2\rangle = \prod_{l=0}^{L/2-1} |\nu_{2l,2l+1}\rangle$

$$\forall i, \hat{\mathcal{P}}_i^{S=3/2} = 0$$

$|\nu_{i,j}\rangle$: スピニシングレット状態

すると、任意の \hat{h}_i に対し、 $\hat{H}_{\text{scar}} = \sum_i \hat{\mathcal{P}}_i^{S=3/2} \hat{h}_i \hat{\mathcal{P}}_i^{S=3/2}$ は

$\forall i, \hat{\mathcal{P}}_i^{S=3/2} = 0$ のセクター内で $|\Psi_{1,2}\rangle$ を固有状態にもつ

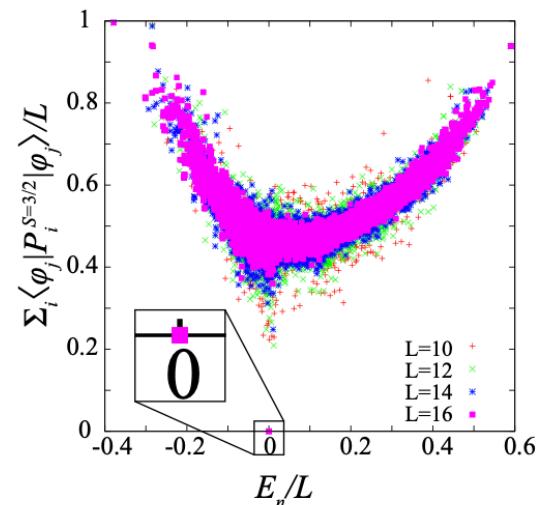
量子多体スカーの系統的な構成方法

任意の \hat{h}_i に対し、 $\hat{H}_{\text{scar}} = \sum_i \hat{\mathcal{P}}_i^{S=3/2} \hat{h}_i \hat{\mathcal{P}}_i^{S=3/2}$ は

$\forall i, \hat{\mathcal{P}}_i^{S=3/2} = 0$ のセクター内で $|\Psi_{1,2}\rangle$ を固有状態にもつ

一方 $\hat{\mathcal{P}}_i^{S=3/2} = 1$ を含むセクターでは、 \hat{h}_i の作用が重要となり、
一般にそのセクター内の固有状態はETHを満たしうる

\hat{h}_i を調整すると固有状態 $|\Psi_{1,2}\rangle$ は
スペクトルの中に埋め込まれる
→ これらの状態はETHを破る！



量子多体スカーの系統的な構成方法

$\hat{\mathcal{P}}_i$: (多サイトにわたる) 局所的な射影演算子

$\mathcal{T} = \{ |\psi\rangle : \hat{\mathcal{P}}_i |\psi\rangle = 0 \ \forall i \}$: ターゲット空間

[$\hat{H}_0, \hat{\mathcal{P}}_i$] = 0 $\forall i$ なる \hat{H}_0 をとると、 \mathcal{T} は \hat{H}_0 の不变部分空間

$$|\psi\rangle \in \mathcal{T} \implies \hat{H}_0 |\psi\rangle \in \mathcal{T} \quad \text{先ほどの例では } \hat{H}_0 = 0$$

よって \hat{H}_0 は \mathcal{T} 内で対角化され、 $\dim[\mathcal{T}]$ 個の固有状態 $\{ |E_a\rangle\}$ を持つ

すると、 $\hat{H}_{\text{scar}} = \sum_i \hat{\mathcal{P}}_i \hat{h}_i \hat{\mathcal{P}}_i + \hat{H}_0$ も固有状態 $\{ |E_a\rangle\}$ を持つ

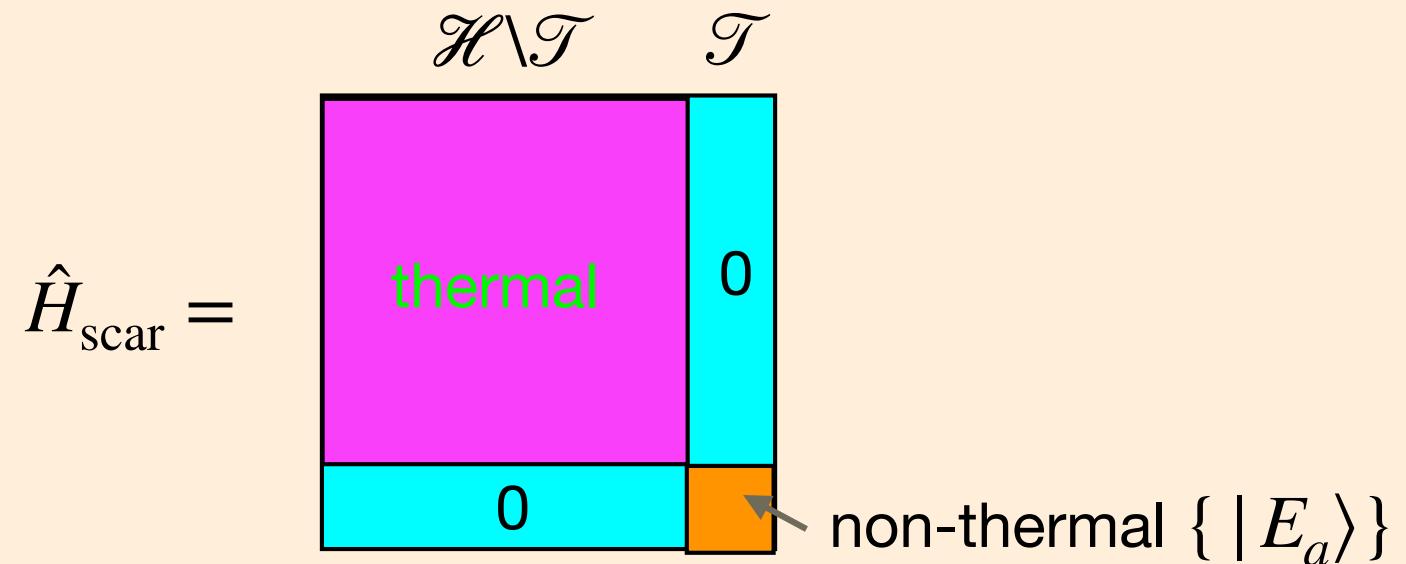
(\hat{h}_i は任意より、 \hat{H}_{scar} は一般に非可積分系)

固有状態 $\{ |E_a\rangle\}$ は \hat{H}_{scar} の他の ($\mathcal{H} \setminus \mathcal{T}$ の) 固有状態と関係なく構成され、一般に ETH を満たさないことが示せる

量子多体スカーの系統的な構成方法

$\hat{\mathcal{P}}_i$: (多サイトにわたる) 局所的な射影演算子

この場合、構成方法から \hat{H}_{scar} はブロック対角化されている
通常の対称性と異なり、局所保存量は一般には存在しない



一般にETHを満たさないことが示せる

N. Shiraishi and T. Mori, Phys. Rev. Lett. 119, 030601 (2017)

ヒルベルト空間分割 (HSF)

スピン1模型

$$\hat{H} = - \sum_n \left[S_n^+ (S_{n+1}^-)^2 S_{n+2}^+ + \text{H.c.} \right]$$

S. Pai et al., PRX (2019); P. Sala et al., PRX (2020)

許される遷移

$$|\cdots 0+0\cdots\rangle \leftrightarrow |\cdots+-+\cdots\rangle$$

$$|\cdots -+0\cdots\rangle \leftrightarrow |\cdots 0-+\cdots\rangle$$

$$|\cdots 0+-\cdots\rangle \leftrightarrow |\cdots +-0\cdots\rangle$$

$$|\cdots -+-\cdots\rangle \leftrightarrow |\cdots 0-0\cdots\rangle$$

局所保存量は \hat{H} 以外に二つのみ

$$\hat{Q} = \sum_{i=1}^L \hat{S}_i^z \quad \hat{P} = \sum_{i=1}^L (i - i_0) \hat{S}_i^z$$

“電荷” “双極子モーメント”

「対称性を持つ非可積分系」の多くは、
それに伴う局所保存量のセクターを指定するとその中ではETHが成立

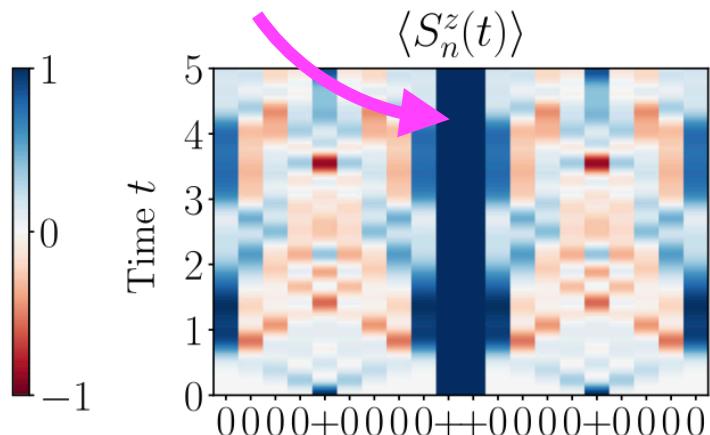
このモデルも $\hat{H}, \hat{Q}, \hat{P}$ の値を指定すれば ETH・熱平衡化が成立するか？

ヒルベルト空間分割 (HSF)

$\hat{H}, \hat{Q}, \hat{P}$ の値を指定すればETH・熱平衡化が成立するか？

No! 局所保存量を指定しても熱平衡化は起こるとは限らない

系が空間的に分割される



A: $|0000+0000++0000+0000>$

→壁が時間発展でも不变（凍る）

B: $|0000++0-0-0++0-0++0000>$

→壁が時間発展で溶ける

$\langle \hat{H} \rangle_A = \langle \hat{H} \rangle_B, \langle \hat{Q} \rangle_A = \langle \hat{Q} \rangle_B, \langle \hat{P} \rangle_A = \langle \hat{P} \rangle_B$ だが

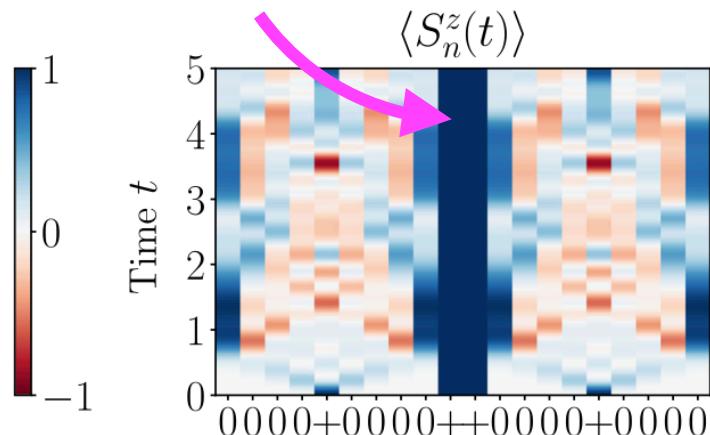
$\overline{\langle \hat{S}_{10} \rangle}_A \neq \overline{\langle \hat{S}_{10} \rangle}_B$ 初期状態依存性！

ヒルベルト空間分割 (HSF)

$\hat{H}, \hat{Q}, \hat{P}$ の値を指定すればETH・熱平衡化が成立するか？

No! 局所保存量を指定しても熱平衡化は起こるとは限らない

系が空間的に分割される



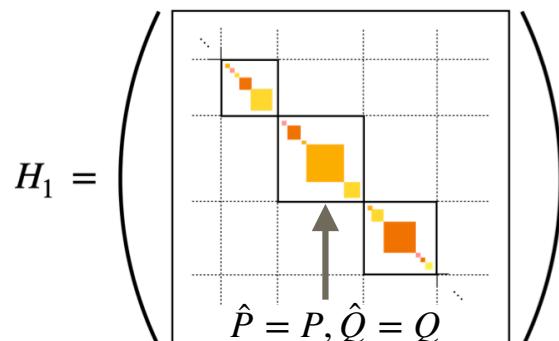
A: $|0000+0000++0000+0000>$

→壁が時間発展でも不变（凍る）

B: $|0000++0-0++0-0++0000>$

→壁が時間発展で溶ける

$\langle \hat{H} \rangle_A = \langle \hat{H} \rangle_B, \langle \hat{Q} \rangle_A = \langle \hat{Q} \rangle_B, \langle \hat{P} \rangle_A = \langle \hat{P} \rangle_B$ だが
 $\overline{\langle \hat{S}_{10} \rangle}_A \neq \overline{\langle \hat{S}_{10} \rangle}_B$ 初期状態依存性！



ヒルベルト空間分割：

局所保存量を指定した後のヒルベルト部分空間が、
さらに指数的に多くの部分空間に分割される

量子Ising模型におけるヒルベルト空間分割 (HSF)

局所保存量一つのみでHSFを起こす例

横磁場Ising模型

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{DW}} + h_x \sum_i \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{H}_{\text{DW}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z$$

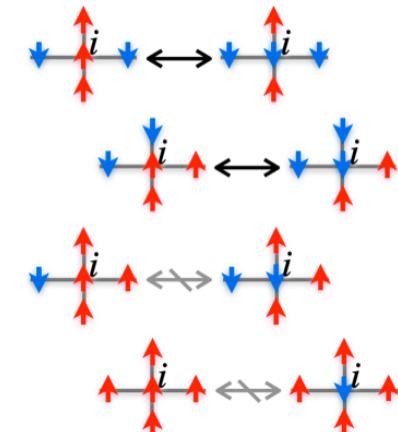


$d \geq 2$ なら $h_x \sim 1$ の時、十分に非可積分的

弱磁場極限 $h_x \rightarrow 0$ での実効モデル（やはり非可積分）

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{DW}} + h_x \sum_i \hat{\sigma}_i^x \hat{Q}_i$$

\hat{Q}_i : 周りの磁化の和がゼロなら1,
それ以外は0への射影



ダイナミクスは非自明な制限を受ける

量子Ising模型におけるヒルベルト空間分割 (HSF)

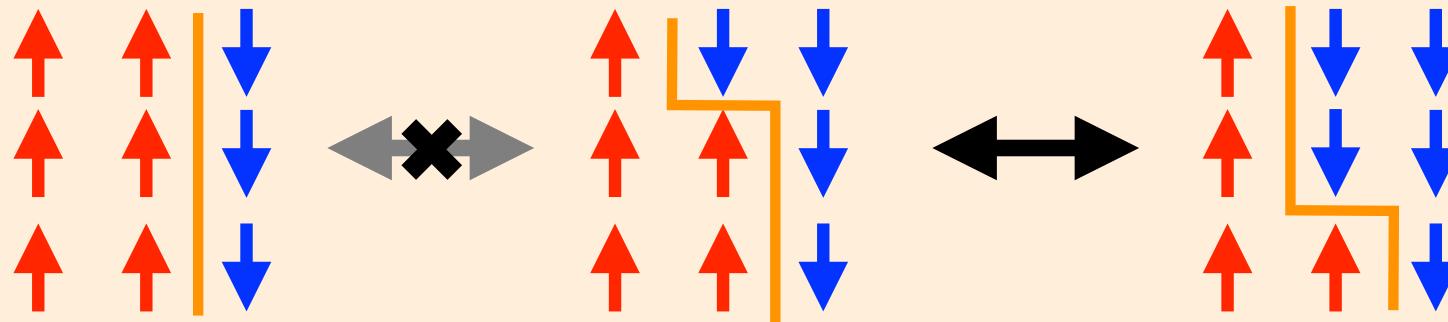
局所保存量一つのみでHSFを起こす例

横磁場Ising模型

\hat{H}_{DW} が横磁場に比べ、支配的で保存する

(エネルギー以外に局所保存量は \hat{H}_{DW} のみ)

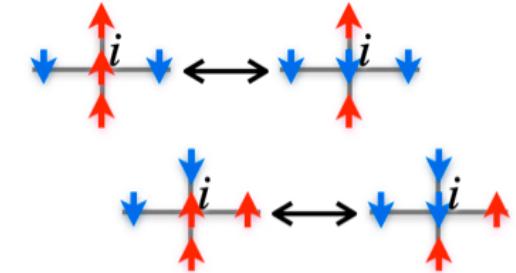
「ドメイン壁」のエネルギーを変えない遷移のみ存在



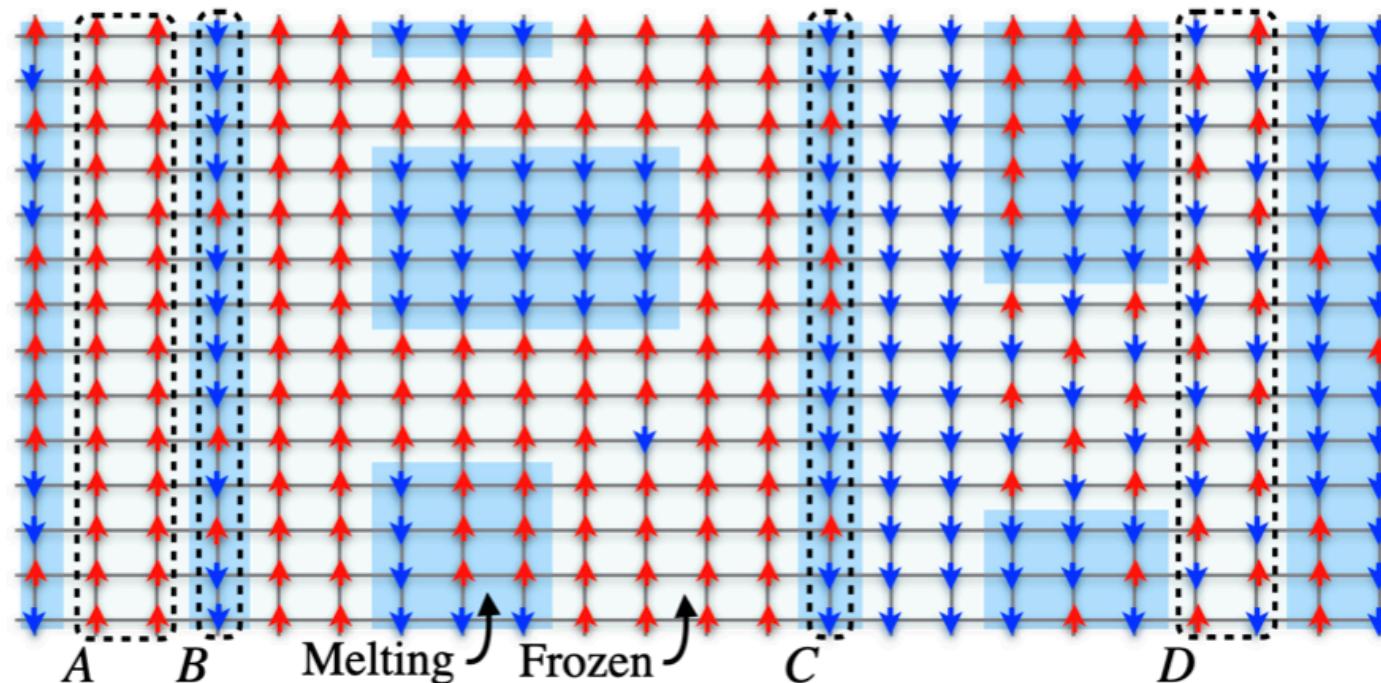
ダイナミクスは非自明な制限を受ける

凍った領域

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{DW}} + h_x \sum_i \hat{\sigma}_i^x \hat{Q}_i$$

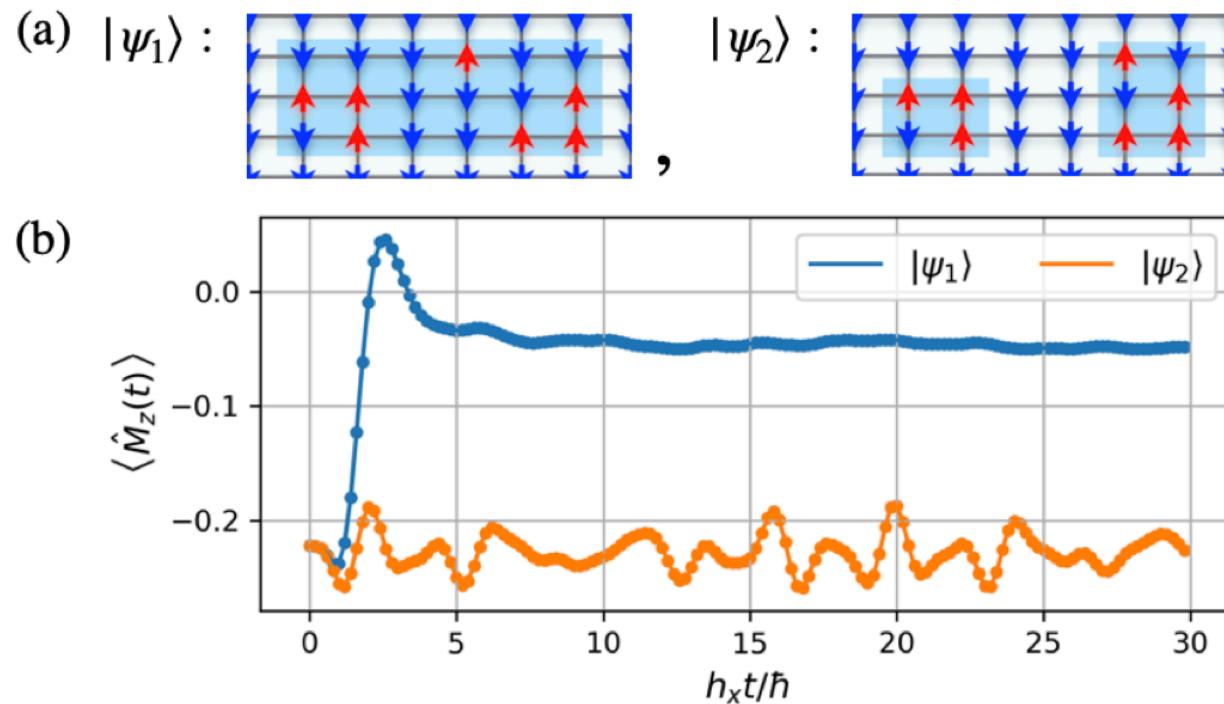


ダイナミクスの制限により、
動かない（凍った）領域が存在し、系を空間的に分断



非熱的なダイナミクス

凍った領域による空間の分断により、HSFが起こる
(ドメイン数の保存量を指定しても、ETHが破れる)



$$H_1 = \left(\begin{array}{ccc} \dots & \dots & \dots \\ \dots & \text{red square} & \dots \\ \dots & \text{yellow square} & \dots \\ \hline \dots & \dots & \dots \\ n_{\text{DW}} = n & n' & n'' \\ \dots & \dots & \dots \end{array} \right)$$

→初期状態に依存したダイナミクス、熱平衡化が起こらない

ここまでまとめ

非可積分系においても、ETHおよび
熱平衡化を破る機構が存在する

多体局在は強い乱れによって熱平衡化が妨げられる
機構である（controversialな議論は続いている）

量子多体スカーは、ほとんどの固有状態が熱的なものの、
一部の固有状態がETHを破る現象である

HSFでは、ハミルトニアンが指数的な個数の
ブロック対角構造を持つ

5. ETHの普遍性

量子多体系の分類

非可積分系...可積分系ではない系

多くの系で
ETHが成立

非可積分系でのETHの破れはあくまで例外的か？

ETHはどれほど普遍的に成り立つのか？

→ von Neumannの「典型性の議論」に
始まる基本的な問題

量子多体系...非熱的な固有状態・空間が埋め込まれた系

Hilbert space fragmentation (HSF)...

局所保存量なしに固有空間が非熱的なものに分割

Von Neumann流の典型性の議論

J. von Neumann (1929); S. Goldstein et al. (2011); P. Reimann (2015)

ランダムなハミルトニアンを考える*

エルミートランダム行列の集合

$$P(H)dH \propto e^{-\text{Tr}[H^2]}dH$$

→ 固有状態及び $\mathcal{O}_{\alpha\alpha}$ が解析的に求まる

*原論文ではミクロカノニカルシェルに射影し、
ハール測度を取る

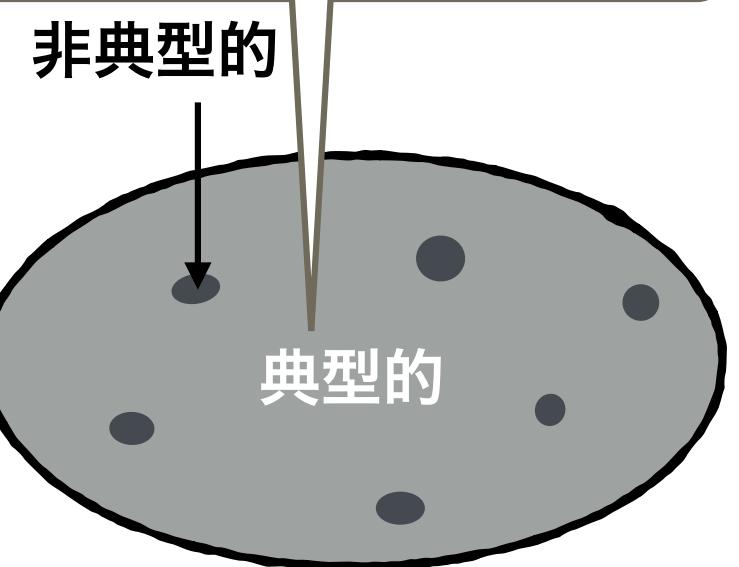
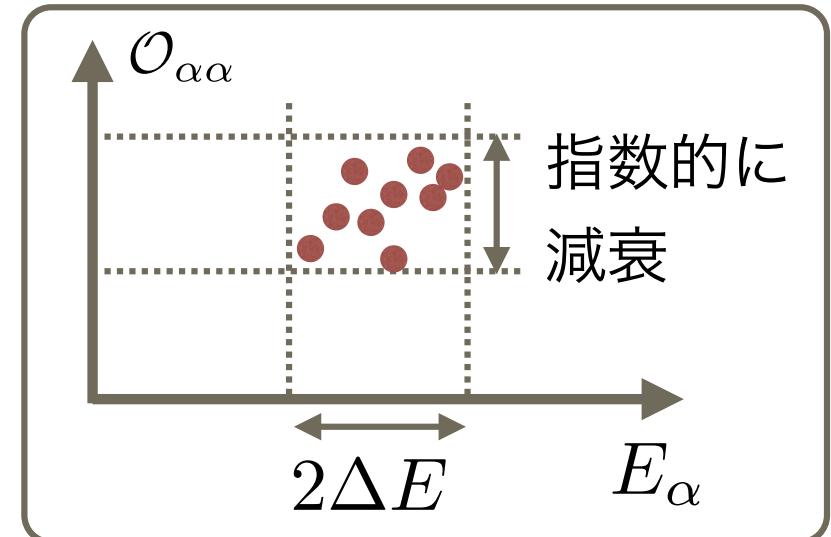
典型性 (数学的事実)

上記のランダム行列で表される

ほとんどの (=典型的な) H に対し

$$\max_{|E_\alpha\rangle, |E_\beta\rangle \in \mathcal{H}_{\text{sh}}} |\mathcal{O}_{\alpha\alpha} - \mathcal{O}_{\beta\beta}|$$

は系のサイズに対し指数的に減衰



典型性とLevy's lemma

$$\mathbb{P}_{\text{RMT}} \left[\max_{|E_\alpha\rangle, |E_\beta\rangle \in \mathcal{H}_{\text{sh}}} |\mathcal{O}_{\alpha\alpha} - \mathcal{O}_{\beta\beta}| \geq \|\hat{\mathcal{O}}\|_{\text{op}} d_{\text{sh}}^{-\eta} \right] \leq 2d_{\text{sh}} \exp \left[-\frac{d_{\text{sh}}^{1-2\eta}}{72\pi^3} \right]$$

RMT : ランダム行列理論 $(0 < \eta < 1/2)$

$d_{\text{sh}} = e^{\mathcal{O}(N)}$: シェル内の次元、系のサイズ N に対し指数増大

$\rightarrow \max_{|E_\alpha\rangle, |E_\beta\rangle \in \mathcal{H}_{\text{sh}}} |\mathcal{O}_{\alpha\alpha} - \mathcal{O}_{\beta\beta}|$ が指数的に小さくならない確率は
二重指数関数で抑えられる

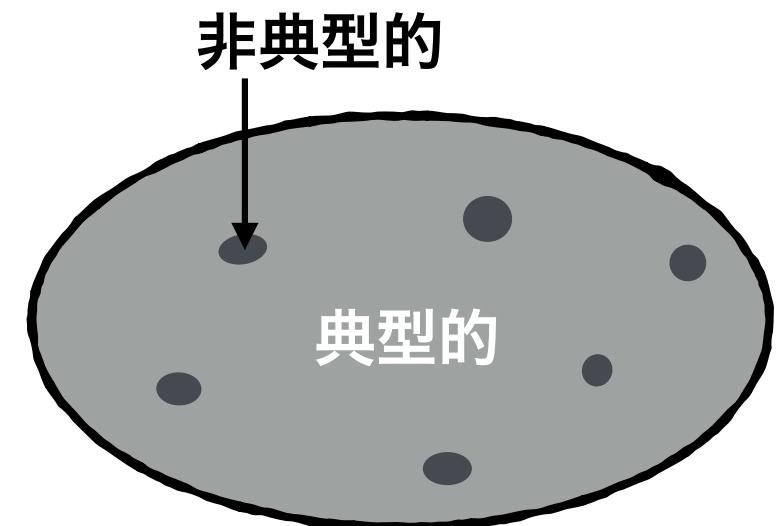
証明 : Levy's lemma

$$\text{Prob} \left[|g(\phi) - \langle g(\phi) \rangle_\phi| \geq \epsilon \right] \leq 2 \exp \left[-\frac{\epsilon^2(d' + 1)}{9\pi^3\eta^2} \right]$$

$\phi : d' (\gg 1)$ 次元球面の一点

$g(\phi)$: Lipschitz連続関数

η : Lipschitz定数 $|g(\phi_1) - g(\phi_2)| \leq \eta|\phi_1 - \phi_2|$

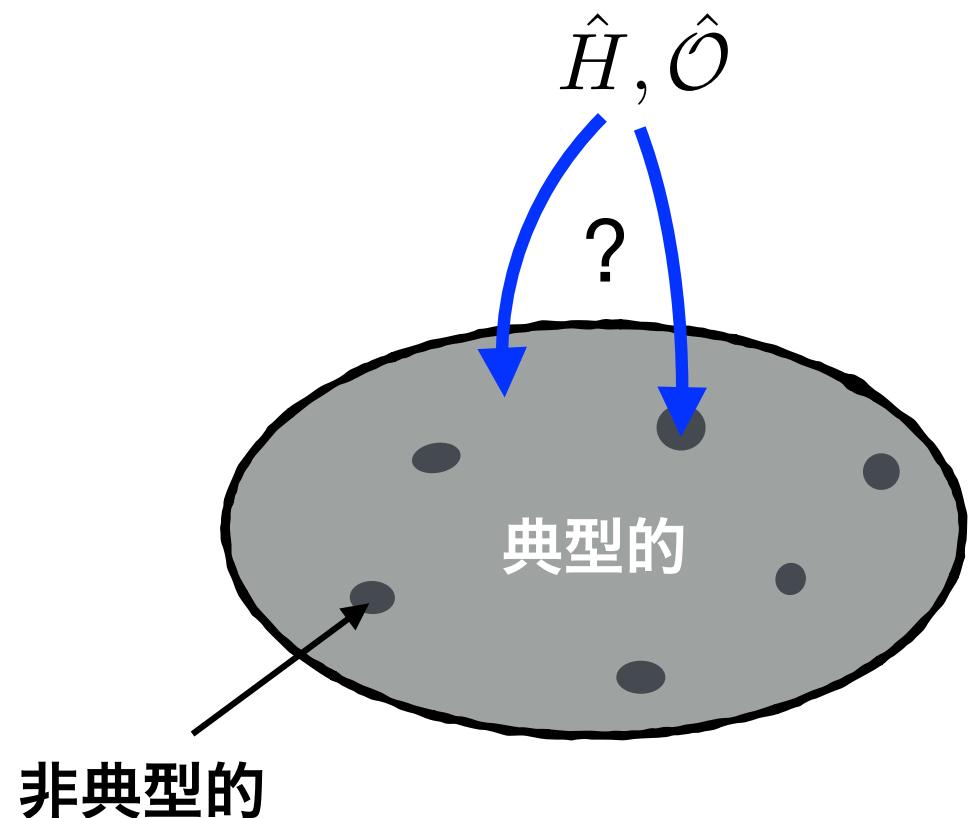


Von Neumann流の典型性の議論

J. von Neumann (1929); S. Goldstein et al. (2011); P. Reimann (2015)

現実的なハミルトニアンと物理量の組は「典型的」か？

→ 原理的にはどちらも可能



Von Neumann流の典型性の議論

J. von Neumann (1929); S. Goldstein et al. (2011); P. Reimann (2015)

現実的なハミルトニアンと物理量の組は「典型的」か？

→ 原理的にはどちらも可能

典型性の議論：

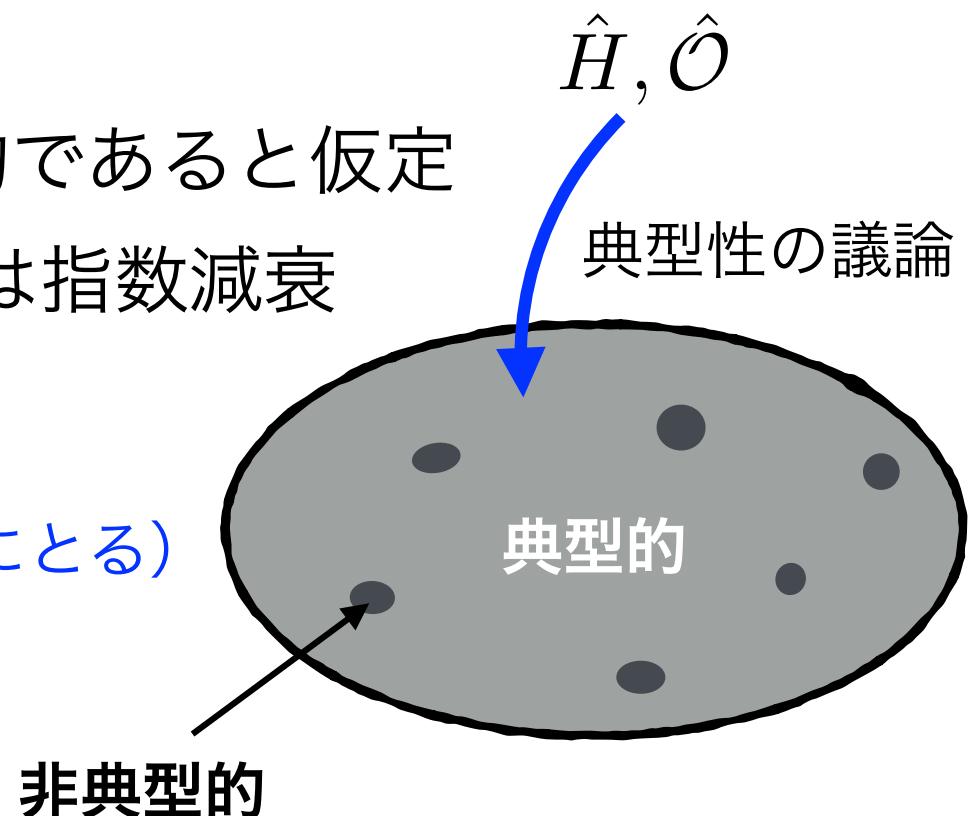
数学的な「典型性」に基づき、

現実的なセットアップも典型的であると仮定

→ $\max_{|E_\alpha\rangle, |E_\beta\rangle \in \mathcal{H}_{\text{sh}}} |\mathcal{O}_{\alpha\alpha} - \mathcal{O}_{\beta\beta}|$ は指数減衰

→ ETHの普遍性の説明

(ΔE をミクロカノニカルシェルにとる)



ほとんどの局所物理量に対する非典型性

現実的な系：局所性が重要

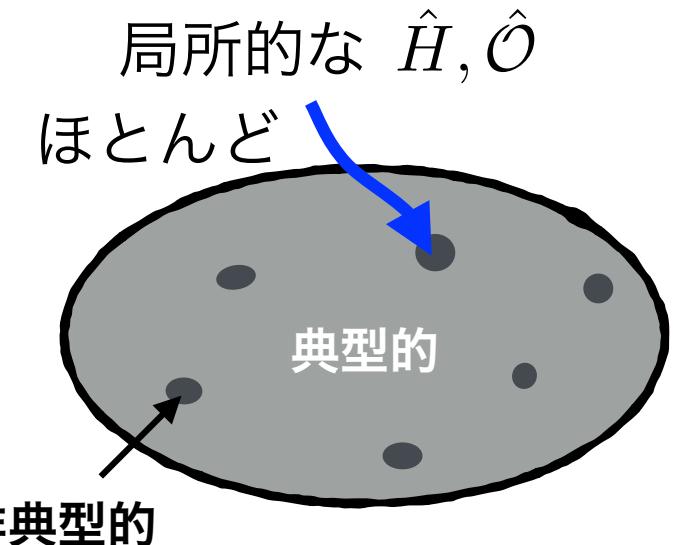
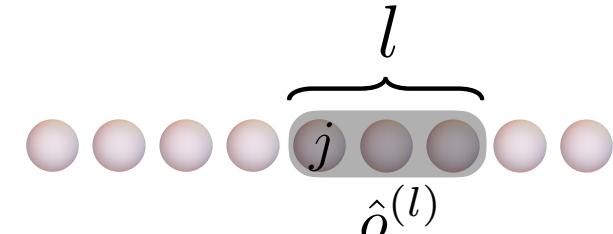
局所的なハミルトニアンとランダムな局所物理量をとる

$$\hat{\mathcal{O}} = \sum_{j=1}^N \hat{T}^j \hat{o}^{(l)} \hat{T}^{-j} \quad \begin{array}{l} \hat{T}^j : j \text{ サイト並進} \\ \hat{o}^{(l)} : l \text{ サイトにまたがる局所ランダム行列} \end{array}$$

上記の局所的なセットアップに対して、
ほとんどの物理量で、

$$\max_{|E_\alpha\rangle, |E_\beta\rangle \in \mathcal{H}_{\text{sh}}} |\mathcal{O}_{\alpha\alpha} - \mathcal{O}_{\beta\beta}|$$

は系のサイズに対し指数的に減衰しない
(シェル幅が指数的に小さくないとき)



ほとんどの局所物理量に対する非典型性

現実的な系：局所性が重要

ほとんどの局所物理量は非典型的

→ エネルギーシェルが指数的に小さくないとき、

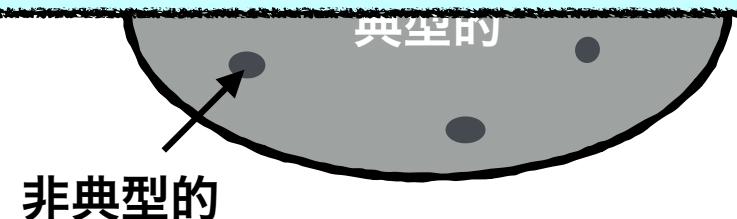
von Neumann流の典型性の議論は

現実的なセットアップでのETHの正当化にならない

注：ETHそのものを否定しているわけではない

は系のサイズに対し指数的に減衰しない

(シェル幅が指数的に小さくないとき)



熱平衡化・ETHは現実的な系で普遍的か？

Von Neumann流の典型性の議論はETHの正当化にならない

ETHが普遍的か否かは局所性が重要

→ 局所的なハミルトニアンの集団を考えることで、
ETHの普遍性を実証できるか？

Yes.

局所ランダム行列で表される系の集団を考えると、
そのほとんどでETHが成立することを数値的に実証できる

局所ランダム行列によるハミルトニアンと物理量

局所性の程度 l を変化できるアンサンブル

$\hat{h}^{(l)}$: 隣接 l サイトに働く演算子、ランダム行列分布(GUE)から抽出

並進対象な局所ランダム行列は次のようにかける $\hat{H}_N := \sum_{j=0}^{N-1} \hat{T}_N^j \hat{h}^{(l)} \hat{T}_N^{-j}$

ETHの指標

$$\Delta_\infty := \frac{\max_\alpha |O_{\alpha\alpha} - \langle \hat{O} \rangle_{E_\alpha, \delta E}^{\text{mc}}|}{\eta_O}$$

η_O : \hat{O} のスペクトル幅

$\Delta_\infty \rightarrow 0 (N \rightarrow \infty)$: ETH

\hat{H}_N と \hat{O} を局所ランダム行列にとり、

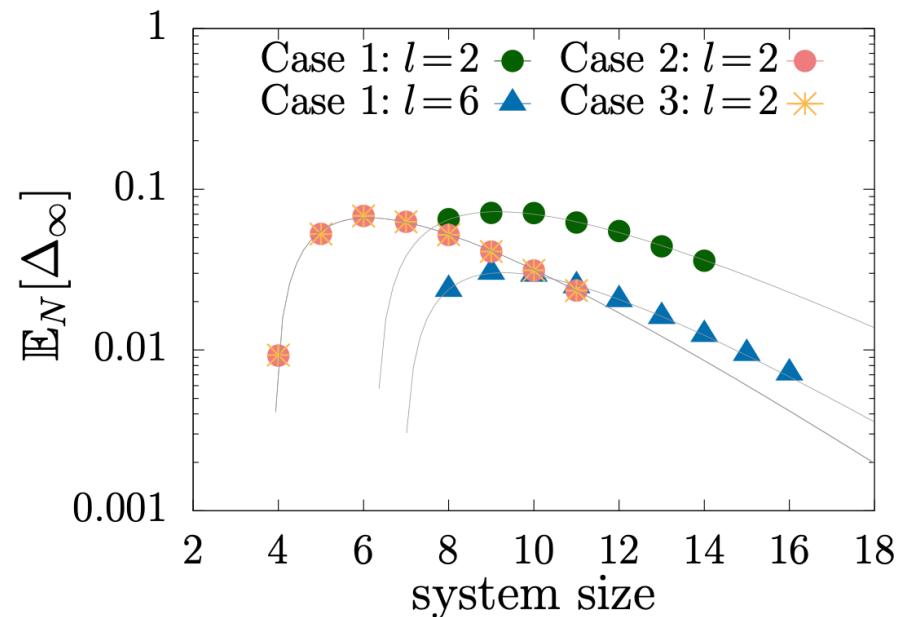
Δ_∞ の分布を数値的に求める

ETHの普遍性

$\mathbb{E}_N[\Delta_\infty]$: Δ_∞ のサンプル平均
(固有状態平均ではない)

フィット関数

$$\mathbb{E}_N[\Delta_\infty] = m_0(N - N_0) \exp\left(-\frac{N}{N_{\text{mean}}}\right)$$



Markov不等式より $\text{Prob}_N^{(l)}[\Delta_\infty \geq \epsilon] \leq \frac{\mathbb{E}_N^{(l)}[\Delta_\infty]}{\epsilon} \rightarrow 0 (N \rightarrow \infty)$
(例えば $\epsilon \sim N^{-1}$ にとる)

→ ほとんどの局所セットアップについてETHが成立！
(例外は指数的に小さい)

実験的に興味ある系でのETHの普遍性の数値的証拠

ここまでまとめ

Von Neumannのランダム行列による
典型性の議論は、現実に興味のある
局所相互作用する系のETHの正当化にはならない

局所ランダム行列を導入することにより、
現実に興味のある系のETHの成立が
数値的に確かめられた

Part Iのまとめ

孤立量子系でも、興味のある物理量に対して
熱平衡化が起こり、実験的にも検証されている

ETHは熱平衡化の十分条件として注目されている

典型的な量子多体系ではETHおよび熱平衡化が
成立するが、可積分系や局在系など、
熱平衡化しない例外的な系も発見されている

Part II.
非平衡遷移に関する厳密なバウンド

Part IIのアウトライン

1. モチベーション
2. 量子速度限界
3. 古典速度限界
4. Lieb-Robinson限界
5. マクロな遷移に対する速度限界（最近の我々の研究）

非平衡統計力学

今まで議論してきた統計力学は全て平衡状態に関するもの

「非平衡状態の統計力学」は未解決の問題

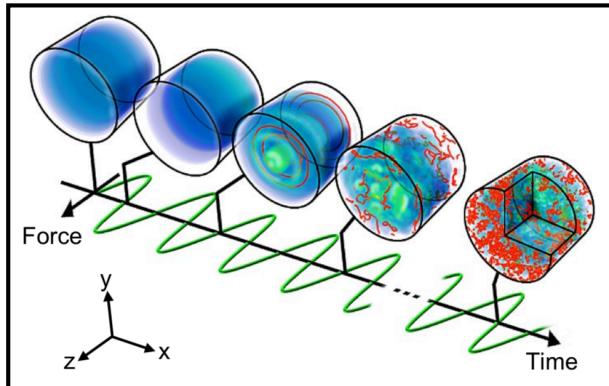
←等重率の原理（ミクロカノニカル分布）に対応する
一般的原理はない

非平衡統計力学へのアプローチ：

- ・まずは「非平衡熱力学」を理解し、
それと整合する統計力学を構築しようとする立場
- ・ミクロな量子ダイナミクスから非平衡統計力学の
原理を理解しようとする立場

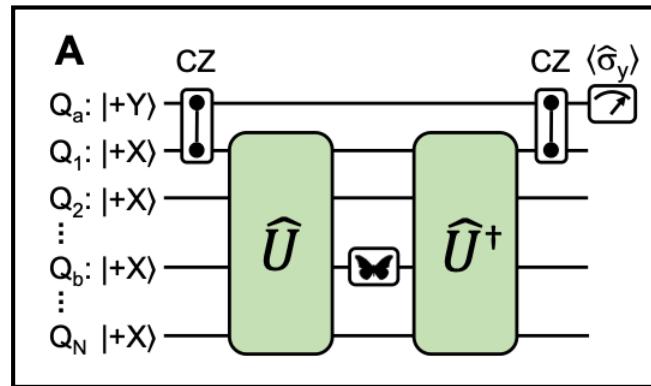
非平衡現象の制御

ダイナミクスを実現・制御可能になっている



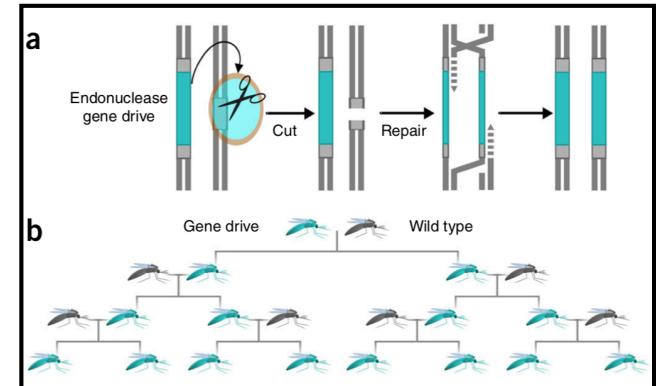
量子乱流

N. Navon et al.,
Nature (2016)



量子演算による
量子情報の伝搬

X. Mi et al., Sience (2021)



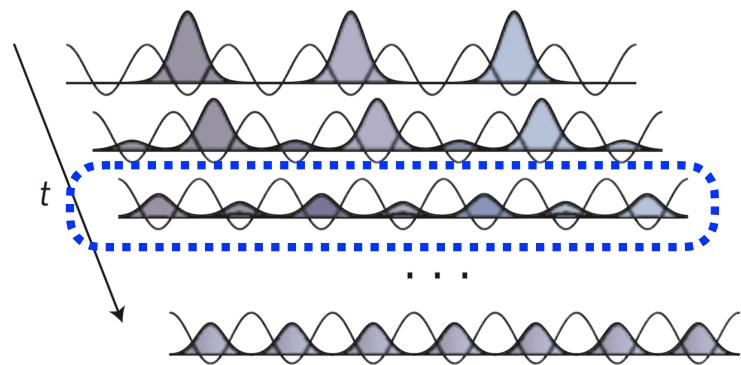
ゲノム編集による
遺伝子ドライブ

J. E. DiCarlo et al.,
Nat. Biotechnol. (2015)

→ ミクロな自由度の制御による非平衡統計力学の探索の舞台

非平衡遷移における普遍法則

定常状態に至るまでの、「有限時間の物理」を探索したい



$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi\rangle$$

S. Trotzky et al.,
Nat. Phys. 8, 325–330 (2012).

ミクロな運動方程式から導かれる普遍的法則は何か？

ここでは非平衡遷移に関する厳密な結果に注目する

速度限界 および **Lieb-Robinson限界**

2. 量子速度界限

参考文献：

- * S. Deffner and S. Campbell, J. Phys. A: Math. Theor. 50 453001 (2017)
 - * Z. Gong and R. Hamazaki, International Journal
of Modern Physics B 36 (31), 2230007 (2022).
-

速度限界：モチベーション

状態はどれほど早く別の状態に遷移できるか？

速度は何らかの物理量によって制限されている



励起状態



基底状態

早い遷移のためには、
エネルギーースケールが
小さくてはならない

$$i \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$$



Bath



励起状態

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = W\vec{p}$$

基底状態

早い遷移のためには、
エントロピー生成が
小さくてはならない

速度限界は、このような制限を厳密な不等式の形で表現する

不確定性関係から量子速度限界へ

位置と運動量の不確定性関係

$$\delta x \cdot \delta p \gtrsim \hbar \quad \longleftarrow \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Heisenberg (1927)

Kennard (1927)

Robertson (1929)

$$\Delta A = \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle}$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

[Proof]

$$\hbar = |\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle| = |\langle [\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle, \hat{p} - \langle \hat{p} \rangle] \rangle| \leq 2\Delta x \Delta p$$

$$[\hat{B}, \hat{C}] = \hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B} \quad |\langle [\hat{B}, \hat{C}] \rangle| \leq |\langle \hat{B}\hat{C} \rangle| + |\langle \hat{C}\hat{B} \rangle| \leq 2\langle \hat{B}^2 \rangle \langle \hat{C}^2 \rangle$$

Cauchy-Schwarz不等式

時間とエネルギーの不確定性関係？

$$\delta t \cdot \delta E \gtrsim \hbar \quad \longleftarrow \quad ??? \quad (\text{時間は物理量演算子ではない})$$

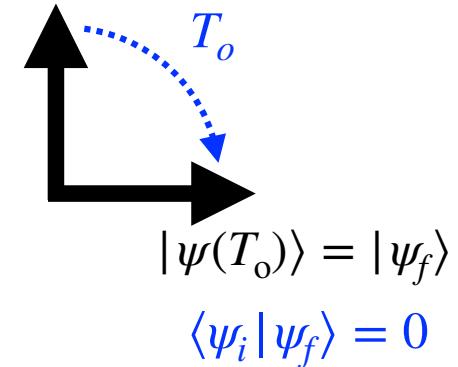
MandelstamとTammによる量子速度限界

Mandelstam-Tamm限界 (1945)

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_i\rangle$$

- ① 孤立量子系において、初期状態 $|\psi_i\rangle$ が直交する状態 $|\psi_f\rangle$ に遷移するまでの時間 T_o の下限

$$T_o \geq \frac{\hbar\pi}{2\Delta E} \quad \leftrightarrow \quad \Delta E \cdot T_o \geq \frac{\hbar\pi}{2}$$



$$\Delta E = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2} \quad \text{エネルギー揺らぎ}$$

- ② 物理量に関する速度限界：

期待値 $\langle \hat{A}(t) \rangle$ の各時刻での速度の上限

$$\left| \frac{d\langle \hat{A}(t) \rangle}{dt} \right| \leq \frac{2}{\hbar} \Delta A(t) \cdot \Delta E$$

時刻 t での量子揺らぎ

導出

② の導出

$$\left| \frac{d\langle \hat{A}(t) \rangle}{dt} \right| = \frac{|i\langle [\hat{A}(t), \hat{H}] \rangle|}{\hbar} = \frac{|i\langle [\hat{A}(t) - \langle \hat{A}(t) \rangle, \hat{H} - \langle \hat{H}(t) \rangle] \rangle|}{\hbar}$$

$$= \frac{2|\langle (\hat{A}(t) - \langle \hat{A}(t) \rangle)(\hat{H} - \langle \hat{H}(t) \rangle) \rangle|}{\hbar} \leq \frac{2}{\hbar} \Delta A(t) \cdot \Delta E$$

Cauchy-Schwarz不等式

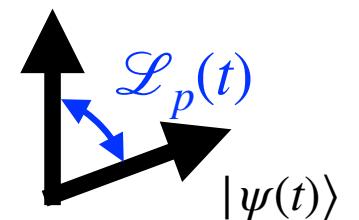
① の導出

$\hat{A} = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|$ とすると、フィデリティ $F(t) = |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2$ は

$$\left| \frac{dF}{dt} \right| \leq 2\sqrt{F - F^2} \frac{\Delta E}{\hbar}$$

$$\leftrightarrow \left| \frac{d\mathcal{L}_p}{dt} \right| \leq \frac{\Delta E}{\hbar}$$

$$\mathcal{L}_p(t) = \cos^{-1} \sqrt{F(t)}$$



導出

① の導出 (続き)

$$\left| \frac{d\mathcal{L}_p}{dt} \right| \leq \frac{\Delta E}{\hbar} \quad \mathcal{L}_p(t) = \cos^{-1} \sqrt{F(t)}$$

$F(0) = 1, \quad \mathcal{L}_p(0) = 0$ に注意して積分すると $\mathcal{L}_p(T) \leq \frac{\Delta E}{\hbar} T$

特に $F(T_0) = 0$ 、すなわち $\mathcal{L}_p(T_0) = \frac{\pi}{2}$ となるのは

$$\frac{\pi \hbar}{2\Delta E} \leq T_0 \quad \text{時間とエネルギー揺らぎのトレードオフ関係}$$

Margolus-Levitin 限界

Mandelstam-Tamm (MT) 限界はエネルギー揺らぎを用いた限界
同様にエネルギー期待値を用いた速度限界も知られている

$$T_o \geq \frac{\hbar\pi}{2(\langle H \rangle - E_g)}$$

基底状態エネルギー

(導出) 一般化を失わず $E_g = 0$ とする

$$\begin{aligned} 1 - \text{Re}[\langle \psi_0 | \psi_t \rangle] &= \sum_{n=0} |c_n|^2 \left(1 - \cos \frac{E_n t}{\hbar} \right) & 1 - \cos x \leq \frac{2}{\pi} (x + \sin x) \\ &\leq \sum_{n=0} |c_n|^2 \frac{2}{\pi} \left(\frac{E_n t}{\hbar} + \sin \frac{E_n t}{\hbar} \right) & \text{for } 0 \leq x \\ &= \frac{2}{\pi} \left(\frac{\langle \hat{H} \rangle t}{\hbar} - \text{Im}[\langle \psi_0 | \psi_t \rangle] \right) \end{aligned}$$

直交条件より $\text{Re}[\langle \psi_0 | \psi_{T_o} \rangle] = \text{Im}[\langle \psi_0 | \psi_{T_o} \rangle] = 0$ とおけば良い

量子速度限界の検証

Mandelstam-Tamm (MT) 限界

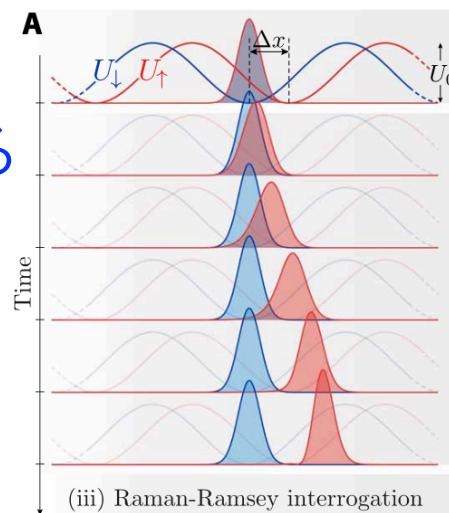
$$T_o \geq \frac{\hbar\pi}{2\Delta E}$$

エネルギー揺らぎ

一般の時刻では

$$T \geq \frac{\hbar}{\Delta E} \mathcal{L}_p(T) \quad \mathcal{L}_p(t) = \cos^{-1} \sqrt{F(t)}$$

冷却原子系による
二つの不等式の
検証



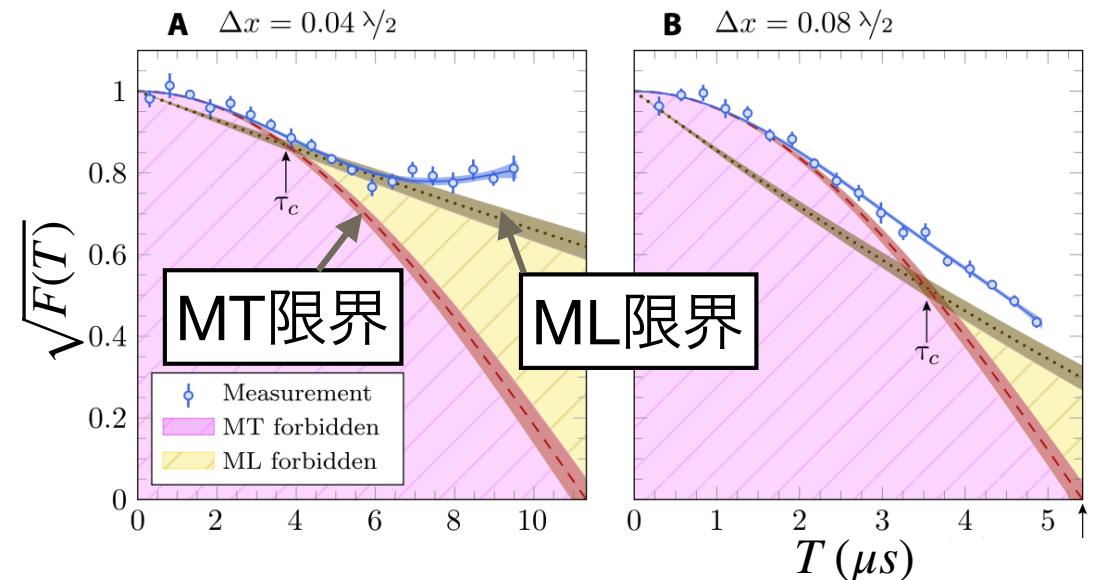
Margolus-Levitin (ML) 限界

$$T_o \geq \frac{\hbar\pi}{2(\langle H \rangle - E_g)}$$

エネルギー期待値

基底状態エネルギー

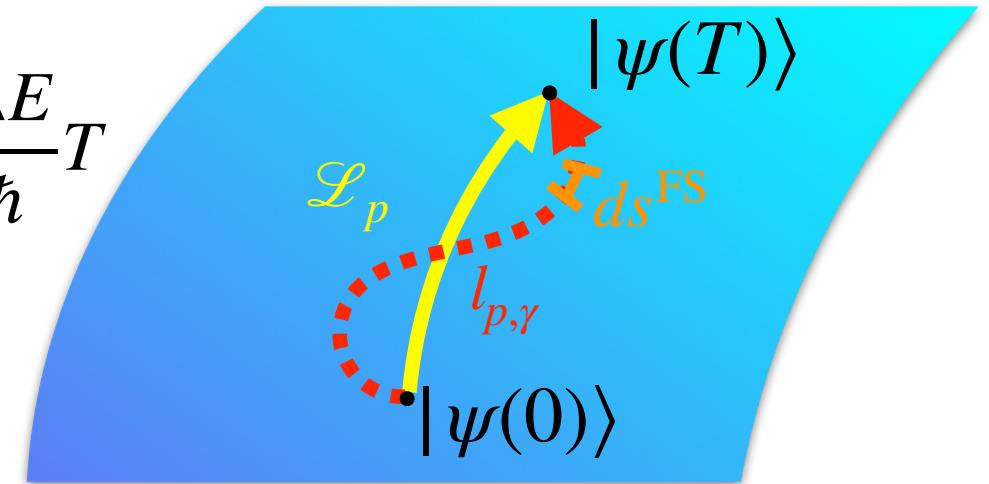
$$T \geq \frac{2\hbar}{\pi(\langle \hat{H} \rangle - E_g)} (\mathcal{L}_p(T))^2 \text{ (予想)}$$



MT限界と量子状態の幾何学

$$\mathcal{L}_p(T) := \mathcal{L}_p(|\psi(0)\rangle, |\psi(T)\rangle) \leq \frac{\Delta E}{\hbar} T$$

幾何学的意味がある



$$\mathcal{L}_p(|\psi(0)\rangle, |\psi(T)\rangle) \leq l_{p,\gamma}(|\psi(0)\rangle, |\psi(T)\rangle)$$

測地的距离

量子状態の

実際の軌道 γ の長さ

$$l_{p,\gamma}(|\psi(0)\rangle, |\psi(T)\rangle) = \int_{\gamma} ds^{\text{FS}}$$

$$ds^{\text{FS}} = \mathcal{L}_p(|\psi(t+dt)\rangle, |\psi(t)\rangle) \sim \sqrt{g_{tt}^{\text{FS}} dt dt}$$

MT限界と量子状態の幾何学

$$ds^{\text{FS}} = \mathcal{L}_p(|\psi(t+dt)\rangle, |\psi(t)\rangle) \sim \sqrt{g_{tt}^{\text{FS}} dt dt}$$

$$\mathcal{L}_p(|\psi(t+\delta t)\rangle, |\psi(t)\rangle)$$

$$= \cos^{-1} |1 + \langle \psi(t) | \partial_t \psi(t) \rangle \delta t + \langle \psi(t) | \partial_t^2 \psi(t) \rangle \delta t^2 / 2 + o(\delta t^2)|$$

$$= \cos^{-1}(1 + \langle \partial_t \psi(t) | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \partial_t \psi(t) \rangle \delta t^2 / 2 - \langle \partial_t \psi(t) | \partial_t \psi(t) \rangle \delta t^2 / 2 + o(\delta t^2))$$

$$= \sqrt{-\langle \partial_t \psi(t) | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \partial_t \psi(t) \rangle + \langle \partial_t \psi(t) | \partial_t \psi(t) \rangle \delta t + o(\delta t)}$$

$$g_{tt}^{\text{FS}} = \langle \partial_t \psi(t) | (1 - |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|) | \partial_t \psi(t) \rangle = \frac{\Delta E^2}{\hbar^2}$$

Fubini-Study計量

$$\mathcal{L}_p(|\psi(0)\rangle, |\psi(t)\rangle) \leq l_{p,\gamma}(|\psi(0)\rangle, |\psi(t)\rangle) = \frac{\overline{\Delta E}}{\hbar} T$$

MT限界の再導出

$$\bar{X} = \frac{1}{T} \int_0^T d\tau X(\tau)$$

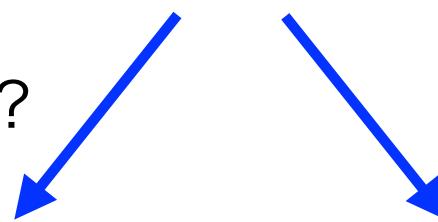
一般化と情報理論

純粹状態・孤立量子系のMT限界 $T \geq \frac{\hbar}{\Delta E} \mathcal{L}_p(T) = \frac{\hbar}{\Delta E} \cos^{-1} |\langle \psi(T) | \psi(0) \rangle|$

量子開放系への一般化？ ← 混合状態へ拡張する必要

$$\mathcal{L}_p(|\psi(t_1)\rangle, |\psi(t_2)\rangle) = \cos^{-1}(|\langle \psi(t_1) | \psi(t_2) \rangle|)$$

密度行列に対する距離は？



$$\mathcal{L}(\hat{\rho}(t_1), \hat{\rho}(t_2)) = \cos^{-1} \|\sqrt{\hat{\rho}(t_1)} \sqrt{\hat{\rho}(t_2)}\|_1$$

$$\mathcal{L}'(\hat{\rho}(t_1), \hat{\rho}(t_2)) = \cos^{-1} \text{Tr}[\sqrt{\hat{\rho}(t_1)} \sqrt{\hat{\rho}(t_2)}]$$

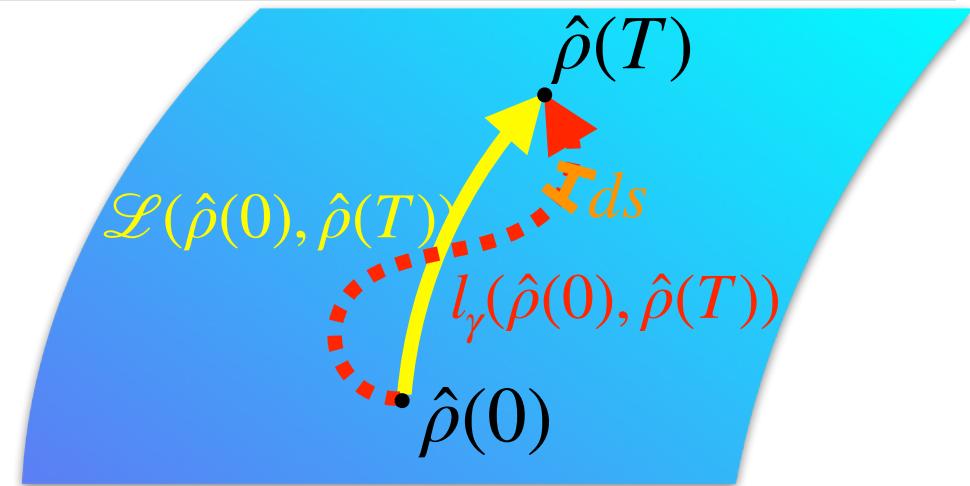
Bures距離

一意でない！ → 異なる距離の選び方は異なる速度限界を導く

以下ではBures距離に関する議論を行う

量子状態の幾何学との関係

密度行列の状態空間でも
幾何学的意味が存在



測地的距離 $\mathcal{L}(\hat{\rho}(0), \hat{\rho}(T)) \leq l_\gamma(\hat{\rho}(0), \hat{\rho}(T))$ 量子状態の
実際の軌道 γ の長さ

$$l_\gamma(\hat{\rho}(0), \hat{\rho}(T)) = \int ds \quad ds = \mathcal{L}(\hat{\rho}(t), \hat{\rho}(t+dt)) \sim \sqrt{g_{tt} dt dt}$$

$$= \int_0^T \sqrt{g_{tt}} dt = \frac{\sqrt{\mathcal{F}_Q}}{2} T$$

Bures距離の計量テンソル $g_{tt} = \mathcal{F}_Q/4$ $\mathcal{F}_Q = -\frac{2}{\hbar^2} \int_0^\infty dz \text{Tr} \left[\hat{\rho} e^{-\hat{\rho}z} \frac{d\hat{\rho}}{dt} e^{-\hat{\rho}z} \frac{d\hat{\rho}}{dt} \right]$

一般化と情報理論

純粹状態・孤立量子系のMT限界

$$T \geq \frac{\hbar}{\Delta E} \mathcal{L}_p(T) = \frac{\hbar}{\Delta E} \cos^{-1} |\langle \psi(T) | \psi(0) \rangle|$$

量子開放系への一般化

$$T \geq \frac{2}{\sqrt{\mathcal{F}_Q}} \mathcal{L}(\hat{\rho}(0), \hat{\rho}(T))$$

Bures距離

$$\mathcal{L}(\hat{\rho}(t_1), \hat{\rho}(t_2)) = \cos^{-1} \|\sqrt{\hat{\rho}(t_1)} \sqrt{\hat{\rho}(t_2)}\|_1$$

SLD量子Fisher情報量

$$\mathcal{F}_Q = -\frac{2}{\hbar^2} \int_0^\infty dz \text{Tr} \left[\hat{\rho} e^{-\hat{\rho}z} \frac{d\hat{\rho}}{dt} e^{-\hat{\rho}z} \frac{d\hat{\rho}}{dt} \right]$$

時間と量子情報量のトレードオフ関係

純粹状態、孤立量子系であればMT限界に帰着する：

$$\mathcal{L}(\hat{\rho}(0), \hat{\rho}(T)) \rightarrow \mathcal{L}_p(T) \quad \mathcal{F}_Q \rightarrow 4\Delta E^2/\hbar^2$$

物理量に対する速度限界

量子状態そのものよりも、物理量に着目した場合の方が実験的に重要な場合がしばしばある

$$\hat{H} = \hat{\sigma}_2^x \quad |\uparrow\uparrow\rangle \longrightarrow |\uparrow\downarrow\rangle$$

状態は直交しているが、物理量 $\hat{\sigma}_1^z$ は変化しない

期待値 $\langle \hat{A}(t) \rangle$ の各時刻での速度の上限

$$\left| \frac{d\langle \hat{A}(t) \rangle}{dt} \right| \leq 2\Delta A(t) \cdot \Delta E$$

どのように混合状態や開放量子系に一般化されるか？

$$\left| \frac{d\langle \hat{A}(t) \rangle}{dt} \right| \leq \Delta A(t) \cdot \sqrt{\mathcal{F}_Q}$$

(一般化) 量子Cramer-Rao不等式

量子推定理論で
重要な不等式

量子速度限界の関係のまとめ

孤立系・純粹状態

物理量に関する速度限界

$$\left| \frac{d\langle \hat{A}(t) \rangle}{dt} \right| \leq \frac{2}{\hbar} \Delta A(t) \cdot \Delta E$$

状態に関する速度限界

$$T \geq \frac{\hbar}{\Delta E} \mathcal{L}_p(T)$$

ML限界

$$T_o \geq \frac{\hbar\pi}{2(\langle H \rangle - E_g)}$$

MT限界

$$T_o \geq \frac{\hbar\pi}{2\Delta E}$$

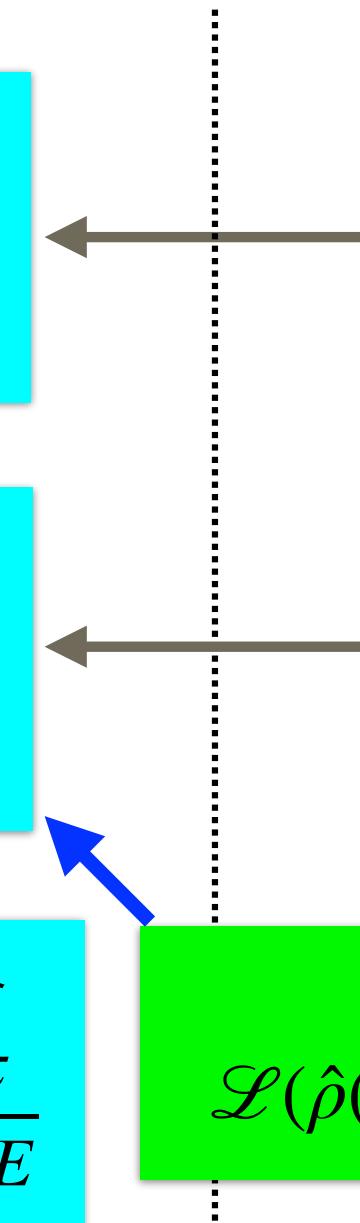
開放系・混合状態

$$\left| \frac{d\langle \hat{A}(t) \rangle}{dt} \right| \leq \Delta A(t) \cdot \sqrt{\mathcal{F}_Q}$$

$$T \geq \frac{2}{\sqrt{\mathcal{F}_Q}} \mathcal{L}(\hat{\rho}(0), \hat{\rho}(T))$$

幾何学的な不等式

$$\mathcal{L}(\hat{\rho}(0), \hat{\rho}(T)) \leq l_\gamma(\hat{\rho}(0), \hat{\rho}(T))$$



ここまでまとめ

速度限界は、遷移の速度や時間が、他の物理的な量により抑えられるという不等式を与える

孤立量子系では、時間とエネルギー揺らぎのトレードオフ関係が基本的な速度限界の一つである
(エネルギー期待値による速度限界も存在する)

一般には速度と量子情報量の不等式関係が得られ、これは量子状態の幾何学としても理解できる

2. 古典速度限界

参考文献：

- * 沙川貴大 『非平衡統計力学 - 情報熱力学からゆらぎの熱力学まで』
共立出版 (2022)
 - * 齊藤圭司 『ゆらぐ系の熱力学 非平衡統計力学の発展』
サイエンス社 (2022)
 - * Z. Gong and R. Hamazaki, International Journal
of Modern Physics B 36 (31), 2230007 (2022).
-

古典速度限界の研究の進展

開放量子系の速度限界

A. del Campo, et. al., PRL (2013)
M. M. Taddei, et. al., PRL (2013)
S. Deffner and E. Lutz, PRL (2013)

古典系の速度限界の存在

M. Okuyama and M. Ohzeki, PRL (2018)
B. Shanahan et al., PRL (2018)

確率過程における速度限界 (熱力学との関連)

N. Shiraishi et al., PRL (2018)
S. Ito and A. Dechant, PRX (2020)
S. B. Nicholson et al., Nat. Phys. (2020)

非線形進化ダイナミクス

K. Adachi, R. Iritani, RH, Commun. Phys. (2022)
L. P. García-Pintos, arXiv (2022)
M. Hoshino et al., arXiv (2022)

古典確率過程と情報論的不等式

簡単のため次の線形マスター方程式を考える

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_j W_{ij} p_j = \sum_j W_{ij} p_j - W_{ji} p_i$$

\vec{p} : 状態 i に対する確率 $\sum_i p_i = 1$
 W_{ij} : 状態 j から i への遷移 $\sum_i W_{ij} = 0$

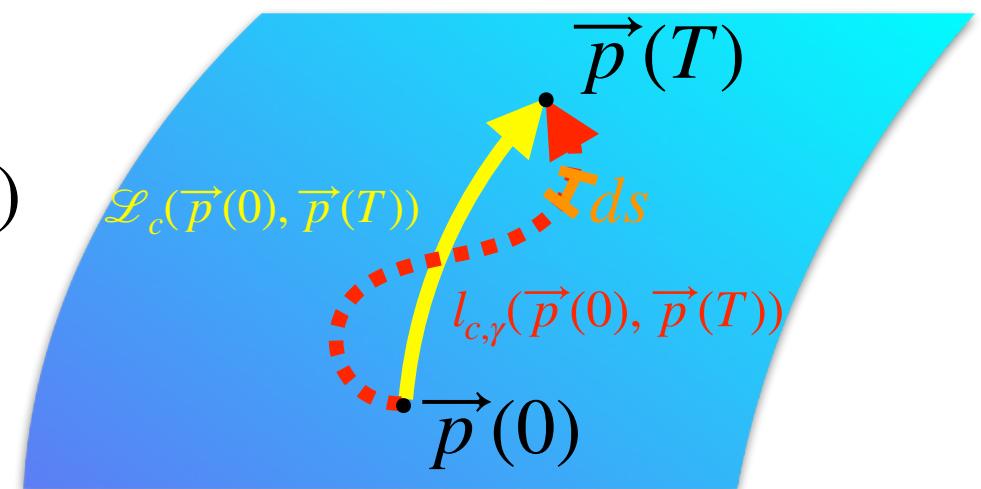
量子系の量子状態の幾何学の代わりに、
確率分布の幾何学を考えることができる

$$\mathcal{L}_c(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) \leq l_{c,\gamma}(\vec{p}(0), \vec{p}(T))$$

測地的距離

確率分布の

実際の軌道 γ の長さ



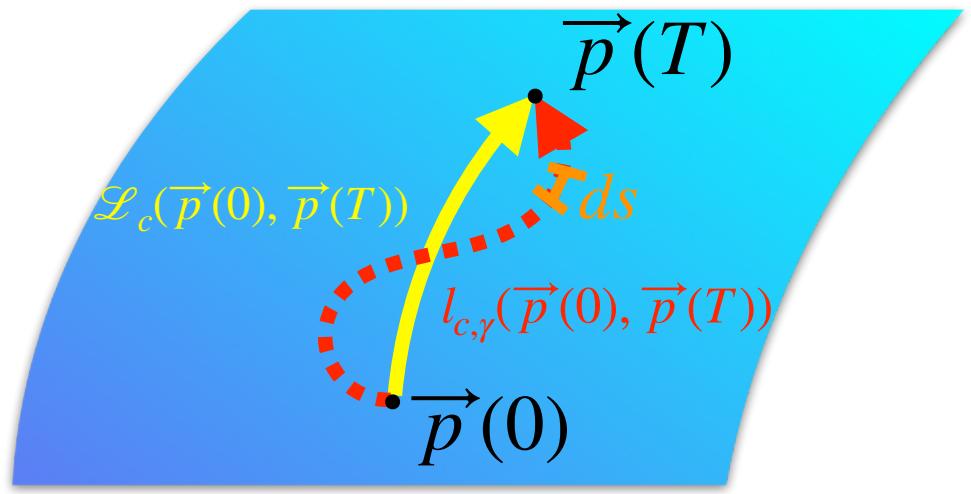
古典確率過程と情報論的不等式

$$\mathcal{L}_c(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) \leq l_{c,\gamma}(\vec{p}(0), \vec{p}(T))$$

測地的距離

確率分布の

実際の軌道 γ の長さ



$$l_{c,\gamma}(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) = \int ds^c \quad ds^c = \mathcal{L}_c(\vec{p}(t), \vec{p}(t+dt)) \sim \sqrt{g_{tt}^c dt dt}$$

$$\mathcal{L}_c(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) = \cos^{-1} \sum_i \sqrt{p_i(0)p_i(T)}$$

$$\rightarrow g_{tt}^c = \mathcal{F}_c / 4$$

$$\mathcal{F}_C = \langle (\dot{p}/p)^2 \rangle = \sum_i \dot{p}_i^2 / p_i$$

古典Fisher情報量

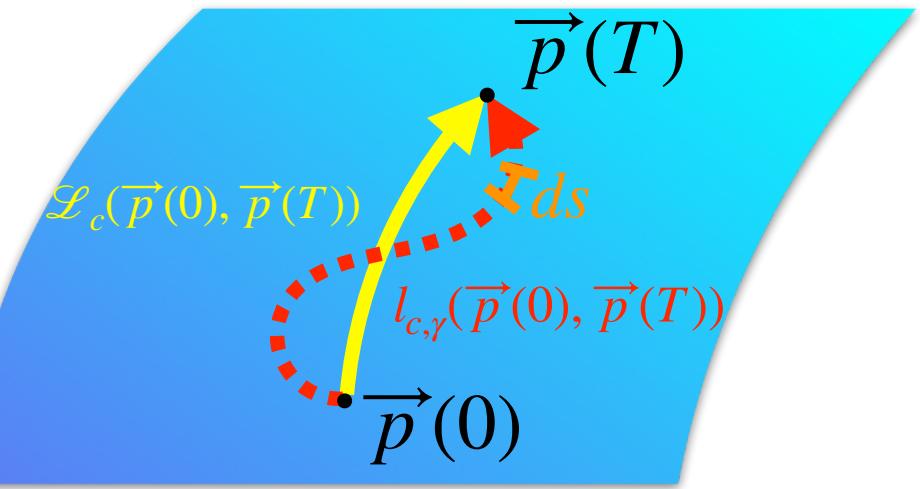
古典確率過程と情報論的不等式

$$\mathcal{L}_c(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) \leq l_{c,\gamma}(\vec{p}(0), \vec{p}(T))$$

測地的距離

確率分布の

実際の軌道 γ の長さ



よって

$$\mathcal{L}_c(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) \leq \frac{\sqrt{\mathcal{F}_c}}{2} T$$

時間と古典情報量の
トレードオフ関係

これは量子系の密度演算子の速度限界に対し
(非対角項を落とした) 古典極限になっている

逆に、この式の「量子版」は非可換性のために
一意でない（密度行列の距離の取り方に依存）

物理量に関する速度限界

同様に、物理量の期待値の速度も議論できる

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_j W_{ij} p_j = \sum_j W_{ij} p_j - W_{ji} p_i$$

\vec{p} : 状態 i に対する確率 $\sum_i p_i = 1$
 W_{ij} : 状態 j から i への遷移 $\sum_i W_{ij} = 0$

$$\text{物理量 } A = \{A_i\} \text{ について } \langle A \rangle = \sum_i A_i p_i$$
$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \sum_i A_i \dot{p}_i = \sum_i p_i (A_i - \langle A \rangle) \dot{p}_i / p_i$$

$\sum_i \dot{p}_i = 0$

$$\left| \frac{d\langle A \rangle}{dt} \right| \leq \Delta A \sqrt{\mathcal{F}_C}$$

$$\mathcal{F}_C = \langle (\dot{p}/p)^2 \rangle = \sum_i \dot{p}_i^2 / p_i$$

古典クラメリ・ラオ不等式

量子速度限界との対応

量子純粋状態 $|\psi\rangle$ の場合

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \frac{2}{\hbar} \Delta A(t) \cdot \Delta E$$

古典的な確率混合がない場合

$$\mathcal{F}_Q = 4\Delta E^2/\hbar^2$$

一般の量子混合状態の場合

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \Delta A(t) \cdot \sqrt{\mathcal{F}_Q}$$

量子クラメル・ラオ不等式

\mathcal{F}_Q : 量子Fisher情報量

古典的な確率分布 \vec{p} の場合

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \Delta A(t) \cdot \sqrt{\mathcal{F}_C}$$

量子効果がない場合

古典クラメル・ラオ不等式

$$\mathcal{F}_C = \sum_i \frac{1}{p_i} \left(\frac{dp_i}{dt} \right)^2 : \text{古典Fisher情報量}$$

進化・生態のダイナミクス

非線形個体群動態論 (population dynamics)

種や遺伝子型の数が変化する

population dynamicsの方程式

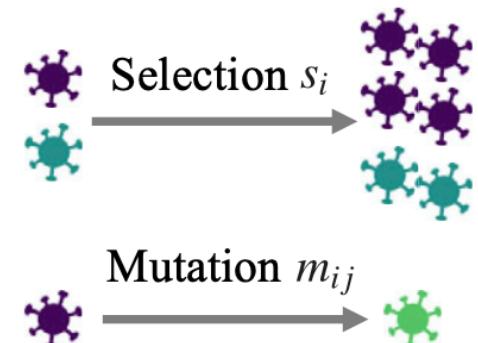
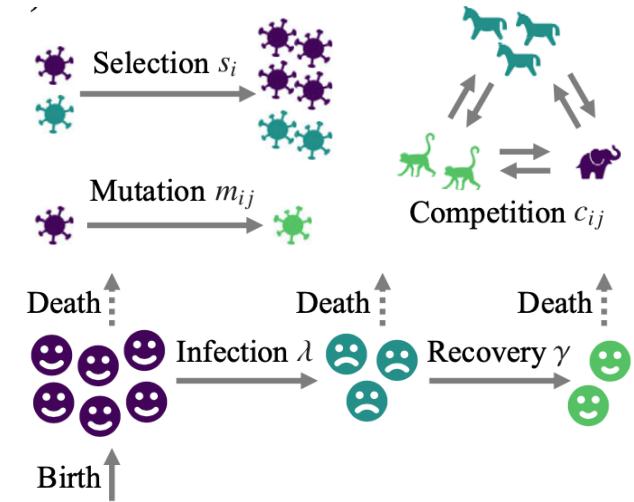
$$\frac{dN_i}{dt} = F_i(N_1, \dots, N_S)$$

$N_i(t)$: 種 i ($1 \leq i \leq S$) の個数

例) 変異ありの自然淘汰

$$F_i = s_i N_i + \sum_{j=1}^S m_{ij} N_j$$

s_i (> 0): 増殖率; m_{ij} ($\geq 0, i \neq j$): 変異率



進化・生態における速度限界

N_i の総和 N_{tot} は時間変化するので、代わりに比率 P を考える

$$P := \left\{ P_i \right\}_{i=1}^S := \left\{ N_i / N_{\text{tot}} \right\}_{i=1}^S, \quad N_{\text{tot}} = \sum_{j=1}^S N_j$$
$$\rightarrow \partial_t P_i = \frac{F_i(N_{\text{tot}} P_1, \dots, N_{\text{tot}} P_S)}{N_{\text{tot}}} - P_i \sum_{j=1}^S \frac{F_j(N_{\text{tot}} P_1, \dots, N_{\text{tot}} P_S)}{N_{\text{tot}}}$$

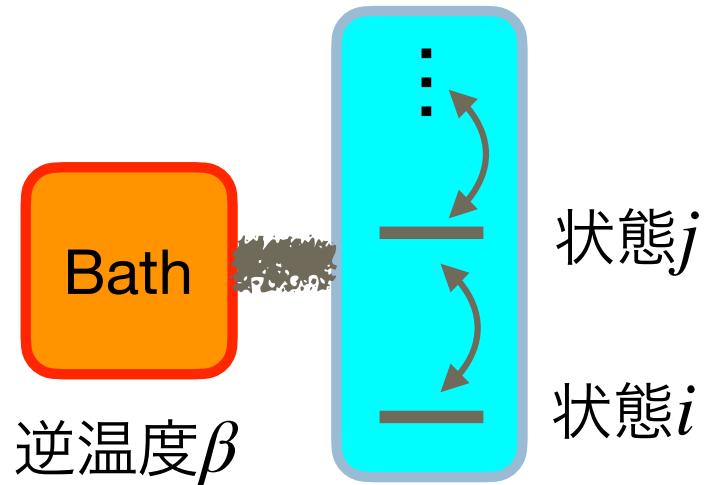
非線形性

P は規格化されている ($\sum_i P_i = 1$) → 確率分布と同様に扱える

$$\rightarrow \left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \Delta A(t) \cdot \sqrt{\mathcal{F}_C} \quad \langle A \rangle := \sum_i A_i P_i$$

非線形系特有の分岐現象のため、臨界点付近ではスケーリング則が現れ、速度限界を用いてその指数についての不等式も得られる

速度と不可逆性？



$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_j W_{ij} p_j = \sum_j W_{ij} p_j - W_{ji} p_i$$

早い遷移は不可逆性を伴う？

Shiraishi, Funo, Saito, PRL (2018)

(この講演では簡単のため) 単一熱浴、詳細釣り合いを仮定

$$e^{-\beta E_j} W_{ij} = e^{-\beta E_i} W_{ji} \quad E_i : \text{状態 } i \text{ のエネルギー}$$

系の（シャノン）エントロピー $S = - \sum_i p_i \ln p_i$

系のエントロピー増加率 $\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{2} \sum_i \frac{dp_i}{dt} \ln p_i = \sum_{ij} (W_{ij} p_j - W_{ji} p_i) \ln \frac{p_j}{p_i}$

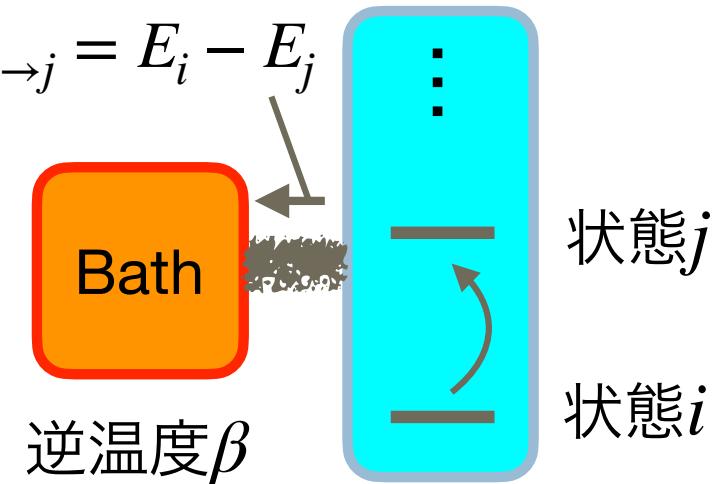
エントロピー生成率

(熱浴のエントロピー増加率) = (逆温度) $Q_{i \rightarrow j} = E_i - E_j$
 × (単位時間あたりに熱浴に流れ込む熱)

$$\frac{dS_B}{dt} = \beta \sum_{ij} W_{ji} p_i Q_{i \rightarrow j} = \beta \sum_{ij} W_{ij} p_j (E_i - E_j)$$

$$= \sum_{ij} W_{ij} p_j \ln \frac{W_{ij}}{W_{ji}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} (W_{ij} p_j - W_{ji} p_i) \ln \frac{W_{ij}}{W_{ji}}$$

詳細釣り合い



トータルのエントロピー生成率は

$$\dot{\Sigma} = \frac{dS}{dt} + \frac{dS_B}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{ij} (W_{ij} p_j - W_{ji} p_i) \ln \frac{W_{ij} p_j}{W_{ji} p_i} \geq 0$$

不可逆性を表す！

熱力学的速度限界

不可逆性と速度の関係を考えるために、次の確率分布間の距離を導入

$$L(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) = \sum_i |p_i(0) - p_i(T)|$$

任意の（時間依存しない）物理量 A に対して

$$|\langle A(0) \rangle - \langle A(T) \rangle| \leq (\max_i A_i) \cdot L(\vec{p}(0), \vec{p}(T))$$

熱力学的速度限界

$$L(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) \leq \sqrt{2T \Sigma \mathcal{A}}$$

$$\mathcal{A} = \sum_{i \neq j} W_{ij} p_j : \text{Dynamical activity}$$

$$\Sigma = \int_0^t d\tau \dot{\Sigma}(\tau) : \text{全エントロピー生成}$$

遷移時間と不可逆性を同時に小さくすることはできない！

熱力学的速度限界（証明）

$$L(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) \leq \tilde{l}_{c,\gamma}(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) = \int_{\gamma} d\tilde{s}_c$$

$$d\tilde{s}^c = L(\vec{p}(t), \vec{p}(t+dt)) = \sqrt{\tilde{g}_{tt}^c dt dt} = \sum_i |\dot{p}_i| dt$$

$$\text{よって } L(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) \leq \int_0^T d\tau \sum_i |\dot{p}_i(\tau)|$$

CS不等式

$$\left(\sum_i |\dot{p}_i| \right)^2 \leq \left(\sum_{i \neq j} |W_{ij}p_j - W_{ji}p_i| \right)^2 \leq \sum_{i \neq j} (W_{ij}p_j + W_{ji}p_i) \sum_{i \neq j} \frac{|W_{ij}p_j - W_{ji}p_i|^2}{(W_{ij}p_j + W_{ji}p_i)}$$

$$\leq 2 \sum_{i \neq j} W_{ij}p_j \sum_{i \neq j} W_{ij}p_j \ln \frac{W_{ij}p_j}{W_{ji}p_i} = 2 \mathcal{A} \dot{\Sigma}$$

$$(a-b)\ln \frac{a}{b} \geq \frac{2(a-b)^2}{a+b} \quad \forall a, b \geq 0$$

[N. Shiraishi et al., Phys. Rev. Lett. 121, 070601 (2018).]

熱力学的速度限界（証明）

$$L(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) \leq \tilde{l}_{c,\gamma}(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) = \int_{\gamma} d\tilde{s}_c$$

$$\begin{aligned} L(\vec{p}(0), \vec{p}(T)) &\leq \int_0^T d\tau \sum_i |\dot{p}_i(\tau)| \\ &\leq \int_0^T d\tau \sqrt{2\mathcal{A}\dot{\Sigma}} \leq \sqrt{2T\mathcal{A}\dot{\Sigma}} \quad \text{CS不等式} \end{aligned}$$

$$(a - b) \ln \frac{a}{b} \geq \frac{2(a - b)^2}{a + b} \quad \forall a, b \geq 0$$

$\leq 2 \sum_{i \neq j} W_{ij} p_j \sum_{i \neq j} W_{ij} p_j \ln \frac{W_{ij} p_j}{W_{ji} p_i} = 2\mathcal{A}\dot{\Sigma}$

[N. Shiraishi et al., Phys. Rev. Lett. 121, 070601 (2018).]

古典速度限界の関係のまとめ

古典系

(古典Cramer-Rao不等式)

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \Delta A(t) \cdot \sqrt{\mathcal{F}_C}$$

開放量子系

(量子Cramer-Rao不等式)

$$\left| \frac{d\langle \hat{A}(t) \rangle}{dt} \right| \leq \Delta A(t) \cdot \sqrt{\mathcal{F}_Q}$$

情報論的
速度限界

$$T \geq \frac{2}{\sqrt{\mathcal{F}_C}} \mathcal{L}(\vec{p}(0), \vec{p}(T))$$

$$T \geq \frac{2}{\sqrt{\mathcal{F}_Q}} \mathcal{L}(\hat{\rho}(0), \hat{\rho}(T))$$

熱力学的速度限界

$$T \geq \frac{L(\vec{p}(0), \vec{p}(T))^2}{2 \Sigma \mathcal{A}}$$

幾何学的な不等式

$$\mathcal{L}(\hat{\rho}(0), \hat{\rho}(T)) \leq l_\gamma(\hat{\rho}(0), \hat{\rho}(T))$$

ここまでまとめ

速度限界の概念は古典系にも存在するということが
近年になってわかつってきた

情報論的な速度限界が確率過程や
population dynamicsにおいて存在する

速度がエントロピー生成によって抑えられるという
熱力学的な速度限界も知られている

4. Lieb-Robinson限界

参考文献：

* M. B. Hastings, arXiv:1008.5137

* Z. Gong and R. Hamazaki, International Journal
of Modern Physics B 36 (31), 2230007 (2022).

量子速度限界の問題点

量子速度限界

$$\frac{\mathcal{L}_p(T)}{\Delta E} \leq T \quad \mathcal{L}_p(T) = \cos^{-1} |\langle \psi(T) | \psi(0) \rangle|$$

一方 (Part Iで見たような) 量子多体系では、

$\Delta E \sim V^{1/2} \rightarrow \infty$ ($V \rightarrow \infty$)なので、自明な下限となる

現実に興味のある量子多体系には局所性がある：
この局所性を用いて非自明な普遍法則を得られるか？

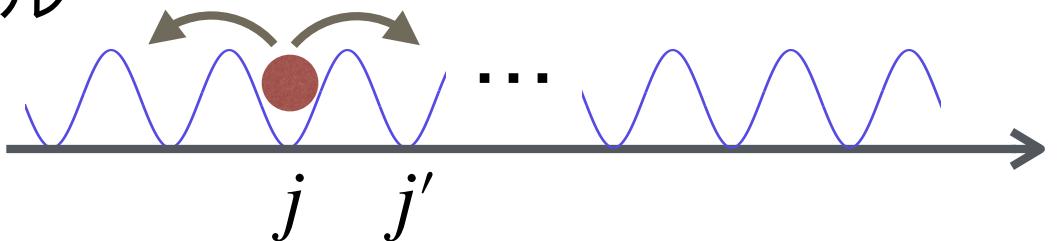
*Lieb-Robinson限界 (本セクション)

*マクロな遷移に対する速度限界 (次セクション)

局所相互作用と伝搬（自由粒子系）

一次元格子上の一ボゾンモデル

$$\hat{H} = \sum_{jj'} h_{jj'} |j\rangle\langle j'| = \sum_{jj'} h_{jj'} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'}$$



$$h_{jj'} = 0 \quad \forall |j - j'| > \chi \quad \text{（χは系のサイズに依存しない）}$$

すると $|\langle r | e^{-i\hat{H}t} | 0 \rangle| \leq \sum_{n=\lceil |r|/\chi \rceil}^{\infty} \frac{\|h\|^n}{n!} t^n < e^{e\|h\|t - \frac{|r|}{\chi}}$

これは $\|[\hat{a}_r(t), \hat{a}_0(0)]\| \leq e^{-\kappa(|r|-vt)}$ と書ける

$$\kappa = \chi^{-1}, v = \chi e\|h\|$$

局所相互作用と伝搬（自由粒子系）

一次元格子上の一ボゾンモデル

$$\|[\hat{a}_r(t), \hat{a}_0(0)]\| \leq e^{-\kappa(|r|-vt)}$$

ν : Lieb-Robinson速度

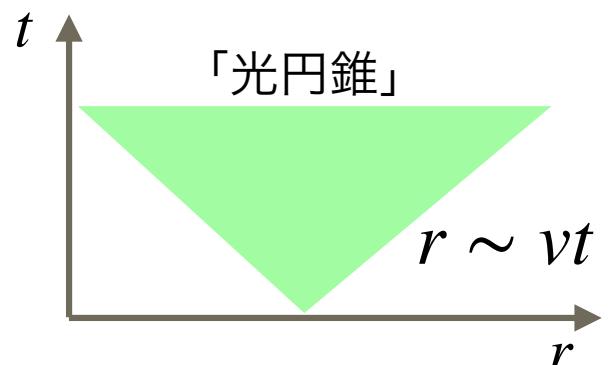
$$\kappa = \chi^{-1}, \nu = \chi e \|h\|$$

$|r|/\nu \gg t$ の時、上限は指数減衰する

$|r|/\nu \lesssim t$ の時、自明な上限になる

→ 局所相互作用効果 (χ が有限) により、

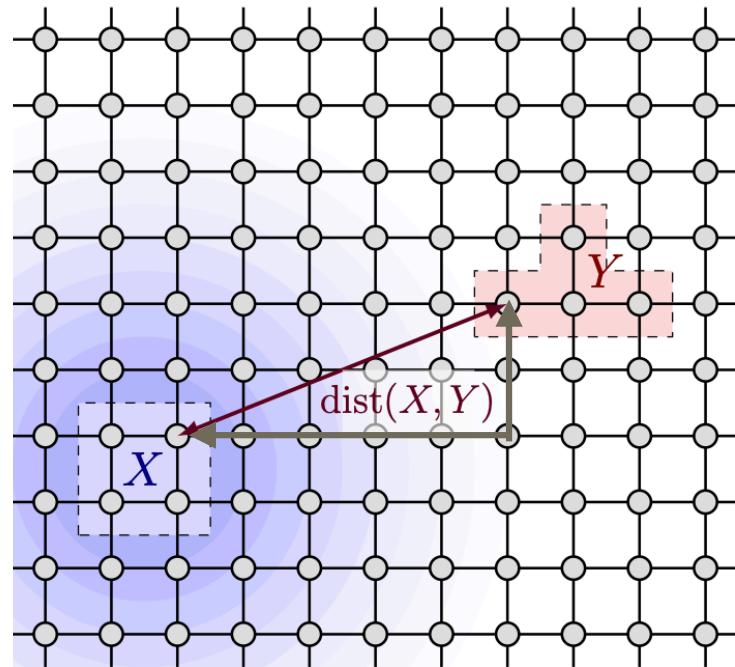
非相対論的な「光円錐」ができ、その外では情報が伝搬しない



注：相対論的な光円錐と異なり、指数的に小さい情報は漏れる

Lieb-Robinson限界

より一般の多体系で、同様な光円錐の存在が示せる



局所相互作用する格子スピン系において、部分領域 X, Y にサポートを持つ任意の物理量 \hat{O}_X, \hat{O}_Y に対して

$$\|[\hat{O}_X(t), \hat{O}_Y]\| \leq ce^{-\kappa[\text{dist}(X,Y)-vt]}$$

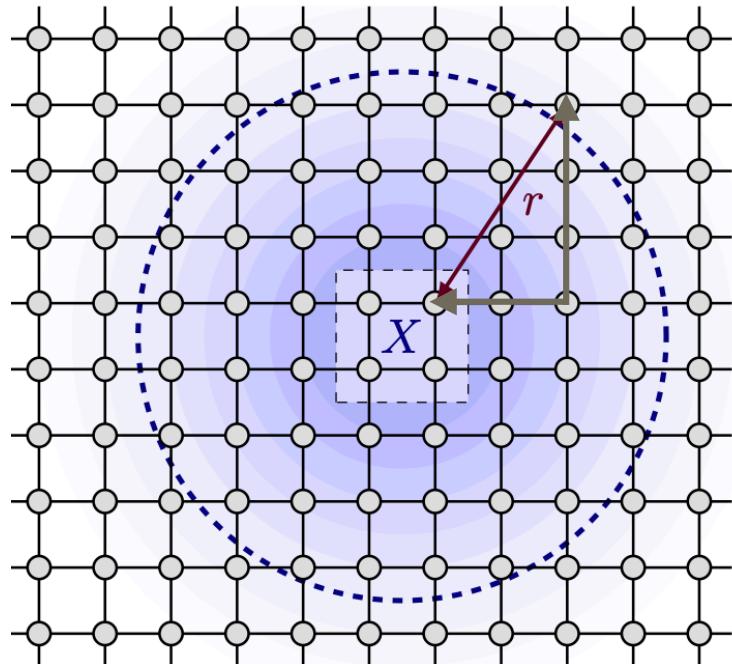
$$c = 2\|\hat{O}_X\|\|\hat{O}_Y\| \min(|X|, |Y|)$$

$$t \ll \frac{\text{dist}(X, Y)}{v} \text{ では、 } [\hat{O}_X(t), \hat{O}_Y] \simeq 0$$

多体系でも、情報伝搬の速度は有限の速度 v を超えない！

Lieb-Robinson限界

(定数倍を除いて) 同値な表現



局所相互作用する格子スピン系において、
部分領域 X にサポートを持つ
任意の物理量 \hat{O}_X に対して

$$\|\hat{O}_X(t) - \hat{O}_X^{[r]}(t)\| \leq c'e^{-\kappa[r-vt]}$$

$$\hat{O}_X^{[r]}(t) \equiv \frac{\mathbb{I}_{\overline{X^r}}}{\text{Tr } \mathbb{I}_{\overline{X^r}}} \otimes \text{Tr}_{\overline{X^r}} [\hat{O}_X(t)]$$

$$X^r \equiv \{x : \text{dist}(x, X) < r\} \quad (r \geq 1) \quad \overline{X^r} \text{は } X^r \text{の補集合}$$

物理量 \hat{O}_X の時間 t 後のサポートはほぼ $X^{r \approx vt}$ 内にある

同値性の証明のアイデア

$$\textcircled{1} \quad \|[\hat{O}_X(t), \hat{O}_Y]\| \leq ce^{-\kappa[\text{dist}(X,Y)-vt]} \quad \textcircled{2} \quad \|\hat{O}_X(t) - \hat{O}_X^{[r]}(t)\| \leq c'e^{-\kappa[r-vt]}$$

$\textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2}$

U を $\overline{X^r}$ に作用する演算子、 $d\mu(U)$ をユニタリーハール測度として

$$\hat{O}_X^{[r]}(t) = \int d\mu(U) U \hat{O}_X(t) U^\dagger$$

$$\|\hat{O}_X(t) - \hat{O}_X^{[r]}(t)\| \leq \int d\mu(U) \| [U, \hat{O}_X(t)] \| \stackrel{\textcircled{1}}{\lesssim} e^{-\kappa(r-vt)}$$

三角不等式・ノルムのユニタリー不变性

$\textcircled{2} \rightarrow \textcircled{1}$

$$\begin{aligned} \|[\hat{O}_X(t), \hat{O}_Y]\| &= \|[\hat{O}_X(t) - \hat{O}_X^{[\text{dist}(X,Y)]}(t), \hat{O}_Y]\| \\ &\stackrel{\textcircled{2}}{=} 2 \|[\hat{O}_X(t) - \hat{O}_X^{[\text{dist}(X,Y)]}(t)]\| \|\hat{O}_Y\| \lesssim e^{-\kappa[\text{dist}(X,Y)-vt]} \end{aligned}$$

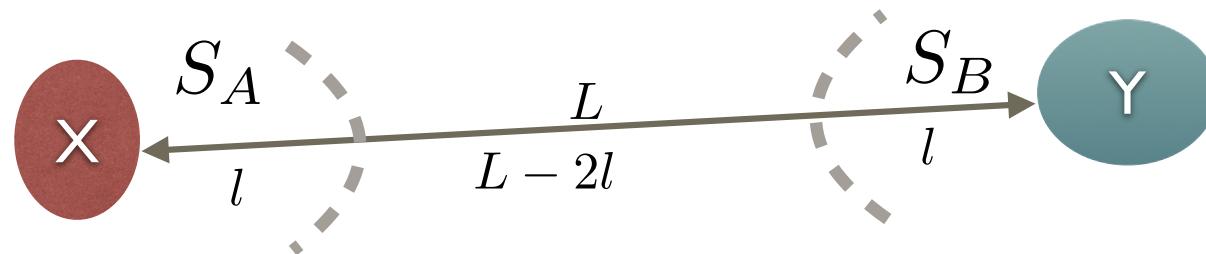
相関の伝搬

初期状態 $|\psi\rangle$ が相関長 χ をもって指数減衰すると仮定

$$|\langle\psi|\hat{O}_A\hat{O}_B|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{O}_A|\psi\rangle\langle\psi|\hat{O}_B|\psi\rangle| \leq Ce^{-\text{dist}(A,B)/\chi}$$

$$\text{この時 } |\langle\psi|\hat{O}_X(t)\hat{O}_Y(t)|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{O}_X(t)|\psi\rangle\langle\psi|\hat{O}_Y(t)|\psi\rangle| \leq C'e^{-(L-2vt)/\chi'}$$

$t \sim L/2v$ までは相関が作られない！



S. Bravyi et al.,
PRL (2006)

LR限界 $\|\hat{O}_X(t) - \hat{O}_X^{[r]}(t)\| \leq c'e^{-\kappa(r-vt)}$

初期状態

$$|\langle\psi|\hat{O}_X^{[r]}(t)\hat{O}_Y^{[r]}(t)|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{O}_X^{[r]}(t)|\psi\rangle\langle\psi|\hat{O}_Y^{[r]}(t)|\psi\rangle| \leq Ce^{-(L-2r)/\chi}$$

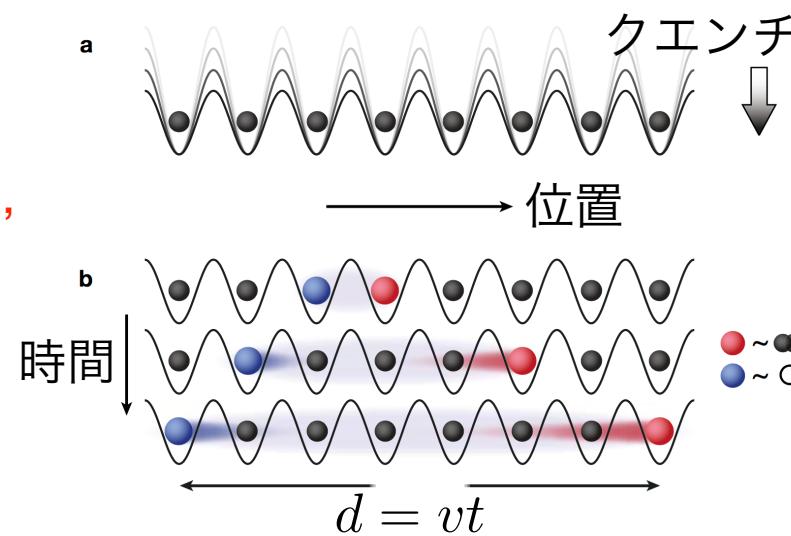
Lieb-Robinson限界に関する実験

実験：Bose-Hubbard模型

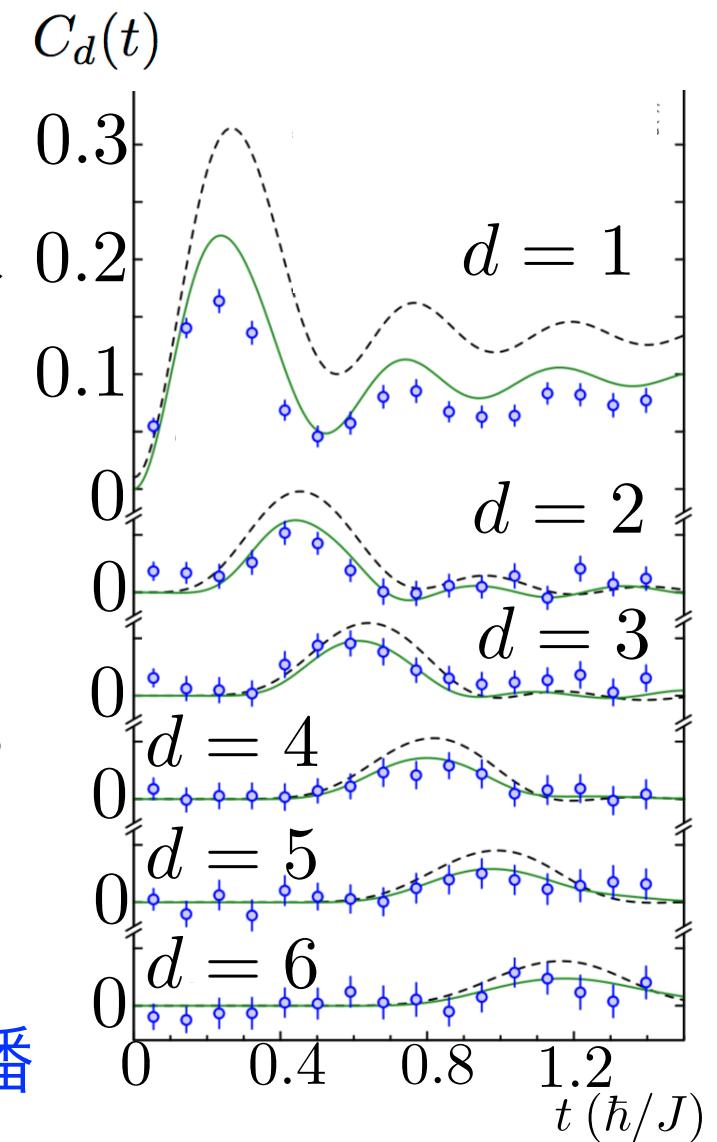
$$C_d(t) = \langle \hat{s}_j(t) \hat{s}_{j+d}(t) \rangle - \langle \hat{s}_j(t) \rangle \langle \hat{s}_{j+d}(t) \rangle$$

\hat{s}_j : 粒子数のパリティ

M. Cheneau et al.,
Nature (2012)



準粒子による一定速度での情報の伝播



ここまでまとめ

既存の量子速度限界はマクロ系、多体系では
しばしば無意味な不等式になってしまう

Lieb-Robinson限界は量子多体系の
相関伝搬速度に関する厳密な上限を与える

5. マクロな遷移に対する速度限界

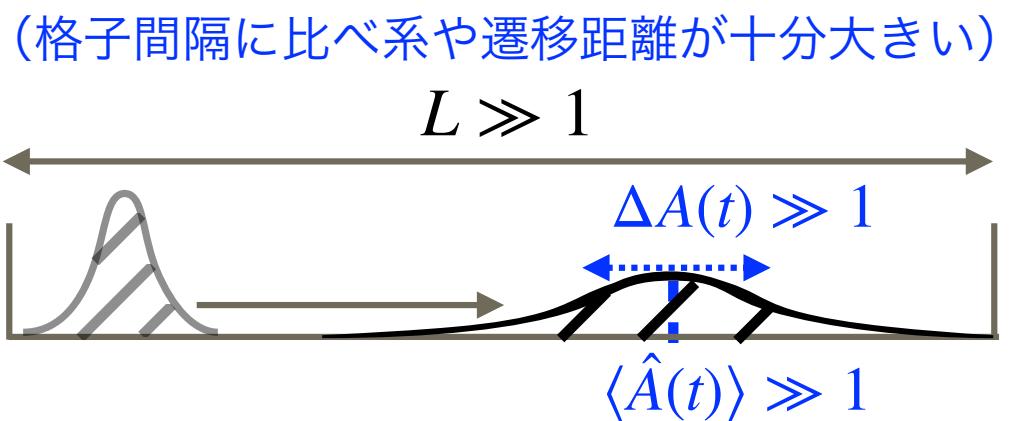
非平衡遷移の物理学

重要な非平衡過程の一つ：粒子等のマクロな距離の輸送

興味ある物理量：

原子の平均変位 $\langle \hat{A}(t) \rangle$ 、

揺らぎ $\Delta A(t)$ など



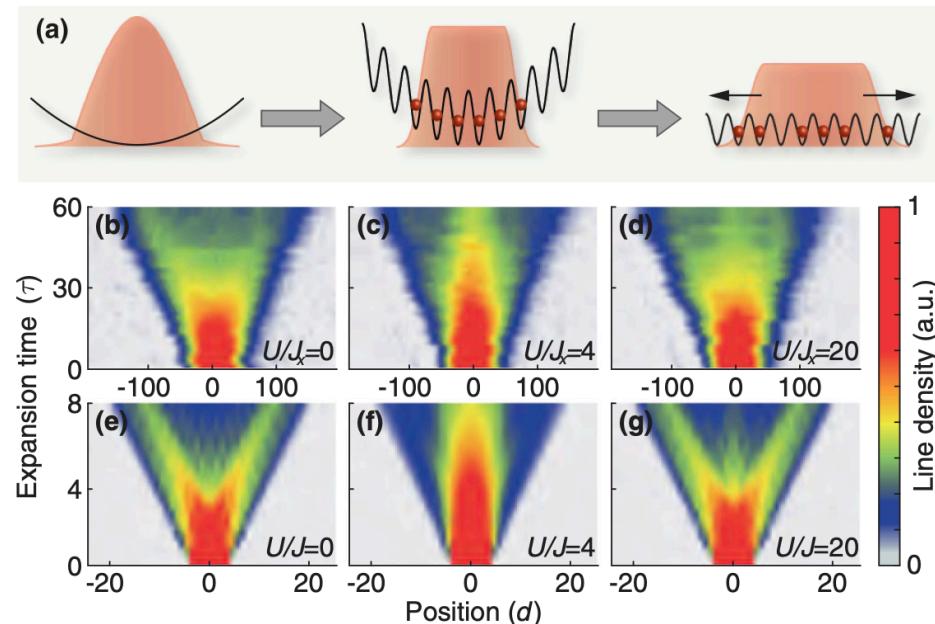
非一様な初期状態からの熱平衡化、quantum state transferなど、

非平衡量子系において重要な役割を果たす

非平衡遷移の物理学

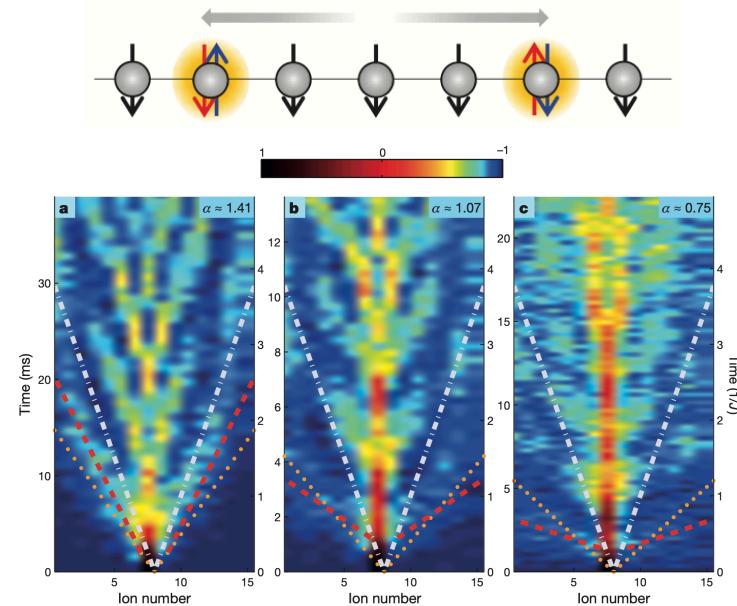
重要な非平衡過程の一つ：粒子等のマクロな距離の輸送

J. P. Ronzheimer et al., PRL 110, 205301 (2013).



原子集団の輸送

P. Jurcevic et al., Nature 511, 202 (2014).



準粒子励起の伝搬

広がった量子系でマクロな距離の輸送が起こる際、
その遷移速度に対して普遍的に成立する制限はあるか？

量子系の遷移速度に対する既存の理論

量子速度限界 「系の全エネルギー揺らぎが遷移速度を制限」

物理量の瞬間速度 $|d\langle \hat{A}(t) \rangle / dt| \leq 2\Delta A(t) \cdot \Delta H$ $\Delta O = \sqrt{\langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2}$

マクロに広がった量子系での遷移では意味をなさない

(輸送過程が局所的に進行するという事実が考慮されていない)

原子集団の輸送において、平均変位の速度 $|d\langle \hat{A}(t) \rangle / dt|$ は有限だが

量子速度限界（左辺）は L が大きいと際限なく発散： $\Delta A(t) \sim \min(t^\alpha, L)$ ($\alpha > 0$)

Lieb-Robinson限界 「マクロ系の相関は有限な速度 v 以下で伝搬」

一般の相関の伝搬速度を上から抑えるための上限のため、緩い

(通常の量子速度限界と異なり、 v は量子状態に依存しない)

期待値の速度などの基本的な量に対してはさらに緩い上限しか与えない

既存の理論は量子輸送の速度に対し満足な制限を与えない

量子系の遷移速度に対する既存の理論

量子速度限界 「系の全エネルギー揺らぎが遷移速度を制限」

確率の局所保存則に注目することで、
マクロに広がった系の非平衡遷移に対して
既存の理論よりもタイトとなる量子速度限界が導ける

RH, PRX Quantum 3 (2), 020319 (2022).

(通常の量子速度限界と異なり、 ν は量子状態に依存しない)

期待値の速度などの基本的な量に対してはさらに緩い上限しか与えない
既存の理論は量子輸送の速度に対し満足な制限を与えない

連続系における一般的な議論

連續空間 $\{\mathbf{x}\}$ で定義された系を考える (離散系は後で議論)

物理量 $A = \{A(\mathbf{x})\}$ の期待値 $\langle A(t) \rangle = \int d\mathbf{x} A(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}, t)$ 確率密度関数

局所的に遷移が起こることをどのように取り入れるか?

← 確率の局所保存則 !

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = - \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$$

確率流密度

$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} |\mathbf{j}| = 0$ を仮定

$$\frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} = \int d\mathbf{x} A(\mathbf{x}) \dot{\rho}(\mathbf{x}, t) = - \int d\mathbf{x} A(\mathbf{x}) \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \int d\mathbf{x} \nabla A(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$$

部分積分

Cauchy-Schwarz

不等式

$$\rightarrow \left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \sqrt{\langle (\nabla A)^2 \rangle \left\langle \left(\frac{\mathbf{j}}{\rho} \right)^2 \right\rangle}$$

Aの勾配
確率流密度

連続系における量子速度限界

非線形シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}} + g |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \right) \psi(\mathbf{x}, t) \quad \int d\mathbf{x} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 1$$

例) 原子集団の (平均場的) ダイナミクスを記述

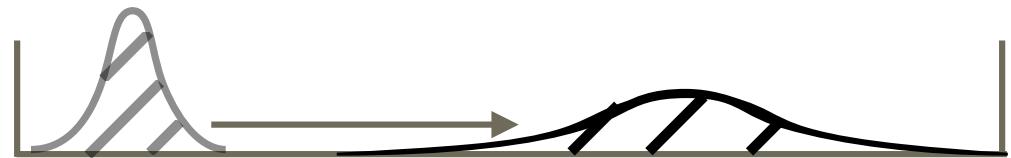
$|\psi|^2 = \rho$ は規格化された粒子密度 (確率密度関数と等価)

次のような ρ と結合した物理量に注目

$$\langle A(t) \rangle = \int d\mathbf{x} A(\mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \int d\mathbf{x} A(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}, t)$$

エネルギー揺らぎによる速度限界は意味をなさない

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \frac{2}{\hbar} \Delta A \Delta E$$



連続系における量子速度限界

この系では次の連続の式が成立 : $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j} = -\nabla \cdot \left(\rho \frac{\hbar \nabla \theta}{m} \right)$

確率の局所保存則を用いた速度限界を適用

$$\psi = \sqrt{\rho} e^{i\theta}$$

θ : 量子位相

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \sqrt{\langle (\nabla A)^2 \rangle \left\langle \left(\frac{\mathbf{j}}{\rho} \right)^2 \right\rangle}$$

$$= \frac{\hbar}{m} \sqrt{\langle (\nabla A)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\nabla \theta)^2 \rangle} = \sqrt{\langle (\nabla A)^2 \rangle} \sqrt{2E_{\text{kin}}}$$

$$\mathbf{j} = \rho \frac{\hbar \nabla \theta}{m}$$

原子集団の運動エネルギー

$$E_{\text{kin}} = \int d\mathbf{x} \frac{\rho |\nabla \theta|^2 \hbar^2}{2m^2}$$

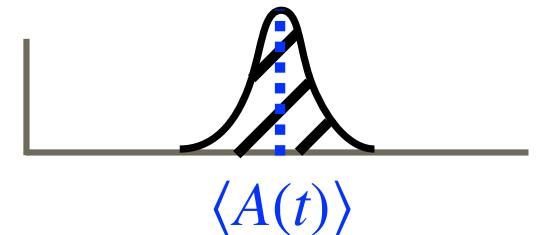
速度は運動エネルギーによって抑えられる

cf) Mandelstam-Tamm限界は全エネルギー揺らぎ

巨視的な遷移での有効性

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \sqrt{\langle (\nabla A)^2 \rangle} \sqrt{2E_{\text{kin}}} \leq \|\nabla A\|_\infty \sqrt{2E_{\text{kin}}}$$

$$\|\nabla A\|_\infty = \max_{\mathbf{x}} \|\nabla A(\mathbf{x})\|_2$$



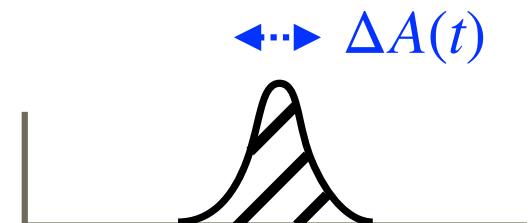
なぜ巨視的な遷移に有効か? → 多くの場合 $\nabla A \ll \Delta A$!

例) $A = x$ の時、 $\langle (\nabla x)^2 \rangle = \|\nabla x\|_\infty = 1$ は系のサイズや時間によらない発散しない意味のある上限を得る $\left| \frac{d\langle x(t) \rangle}{dt} \right| \leq \sqrt{2E_{\text{kin}}} \quad (\ll \frac{2}{\hbar} \Delta x \Delta E)$

揺らぎについても同様な速度限界が存在

$$\left| \frac{d\Delta A(t)}{dt} \right| \leq \|\nabla A\|_\infty \sqrt{\left\langle \left(\frac{\mathbf{j}}{\rho} \right)^2 \right\rangle} \leq \|\nabla A\|_\infty \sqrt{2E_{\text{kin}}}$$

例) $\left| \frac{d\Delta x(t)}{dt} \right| \leq \sqrt{2E_{\text{kin}}}$



熱力学的速度限界

Fokker-Planck方程式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \nabla \cdot \mathbf{j} = - \nabla \cdot (\rho \mu (\mathbf{F} - T \nabla \ln \rho)) \quad T: \text{温度}, \mu: \text{易動度}, \mathbf{F}: \text{外力}$$

この場合には、次の熱力学速度限界が得られる

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \sqrt{\langle (\nabla A)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\mathbf{j}/\rho)^2 \rangle} \leq \sqrt{\mu T \sigma \langle (\nabla A)^2 \rangle}$$

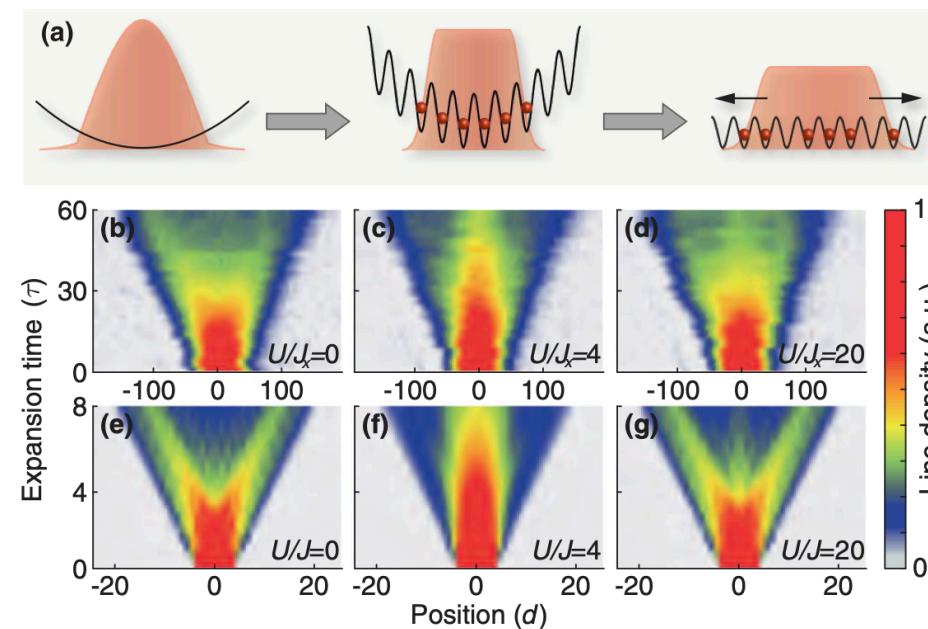
$$\sigma = \frac{\langle \mathbf{j}^2 / \rho^2 \rangle}{\mu T} \quad \text{エントロピー生成率 (系の不可逆性の指標)}$$

A. Dechant and S. Sasa, J. Stat. Phys. (2018); PRE (2018)

離散的な量子ダイナミクス

人工量子系などでは、離散ダイナミクスの巨視的遷移も重要となる

J. P. Ronzheimer et al., PRL 110, 205301 (2013).



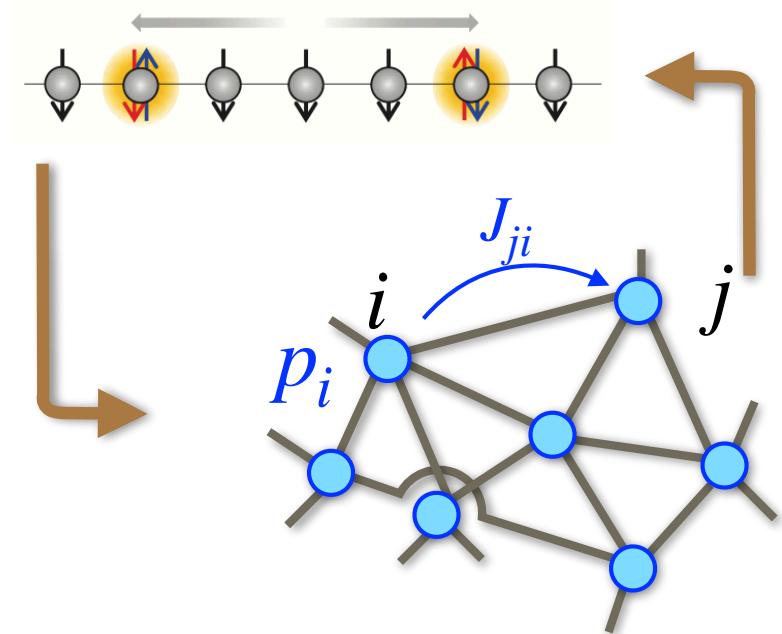
光格子中の原子集団の輸送
原子の位置の巨視的な変化

離散系のアイデア

任意の（離散的な）多体系を取り扱うために、
グラフ構造 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ へとマップする

バーテックス: $i \in \mathcal{V}$ (状態の基底)

エッジ: $i \neq j$ かつ i と j 間の
遷移があれば $(i, j) \in \mathcal{E}$



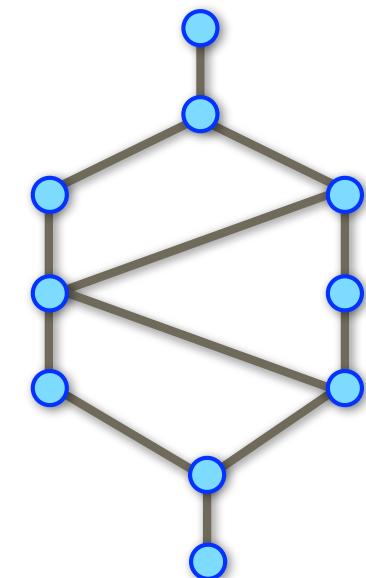
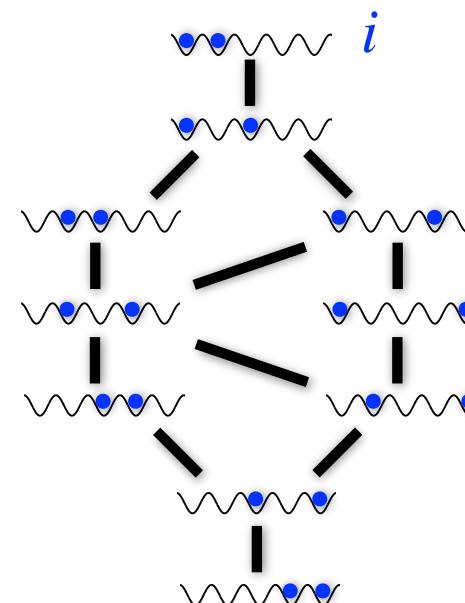
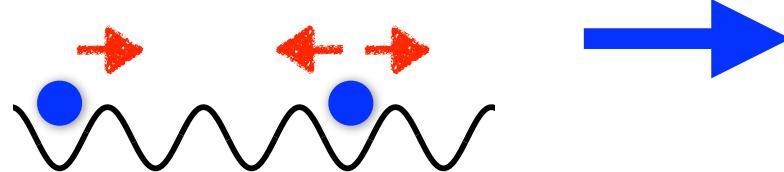
離散系のアイデア

任意の（離散的な）多体系を取り扱うために、

グラフ構造 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ へとマップする

(例) 5 サイト, 2 粒子

近接サイトへ移動、二重占有なし



離散系のアイデア

任意の（離散的な）多体系を取り扱うために、

グラフ構造 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ へとマップする

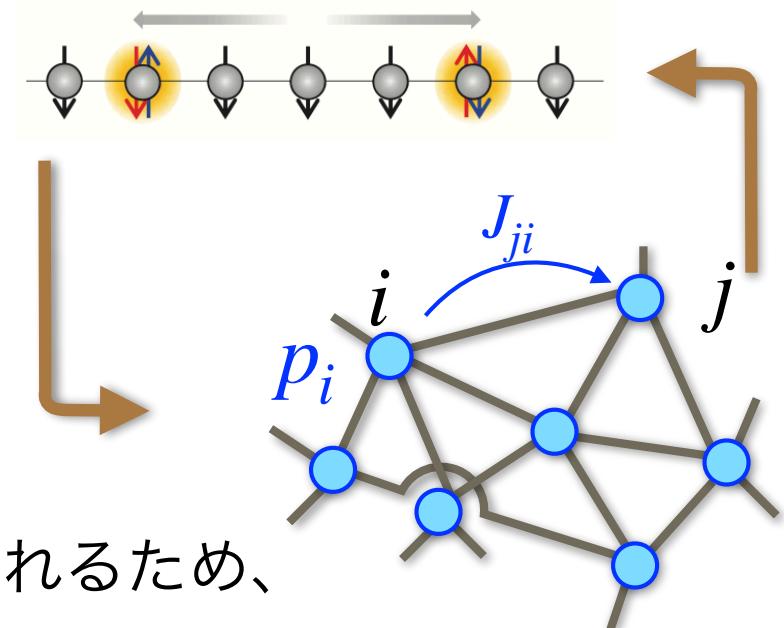
バーテックス: $i \in \mathcal{V}$ (状態の基底)

エッジ: $i \neq j$ かつ i と j 間の
遷移があれば $(i, j) \in \mathcal{E}$

遷移が局所的に進行するという事実を取り入れるため、

グラフ上の確率分布 $\{p_i\}$ の満たす局所保存則を考える

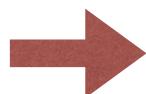
$$\rightarrow \frac{dp_i}{dt} = - \sum_{j:(j,i) \in \mathcal{E}} J_{ji}(t) \quad J_{ji}: i \text{ から } j \text{ への確率流}$$
$$J_{ji} = -J_{ij}$$



確率流を用いた速度限界

離散的な確率の局所保存則 $\frac{dp_i}{dt} = - \sum_{j:(j,i) \in \mathcal{E}} J_{ji}(t)$ を用いる

$$\frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} = \sum_i A_i \partial_t p_i = - \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} A_i J_{ji}(t) = - \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} (A_i - A_j) J_{ji}(t)$$



Hölder
不等式

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \frac{1}{2} \max_{(i,j) \in \mathcal{E}} |A_i - A_j| \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} |J_{ji}(t)|$$

または



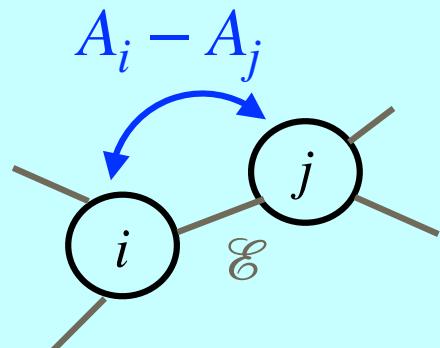
Cauchy-Schwarz
不等式

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \sqrt{\sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} r_{ij} |A_i - A_j|^2} \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} \frac{|J_{ji}(t)|^2}{r_{ij}} \quad r_{ij} > 0$$

確率流を用いた速度限界

離散的な確率の局所保存則 $\frac{dp_i}{dt} = - \sum J_{ji}(t)$ を用いる

$$|\partial_t \langle A \rangle| \leq \frac{1}{2} \max_{(i,j) \in \mathcal{E}} |A_i - A_j| \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} |J_{ji}(t)| \\ =: \|\nabla A\|_\infty$$



エッジ \mathcal{E} により定義された A の勾配
(離散的なLipschitz定数)

典型的な巨視的遷移においては $\|\nabla A\|_\infty \ll \Delta A$
発散しない有用な速度限界が得られる

巨視的な量子遷移

一般的な量子ダイナミクス $\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i[H, \hat{\rho}]$

状態 i への確率は次のように表される $p_i(t) = \rho_{ii}$

$$\rightarrow \frac{dp_i}{dt} = - \sum_{j:(j,i) \in \mathcal{E}} J_{ji}(t) \quad J_{ji} = i(\rho_{ji}H_{ij} - \rho_{ij}H_{ji}) : \text{確率流}$$

$H_{ij} : H$ の行列要素の (i, j) 成分

$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{i=1}^D A_i p_i(t)$ という期待値を持つ物理量に対し

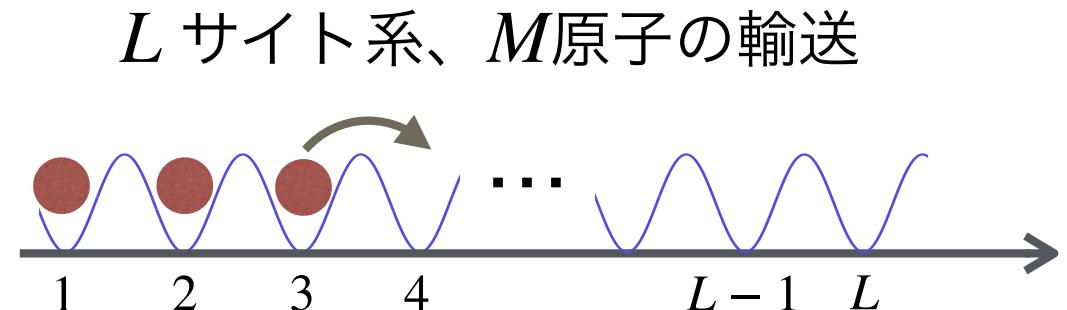

$$\left| \frac{d\langle \hat{A}(t) \rangle}{dt} \right| \leq \|\nabla A\|_\infty \sqrt{C_H^2 - E_{\text{trans}}^2}$$

$$E_{\text{trans}} = \left\langle \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} H_{ij} \right\rangle \quad \text{遷移エネルギー (巨視的な物理量)}$$

$$C_H := \max_{i \in \mathcal{V}} \sum_{j:(j,i) \in \mathcal{E}} |H_{ij}| \quad \text{遷移の強さ } (H \text{ からすぐに分かる})$$

マクロな遷移に対して有効な量子速度限界

$$\left| \frac{d\langle \hat{A}(t) \rangle}{dt} \right| \leq \|\nabla A\|_\infty \sqrt{C_H^2 - E_{\text{trans}}^2}$$



*遷移エネルギー E_{trans} が遷移速度を抑制する Mandelstam-Tamm 限界 : ΔE

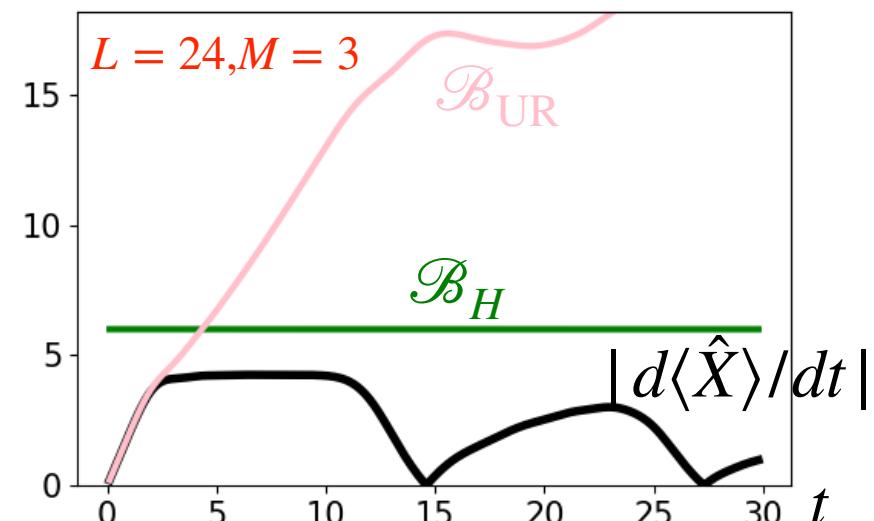
*有用な速度限界 ← マクロな距離の遷移に対し $\|\nabla A\|_\infty \ll \Delta A$

(例) ホッピングのレート K を持つ M 原子の量子多体系での平均変位 X

$$\left| \frac{d\langle \hat{X}(t) \rangle}{dt} \right| \leq \mathcal{B}_H = \sqrt{(2K)^2 - (E_{\text{trans}}/M)^2}$$

我々の上限

$$\ll \mathcal{B}_{\text{UR}} = \Delta X \Delta E$$



確率過程と熱力学速度限界

古典確率過程 $\frac{dp_i}{dt} = \sum_j W_{ij} p_j = - \sum_{j:(j,i) \in \mathcal{E}} J_{ji}(t)$ $J_{ij} = W_{ij} p_j - W_{ji} p_i$

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \|\nabla A\|_\infty \cdot \sqrt{\frac{\dot{\Sigma}\mathcal{A}}{2}}$$

Entropy production rate

$$\dot{\Sigma} = \sum_{i \neq j} W_{ij} p_j \ln \frac{W_{ij} p_j}{W_{ji} p_i}$$

Dynamical Activity

$$\mathcal{A} = \sum_{i \neq j} W_{ij} p_j$$

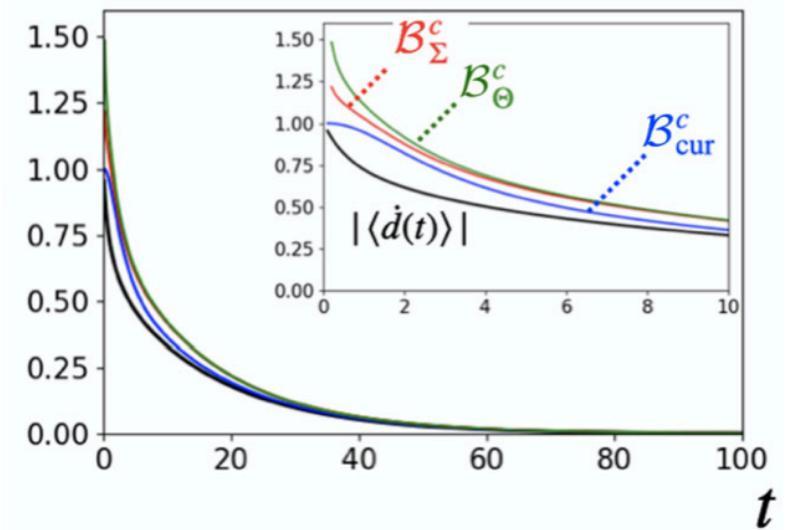
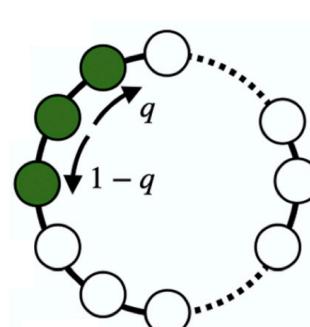
単純排他過程による M 粒子の巨視的な輸送

d : 原点からの粒子位置の和

$$\left| \frac{d\langle d(t) \rangle}{dt} \right| \leq \mathcal{B}_\Sigma^c = \|\nabla d\|_\infty \cdot \sqrt{\frac{\dot{\Sigma}\mathcal{A}}{2}}$$

$$\|\nabla d\|_\infty = 1 \ll \max d_i \sim ML$$

cf) $\left| \frac{d\langle d(t) \rangle}{dt} \right| \leq \max d_i \cdot \sqrt{2\dot{\Sigma}\mathcal{A}}$



N. Shiraishi, K. Funo, and K. Saito, PRL (2018)

R. Hamazaki, PRX Quantum 3 (2), 020319 (2022).

ここまでまとめ

確率の局所保存則を用いて、マクロ系の遷移に対して有用な速度限界を物理量の勾配と確率流によって導いた

量子系では、速度限界は運動エネルギー（連続系）や遷移エネルギー（離散系）を用いて表される

熱力学的な系では、エントロピー生成率を用いた巨視的遷移に有効な速度限界が得られる

Part IIのまとめ

非平衡統計力学は未だ完成されておらず、
様々なアプローチのもと研究が盛んに行われている

非平衡遷移に関するトレードオフ不等式として
速度限界が知られており、量子系や古典系、
熱力学的系などで議論されている

マクロ系に対しては、Lieb-Robinson限界や
局所保存則を用いた速度限界が有用な結果を与える

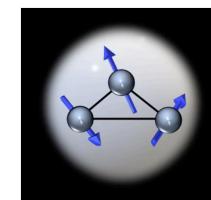
Part III.
外界と接した量子系の非平衡ダイナミクス

Part IIIのアウトライン

1. モチベーション
2. 開放量子系を記述する方程式
3. Lindblad方程式のスペクトルとダイナミクス
4. 非エルミートランダム行列と開放量子カオス
(我々の研究の紹介)

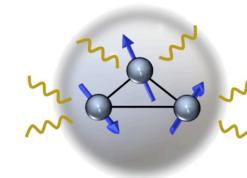
開放量子系の非平衡現象

孤立量子系について議論してきた



環境から孤立

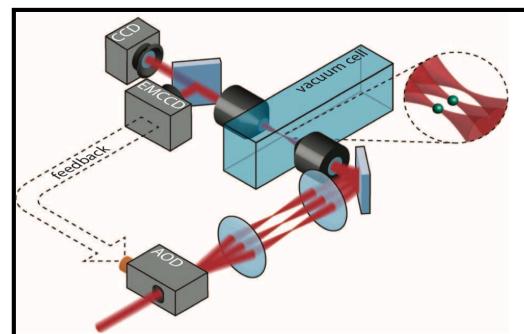
多くの系は環境と相互作用する開放系
→ より豊かな非平衡状態の発現



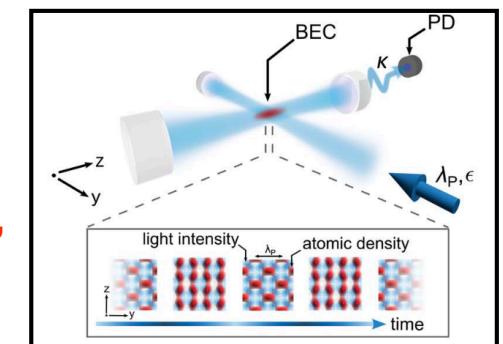
環境との接触
外部駆動など

散逸や駆動すら実験的に制御可能になっている

量子観測 &
フィードバック
M. Endres et al.
Science (2016)



散逸時間結晶
P. Kongkhambut et al.,
Science (2021)



- *非平衡開放系に特有の量子相を探索したい
- *開放系の従う普遍的な法則を発見したい

2. 開放系を記述する方程式

参考文献：

- *H.P. Breuer and F. Petruccione, “The Theory of Open Quantum Systems,” Oxford University Press (2007)
 - *H.M. Wiseman and G.J. Milburn, “Quantum measurement and control,” Cambridge University Press (2014)
 - * 沙川貴大, 上田正仁 『量子測定と量子制御 [第2版]』 サイエンス社 (2022)
-

孤立系から開放系へ(?)

$$\mathcal{H}_{\text{tot}} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$$

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{SE}$$

$$\hat{\rho}(t) = e^{-i\hat{H}_{\text{tot}}t} \hat{\rho}(0) e^{i\hat{H}_{\text{tot}}t}$$



初期状態に相関がないと仮定 : $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_E(0)$

→ 着目系の時間発展は形式的に次のような写像でかける

$$\hat{\rho}_S(t) = \mathcal{E}_t[\hat{\rho}_S(0)]$$

$$= \text{Tr}_E[\hat{U}(\hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_E(0))\hat{U}^\dagger]$$

$$\hat{U} = e^{-i\hat{H}_{\text{tot}}t}$$

孤立系から開放系へ（？）

$$\hat{\rho}_S(t) = \mathcal{E}_t[\hat{\rho}_S(0)] = \text{Tr}_E[\hat{U}(\hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_E(0))\hat{U}^\dagger]$$

環境を $\hat{\rho}_E(0) = \sum_a p_a |p_a\rangle\langle p_a|$ と対角化し、

さらに環境の任意の基底 $\{|q_b\rangle\}$ を導入すると

$$\mathcal{E}_t[\hat{\rho}_S(0)] = \sum_{ab} p_a \langle q_b | \hat{U} | p_a \rangle \hat{\rho}_S(0) \langle p_a | \hat{U}^\dagger | q_b \rangle$$

Sに働く演算子

$$= \sum_k \hat{M}_k \hat{\rho}_S(0) \hat{M}_k^\dagger$$

$$k = (a, b)$$

$$\hat{M}_k = \sqrt{p_a} \langle q_b | \hat{U} | p_a \rangle \quad \text{Kraus演算子}$$

$$\sum_k \hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k = \hat{\mathbb{I}}_S$$

孤立系から開放系へ（？）

$$\hat{\rho}_S(t) = \mathcal{E}_t[\hat{\rho}_S(0)] = \text{Tr}_E[\hat{U}(\hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_E(0))\hat{U}^\dagger] = \sum_k \hat{M}_k \hat{\rho}_S(0) \hat{M}_k^\dagger$$

→一般には \mathcal{E}_t や \hat{M}_k は複雑

例えば並進対称な強く相互作用する量子多体系では、
このような表現に特にメリットはない

一方、適当な条件が満たされ、
近似的なダイナミクスが得られる場合もある

例：Lindblad方程式（量子光学系など）... $\mathcal{E}_t = e^{\mathcal{L}t}$

$$\frac{d\hat{\rho}_S}{dt} = \mathcal{L}[\hat{\rho}_S] = -i[\hat{H}_S, \hat{\rho}_S] + \frac{1}{2} \sum_{\mu} \left(2\hat{L}_{\mu} \hat{\rho}_S \hat{L}_{\mu}^\dagger - \{\hat{\rho}_S, \hat{L}_{\mu}^\dagger \hat{L}_{\mu}\} \right)$$

初期のSE間の相関がないことに加え、
マルコフ近似や回転波近似などいくつかの仮定の下で得られる

量子状態の時間発展に対する物理的な要請

$\hat{\rho}(t) = \mathcal{E}_t[\hat{\rho}(0)]$ なる \mathcal{E}_t を考える

量子状態の物理的な時間発展を記述するために、

\mathcal{E}_t は次の性質を満たすことを要請 (CPTP写像) :

1. 線形性 : $\mathcal{E}_t(\hat{\rho} + \hat{\sigma}) = \mathcal{E}_t(\hat{\rho}) + \mathcal{E}_t(\hat{\sigma})$
2. トレース保存 : $\text{Tr}[\mathcal{E}_t(\hat{\rho})] = 1$
3. 完全正値性 : $(\mathcal{E}_t \otimes \mathcal{I})(\hat{\Omega}) \geq 0$

(\mathcal{I} はアンシラの恒等写像、 $\hat{\Omega}$ は系とアンシラ全体の密度行列)

先ほど一般的に得られた \mathcal{E}_t はこれらの条件を満たす

ただし、マルコフ性を満たすとは限らない

一般に $\mathcal{E}_{t+s} \neq \mathcal{E}_t \circ \mathcal{E}_s$ ($t, s \geq 0$)

量子状態の時間発展に対する物理的な要請

$\hat{\rho}(t) = \mathcal{E}_t[\hat{\rho}(0)]$ なる \mathcal{E}_t を考える

量子状態の物理的な時間発展を記述するために、

\mathcal{E}_t は次の性質を満たすことを要請 (CPTP写像) :

1. 線形性 : $\mathcal{E}_t(\hat{\rho} + \hat{\sigma}) = \mathcal{E}_t(\hat{\rho}) + \mathcal{E}_t(\hat{\sigma})$
2. トレース保存 : $\text{Tr}[\mathcal{E}_t(\hat{\rho})] = 1$
3. 完全正値性 : $(\mathcal{E}_t \otimes \mathcal{I})(\hat{\Omega}) \geq 0$

(\mathcal{I} はアンシラの恒等写像、 $\hat{\Omega}$ は系とアンシラ全体の密度行列)

今、次のマルコフ条件を課した場合も考える

4. マルコフ性 : $\mathcal{E}_t \cdot \mathcal{E}_s = \mathcal{E}_{t+s}$

→ この時、 \mathcal{E}_t の生成子は Lindblad 型に限る

観測下の量子系とLindblad方程式

連続測定下の量子系では、次のようにLindblad方程式を導ける

復習：射影測定

システムの状態 $\hat{\rho}_S$ を測定器で射影測定する



測定値 $k = 0, 1, \dots$, が出る確率 : $p_k = \text{Tr}[\hat{\rho}_S \hat{P}_k]$

測定後の状態 (ボルンの規則) : $\hat{\rho}'_{Sk} = \frac{\hat{P}_k \hat{\rho}_S \hat{P}_k}{p_k}$

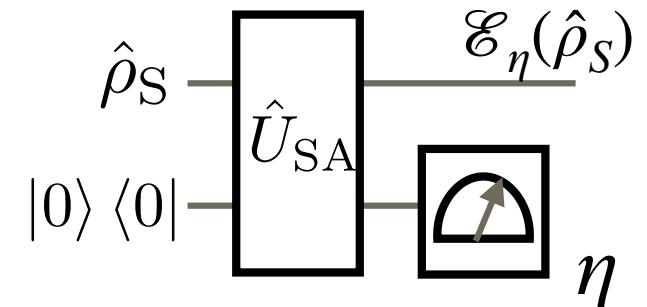
$$\rightarrow \text{全ての測定値の平均は } \rho'_S = \sum_k p_k \hat{\rho}'_{Sk} = \sum_k \hat{P}_k \hat{\rho}_S \hat{P}_k$$

観測下の量子系とLindblad方程式

連続測定下の量子系では、次のようにLindblad方程式を導ける

間接測定

システムとアンシラをエンタングルさせ、
アンシラを射影測定する



測定値 $\eta = 0, 1, \dots$ が出る確率 : $p_\eta = \text{Tr}[\hat{\rho}_S \hat{M}_\eta^\dagger \hat{M}_\eta]$ $\hat{P}_\eta = |\eta\rangle\langle\eta|$

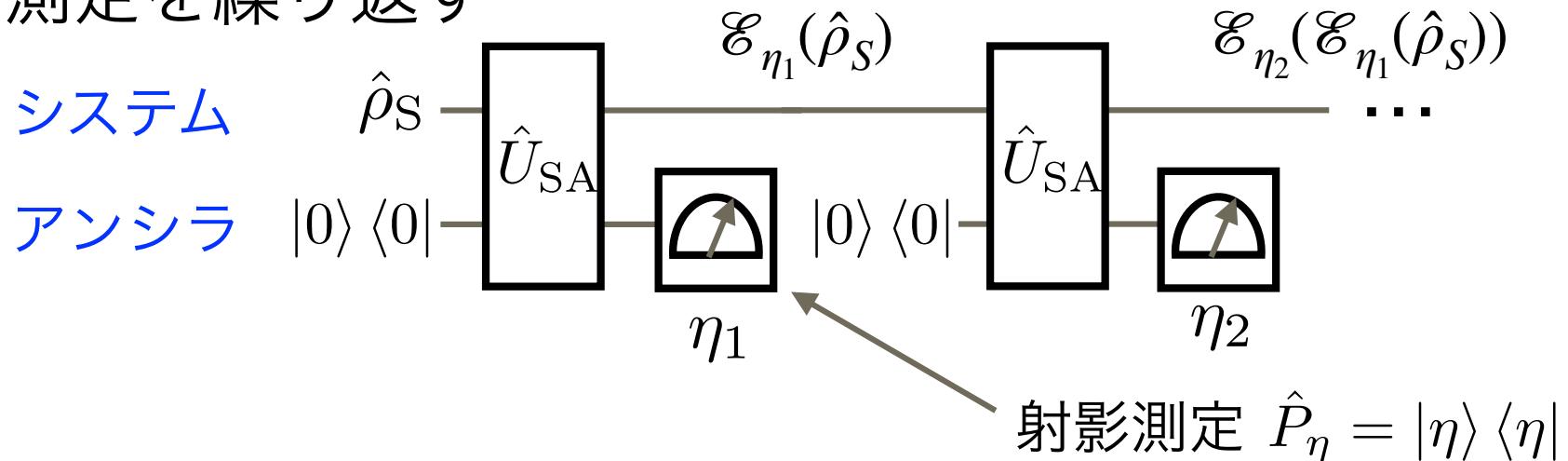
測定後の状態 : $\mathcal{E}_\eta(\hat{\rho}_S) = \frac{\hat{M}_\eta \hat{\rho}_S \hat{M}_\eta^\dagger}{p_\eta}$ $\hat{M}_\eta = \langle \eta | \hat{U}_{SA} | 0 \rangle$, $\sum_\eta \hat{M}_\eta^\dagger \hat{M}_\eta = \hat{\mathbb{I}}_S$

→ 全ての測定値の平均は $\rho' = \sum_k p_k \mathcal{E}_k(\hat{\rho}) = \sum_\eta \hat{M}_\eta \hat{\rho} \hat{M}_\eta^\dagger$

Kraus表現

観測下の量子系とLindblad方程式

間接測定を繰り返す



弱い測定（相互作用の時間 δt が短い）とき、

測定値が0と異なる確率は $p_{\eta \geq 1} \propto \delta t$ と期待できる

$$\hat{M}_{\eta \geq 1} = \hat{L}_\eta \sqrt{\delta t}$$

$$\rightarrow \hat{M}_0 = 1 - \frac{1}{2} \sum_{\eta \geq 1} \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta \delta t \quad \text{とおく}$$

観測下の量子系とLindblad方程式

測定結果	$\eta \geq 1$	$\eta = 0$
Kraus演算子	$\hat{M}_{\eta \geq 1} = \hat{L}_\eta \sqrt{\delta t}$	$\hat{M}_0 = 1 - \frac{1}{2} \sum_{\eta \geq 1} \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta \delta t$
測定確率	$p_{\eta \geq 1} = \langle \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta \rangle \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$	$p_0 = 1 - \sum_{\eta \geq 1} \langle \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta \rangle \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$
測定後の状態	$\hat{\rho}_S^{\eta \geq 1}(t + \delta t) = \frac{\hat{M}_\eta \hat{\rho}_S \hat{M}_\eta^\dagger}{p_\eta}$	$\hat{\rho}_S^0(t + \delta t) = \frac{\hat{M}_0 \hat{\rho}_S \hat{M}_0^\dagger}{p_0}$

よって、 $\hat{\rho}_S = \sum_{\eta} p_{\eta} \hat{\rho}_S^{\eta}$ の満たす時間発展方程式は

$$\frac{d\hat{\rho}_S}{dt} = \sum_{\eta \geq 1} \hat{L}_\eta \hat{\rho}_S \hat{L}_\eta^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta, \hat{\rho}_S \}$$

観測下の量子系とLindblad方程式

測定結果

$\eta \geq 1$

$\eta = 0$

$\hat{\rho}_S$ そのものにかかるハミルトニアン時間発展も入れると

$$\frac{d\hat{\rho}_S}{dt} = -i[\hat{H}, \hat{\rho}_S] + \sum_{\eta \geq 1} \hat{L}_\eta \hat{\rho}_S \hat{L}_\eta^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta, \hat{\rho}_S \}$$

$$= -i(\hat{H}_{\text{NH}} \hat{\rho}_S - \hat{\rho}_S \hat{H}_{\text{NH}}^\dagger) + \sum_{\eta \geq 1} \hat{L}_\eta \hat{\rho}_S \hat{L}_\eta^\dagger$$

$$\hat{H}_{\text{NH}} = \hat{H} - \frac{i}{2} \sum_{\eta \geq 1} \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta$$

Lindblad方程式 !

$$\frac{d\hat{\rho}_S}{dt} = \sum_{\eta \geq 1} \hat{L}_\eta \hat{\rho}_S \hat{L}_\eta^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta, \hat{\rho}_S \}$$

観測下の量子系：他のダイナミクスの記述方法

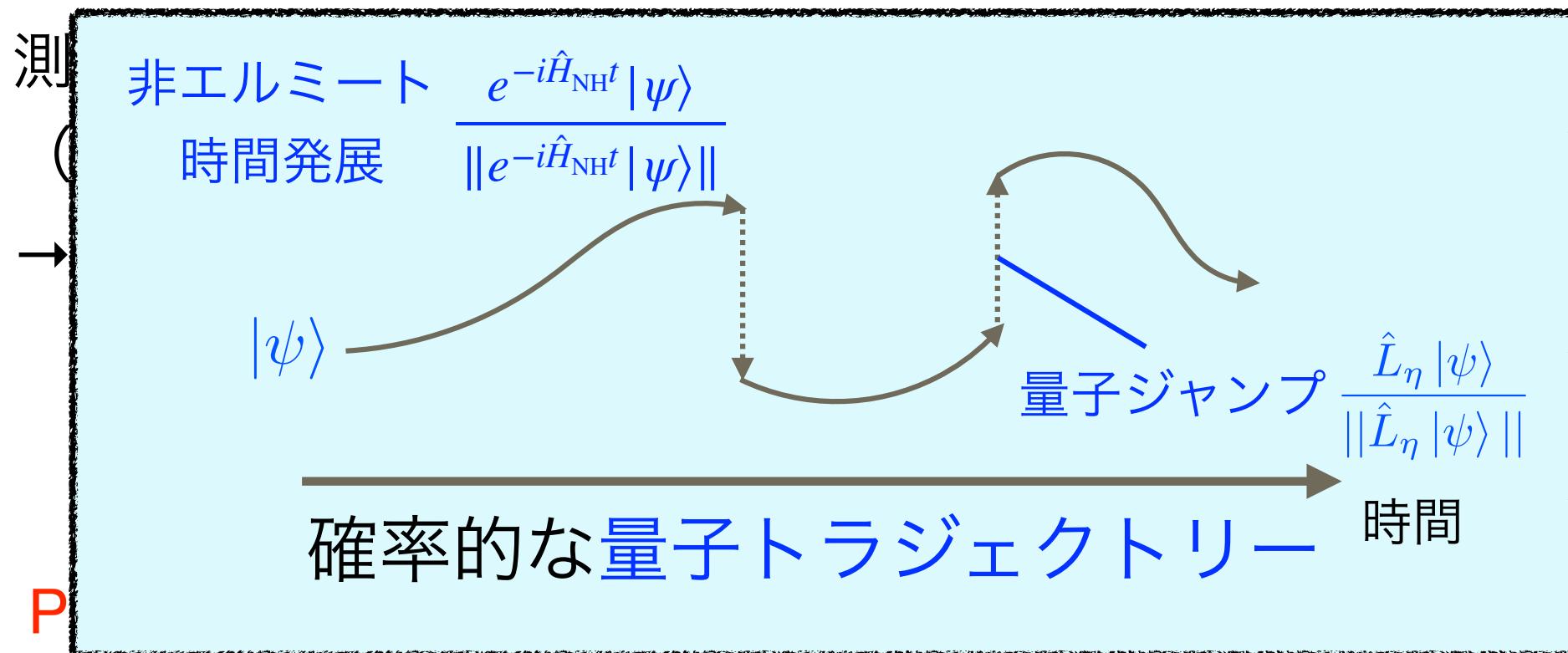
上記の $\hat{\rho}_S$ の時間発展は測定結果 η について平均している
測定結果を平均しない場合、測定結果に応じた
(純粹状態の) 確率微分方程式が得られる
→ 量子トラジェクトリー

$$d|\psi\rangle = \left(\hat{\mathbb{I}} - i\hat{H}_{\text{NH}} + \frac{1}{2} \sum_{\eta \geq 1} \langle \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta \rangle \right) |\psi\rangle dt + \sum_{\eta \geq 1} \left(\frac{\hat{L}_\eta |\psi\rangle}{\langle \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta \rangle} - |\psi\rangle \right) dN_\eta$$

Poisson過程 $dN_\eta dN_{\eta'} = \delta_{\eta\eta'} dN_\eta$ $\mathbb{E}[dN_\eta] = \langle \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta \rangle dt$

観測下の量子系：他のダイナミクスの記述方法

上記の $\hat{\rho}_S$ の時間発展は測定結果 η について平均している



測定結果の平均がLindblad方程式を満たす $\mathbb{E}[|\psi\rangle\langle\psi|] = \hat{\rho}_S$

観測下の量子系：他のダイナミクスの記述方法

量子トラジェクトリーのダイナミクスの研究の発展

* $\mathbb{E}[|\psi\rangle\langle\psi|] = \hat{\rho}_S$ より $\mathbb{E}[\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle] = \text{Tr}[\hat{\rho}_S\hat{O}]$ だが、非線形な物理量については量子トラジェクトリーはLindbladの結果と異なる

$$S_{\text{Traj}} = \mathbb{E}[-\text{Tr}[(|\psi\rangle\langle\psi|)_B \ln (|\psi\rangle\langle\psi|)_B]] \neq -\text{Tr}[(\hat{\rho}_S)_B \ln (\hat{\rho}_S)_B] = S_{\text{Lind}}$$

$B \subset S$ subsystem entanglement entropy

例：測定誘起相転移（量子トラジェクトリー特有の非平衡相転移）

ユニタリー発展の寄与が支配的な時： $S_{\text{Traj}} \sim |B|$ (体積則)

散逸（非ユニタリー）が支配的な時： $S_{\text{Traj}} \sim |\partial B|$ (境界則)

*量子ジャンプがない場合のトラジェクトリーのみ抜き出すと、
非エルミートハミルトニアン \hat{H}_{NH} による時間発展となる

ここまでまとめ

開放量子系のダイナミクスは非ユニタリーであり、特に物理的な状態間の写像はCPTP写像で与えられる

さらにマルコフ性が加わったLindblad方程式は、連続測定下の量子系などのセッティングから導出できる

3. Lindblad方程式の スペクトルとダイナミクス

参考文献：

- * Z. Gong and R. Hamazaki, International Journal of Modern Physics B 36 (31), 2230007 (2022).
-

Lindblad演算子のスペクトル分解

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \mathcal{L}[\hat{\rho}] = -i[\hat{H}, \hat{\rho}] + \sum_{\eta} \hat{L}_{\eta} \hat{\rho} \hat{L}_{\eta}^{\dagger} - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_{\eta}^{\dagger} \hat{L}_{\eta}, \hat{\rho} \}$$

\mathcal{L} は線形演算子であり、スペクトル分解がその理解に有効
以下では簡単のために \mathcal{L} は対角化可能とする

固有方程式 ($1 \leq a \leq \dim[\mathcal{H}]^2$)

$$\mathcal{L}[\hat{\phi}_a] = \lambda_a \hat{\phi}_a \quad \hat{\phi}_a : \text{右固有モード}$$

$$\mathcal{L}^{\dagger}[\hat{\chi}_a] = \lambda_a^* \hat{\chi}_a \quad \hat{\chi}_a : \text{左固有モード}$$

$$\mathcal{L}^{\dagger}[\hat{A}] = i[\hat{H}, \hat{A}] + \sum_{\eta} \hat{L}_{\eta}^{\dagger} \hat{A} \hat{L}_{\eta} - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_{\eta}^{\dagger} \hat{L}_{\eta}, \hat{A} \} \quad \text{Heisenberg表示}$$

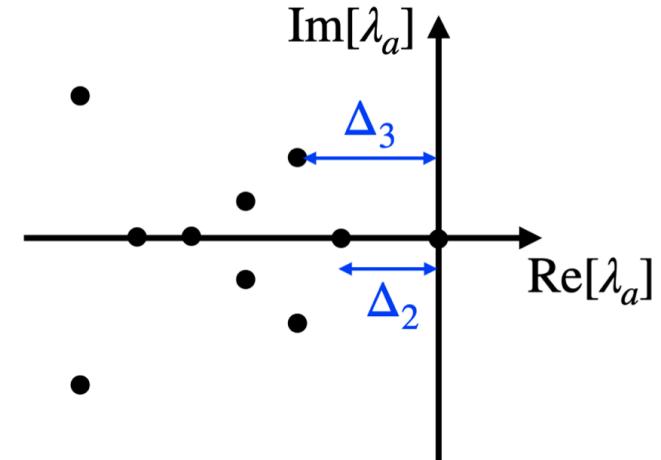
一般には非エルミート性により $\lambda_a \in \mathbb{C}$, $\hat{\phi}_a \neq \hat{\chi}_a$ に注意

スペクトル分解とその性質

$$\mathcal{L}[\hat{\phi}_a] = \lambda_a \hat{\phi}_a \quad \mathcal{L}^\dagger[\hat{\chi}_a] = \lambda_a^* \hat{\chi}_a$$

1. 固有状態のbi-orthogonality $\text{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\phi}_b] = 0$ for $\lambda_a \neq \lambda_b$
2. 固有値は実か、複素共役ペアで現れる
3. ゼロ固有値 $\lambda_1 = 0$ が存在し、
 $\hat{\phi}_1 = \hat{\rho}_{ss}$ は定常状態、 $\hat{\chi}_1 \propto \hat{\mathbb{I}}$
4. ゼロ固有値以外は、 $\text{Tr}[\hat{\phi}_a] = 0$
5. 固有値の実部は全て0以下

$$0 = \lambda_1 \geq \text{Re} [\lambda_2] \geq \text{Re} [\lambda_3] \geq \dots \geq \text{Re} [\lambda_{\dim[\mathcal{H}]^2}] \text{ とおける}$$



証明

$$\mathcal{L}[\hat{\phi}_a] = \lambda_a \hat{\phi}_a \quad \mathcal{L}^\dagger[\hat{\chi}_a] = \lambda_a^* \hat{\chi}_a$$

1. 固有状態のbi-orthogonality $\text{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\phi}_b] = 0$ for $\lambda_a \neq \lambda_b$

$$\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle = \text{Tr}[\hat{A}^\dagger \hat{B}] \text{ を導入すると } \langle \hat{A}, \mathcal{L}[\hat{B}] \rangle = \langle \mathcal{L}^\dagger[\hat{A}], \hat{B} \rangle$$
$$\lambda_b \langle \hat{\chi}_a, \hat{\phi}_b \rangle = \langle \hat{\chi}_a, \mathcal{L}[\hat{\phi}_b] \rangle = \langle \mathcal{L}^\dagger[\hat{\chi}_a], \hat{\phi}_b \rangle = \lambda_a \langle \hat{\chi}_a, \hat{\phi}_b \rangle$$

2. 固有値は実か、複素共役ペアで現れる

$$\mathcal{L}[\hat{\phi}_a] = \lambda_a \hat{\phi}_a \text{ のエルミート共役 } \mathcal{L}[\hat{\phi}_a^\dagger] = \lambda_a^* \hat{\phi}_a^\dagger \text{ より}$$

証明

$$\mathcal{L}[\hat{\phi}_a] = \lambda_a \hat{\phi}_a \quad \mathcal{L}^\dagger[\hat{\chi}_a] = \lambda_a^* \hat{\chi}_a$$

3. ゼロ固有値 $\lambda_1 = 0$ が存在し、

$\hat{\phi}_1 = \hat{\rho}_{ss}$ は定常状態、 $\hat{\chi}_1 \propto \hat{\mathbb{I}}$

$$\hat{\rho}_{ss} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T d\tau e^{\mathcal{L}\tau}[\hat{\rho}] \text{とおくと}$$

$e^{\mathcal{L}t}[\hat{\rho}_{ss}] = \hat{\rho}_{ss}$ が全ての $t \geq 0$ で成立 \rightarrow これを t で微分し $\mathcal{L}[\hat{\rho}_{ss}] = 0$

$\mathcal{L}^\dagger[\hat{\mathbb{I}}] = 0$ は直接計算から明らか

4. ゼロ固有値以外は、 $\text{Tr}[\hat{\phi}_a] = 0$

$$0 = \text{Tr}[\mathcal{L}[\hat{\phi}_a]] = \lambda_a \text{Tr}[\hat{\phi}_a]$$

証明

$$\mathcal{L}[\hat{\phi}_a] = \lambda_a \hat{\phi}_a \quad \mathcal{L}^\dagger[\hat{\chi}_a] = \lambda_a^* \hat{\chi}_a$$

5. 固有値の実部は全て0以下

$0 = \lambda_1 \geq \operatorname{Re} [\lambda_2] \geq \operatorname{Re} [\lambda_3] \geq \dots \geq \operatorname{Re} [\lambda_{\dim[\mathcal{H}]^2}]$ とおける

(直感的な理解)

スペクトル展開により、(先ほどの議論から) 状態は次のようにかける

$$\hat{\rho}(t) = e^{\mathcal{L}t}[\hat{\rho}(0)] = \hat{\rho}_{ss} + \sum_{a=2}^{\dim[\mathcal{H}]^2} c_a e^{\lambda_a t} \hat{\phi}_a \quad c_a = \frac{\operatorname{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\rho}(0)]}{\operatorname{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\phi}_a]}$$

λ_a が正の実部を持つと、時間と共に係数 c_a が発散してしまい、物理的に不合理

証明

$$\mathcal{L}[\hat{\phi}_a] = \lambda_a \hat{\phi}_a \quad \mathcal{L}^\dagger[\hat{\chi}_a] = \lambda_a^* \hat{\chi}_a$$

5. 固有値の実部は全て0以下

$0 = \lambda_1 \geq \operatorname{Re} [\lambda_2] \geq \operatorname{Re} [\lambda_3] \geq \dots \geq \operatorname{Re} [\lambda_{\dim[\mathcal{H}]^2}]$ とおける

(厳密な証明)

まず、 \mathcal{L} と \mathcal{L}^\dagger は固有値の組が等しいので \mathcal{L}^\dagger に注目

$$\mathcal{L}^\dagger[\hat{A}] = i[\hat{H}, \hat{A}] + \sum_\eta \hat{L}_\eta^\dagger \hat{A} \hat{L}_\eta - \frac{1}{2} \{\hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta, \hat{A}\}$$

次の不等式が成立することに注目

$$\mathcal{L}^\dagger(\hat{X}^\dagger \hat{X}) - \hat{X}^\dagger \mathcal{L}^\dagger[\hat{X}] - \mathcal{L}^\dagger[\hat{X}^\dagger] \hat{X} = [\hat{L}, \hat{X}]^\dagger [\hat{L}, \hat{X}] \geq 0$$

(\mathcal{L}^\dagger がcomplete positiveであることに起因)

証明

$$\mathcal{L}[\hat{\phi}_a] = \lambda_a \hat{\phi}_a \quad \mathcal{L}^\dagger[\hat{\chi}_a] = \lambda_a^* \hat{\chi}_a$$

5. 固有値の実部は全て0以下

$0 = \lambda_1 \geq \operatorname{Re} [\lambda_2] \geq \operatorname{Re} [\lambda_3] \geq \dots \geq \operatorname{Re} [\lambda_{\dim[\mathcal{H}]^2}]$ とおける

次に $\operatorname{Tr}[\hat{\rho}_{ss} \hat{\chi}_a^\dagger \mathcal{L}^\dagger[\hat{\chi}_a]] = \lambda_a^* \operatorname{Tr}[\hat{\rho}_{ss} \hat{\chi}_a^\dagger \hat{\chi}_a]$ とその複素共役の和を取り

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}[\lambda_a] &= \frac{\operatorname{Tr}[\hat{\rho}_{ss} \hat{\chi}_a^\dagger \mathcal{L}^\dagger[\hat{\chi}_a]] + \operatorname{Tr}[\hat{\rho}_{ss} \mathcal{L}^\dagger[\hat{\chi}_a^\dagger] \hat{\chi}_a]}{\operatorname{Tr}[\hat{\rho}_{ss} \hat{\chi}_a^\dagger \hat{\chi}_a]} \\ &\leq \frac{\operatorname{Tr}[\hat{\rho}_{ss} \mathcal{L}^\dagger[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\chi}_a]]}{\operatorname{Tr}[\hat{\rho}_{ss} \hat{\chi}_a^\dagger \hat{\chi}_a]} = \frac{\operatorname{Tr}[\mathcal{L}[\hat{\rho}_{ss}] \hat{\chi}_a^\dagger \hat{\chi}_a]}{\operatorname{Tr}[\hat{\rho}_{ss} \hat{\chi}_a^\dagger \hat{\chi}_a]} = 0 \end{aligned}$$

より示された

無限時間後のダイナミクスの分類

無限時間後のダイナミクスは $\text{Re}[\lambda_a] = 0$ を満たす
モードの数と種類で分類される

$$\begin{aligned}\text{Re}[\lambda_a] &> 0 \\ (\forall a > 1)\end{aligned}$$

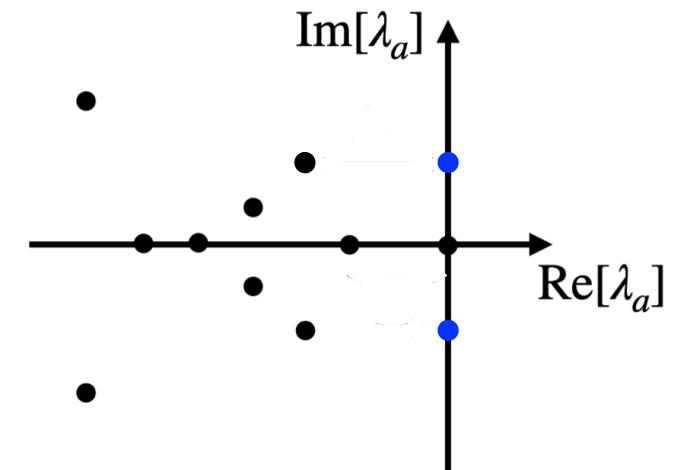
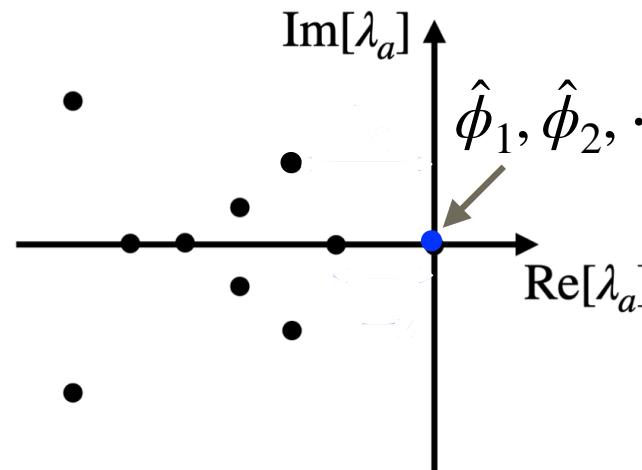
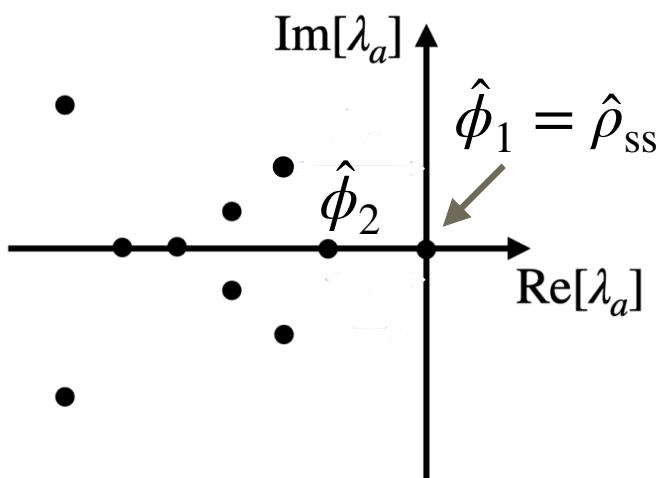
定常状態一つ

$$\begin{aligned}\lambda_a &= 0 \\ (\exists a > 1)\end{aligned}$$

定常状態が複数

$$\begin{aligned}\text{Re}[\lambda_a] &= 0, \text{Im}[\lambda_a] > 0 \\ (\exists a > 1)\end{aligned}$$

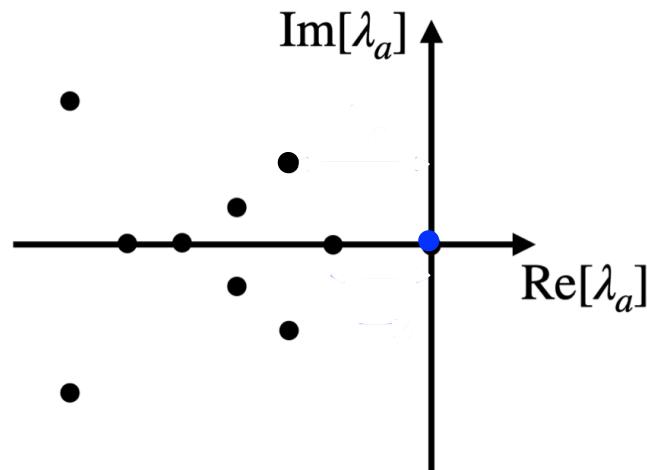
振動状態が存在



定常状態が複数あるための必要条件

無限時間後のダイナミクスは $\text{Re}[\lambda_a] = 0$ を満たす
モードの数と種類で分類される ← 対称性が重要！

$$\begin{aligned}\lambda_a &= 0 \\ (\exists a > 1) \quad \text{定常状態が複数}\end{aligned}$$



十分条件 : strong symmetry \hat{V}

$$[\hat{H}, \hat{V}] = [\hat{L}_b, \hat{V}] = [\hat{L}_b^\dagger, \hat{V}] = 0$$

$$\rightarrow \frac{d\langle \hat{V} \rangle}{dt} = \langle \hat{V}, \mathcal{L}[\hat{\rho}(t)] \rangle = \langle \mathcal{L}^\dagger[\hat{V}], \hat{\rho}(t) \rangle = 0$$

$$\mathcal{L}^\dagger[\hat{A}] = i[\hat{H}, \hat{A}] + \sum_\eta \hat{L}_\eta^\dagger \hat{A} \hat{L}_\eta - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_\eta^\dagger \hat{L}_\eta, \hat{A} \}$$

\hat{V} が保存するため、定常状態は
初期状態に依存する！

振動状態が残るための必要条件

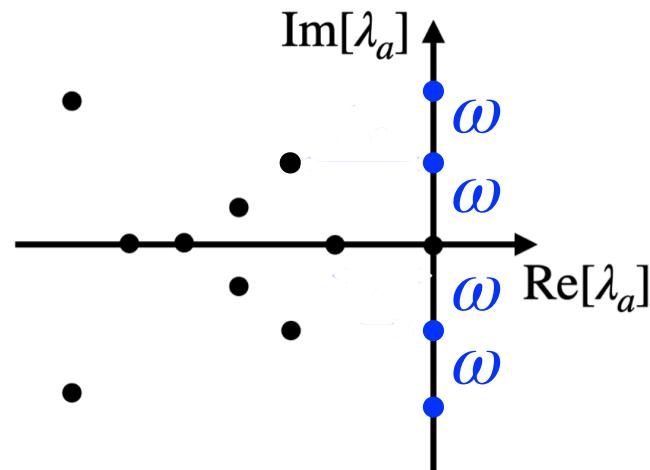
無限時間後のダイナミクスは $\text{Re}[\lambda_a] = 0$ を満たす

モードの数と種類で分類される ← 対称性が重要！

$\text{Re}[\lambda_a] = 0, \text{Im}[\lambda_a] > 0$ 十分条件：次の演算子 \hat{A} の存在
 $(\exists a > 1)$

振動状態が存在

$$[\hat{A}, \hat{H}] = \omega \hat{A}, [\hat{L}_b, \hat{A}] = [\hat{L}_b^\dagger, \hat{A}] = 0$$



$\hat{\rho}^{(nm)} \propto \hat{A}^n \hat{\rho}_{ss} (\hat{A}^\dagger)^m$ は
 $\mathcal{L}[\hat{\rho}^{(nm)}] = i(m - n)\omega \hat{\rho}^{(nm)}$ を満たす
→ 振動固有値！

例：散逸ハバード模型

$$\hat{H} = -\tau \sum_{\langle j,j' \rangle, s} \hat{c}_{j,s}^\dagger \hat{c}_{j',s} + \hat{c}_{j',s}^\dagger \hat{c}_{j,s} + \sum_j U \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow} + \epsilon_j \hat{n}_j + \frac{B}{2} (\hat{n}_{j,\uparrow} - \hat{n}_{j,\downarrow})$$

$$\hat{L}_j = \sqrt{\gamma_j} \hat{n}_j$$

全粒子数 $\sum_j \hat{n}_j$ や全磁化 $\hat{S}^z = \sum_j \hat{S}_j^z = \sum_j \frac{\hat{n}_{j,\uparrow} - \hat{n}_{j,\downarrow}}{2}$ は

$[\hat{H}, \hat{V}] = [\hat{L}_j, \hat{V}] = [\hat{L}_j^\dagger, \hat{V}] = 0$ を満たす \rightarrow 複数定常状態

SU(2)の昇降演算子 $\hat{S}^\pm = \sum_j \hat{S}_j^\pm$ (ここで $\hat{S}_j^+ = (\hat{S}_j^-)^\dagger = \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}$) は

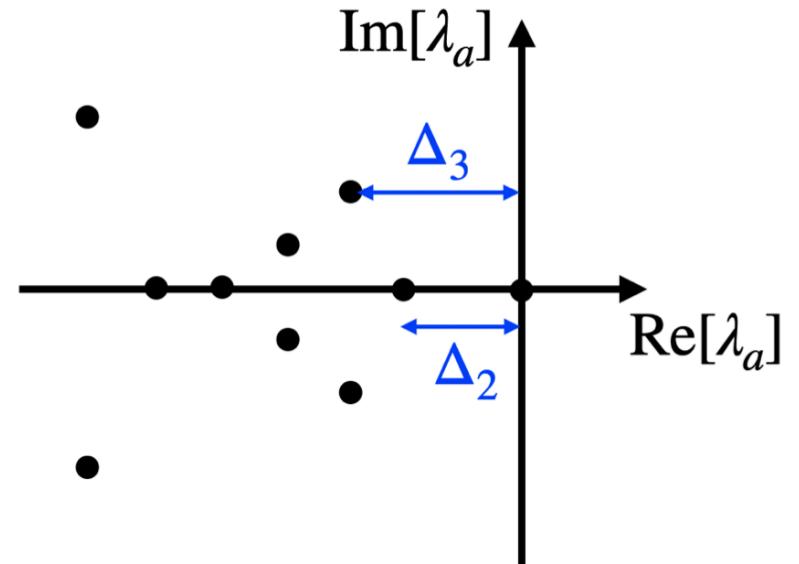
$[\hat{A}, \hat{H}] = \pm B \hat{A}$, $[\hat{L}_j, \hat{A}] = [\hat{L}_j^\dagger, \hat{A}] = 0$ を満たす \rightarrow 振動状態が存在

緩和の時間スケール

以下では無限時間後に残るモードは一つと仮定

$$\hat{\rho}(t) = e^{\mathcal{L}t}[\hat{\rho}(0)] = \hat{\rho}_{\text{ss}} + \sum_{a=2}^{\dim[\mathcal{H}]^2} c_a e^{\lambda_a t} \hat{\phi}_a$$

$$c_a = \frac{\text{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\rho}(0)]}{\text{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\phi}_a]}$$



$$\tau_a = |\text{Re}[\lambda_a]|^{-1} := \Delta_a^{-1} \text{ とすると } \|e^{\lambda_a t} \hat{\phi}_a\| \ll 1 \text{ for } \tau_a \ll t$$

よって $\Delta_2^{-1} = \tau_2 \ll t$ の時、 $\hat{\rho}(t) \simeq \hat{\rho}_{\text{ss}}$ が期待される

\mathcal{L} のスペクトルギャップが緩和時間 τ_{relax} を決める (?)

緩和の時間スケール

$\dim[\mathcal{K}]^2$

$\text{Im}[\lambda_a]$ ↑

多くの場合 $\tau_{\text{relax}} \sim \Delta_2^{-1}$ は正しい！

Δ_2 を考察することで、系の動的な性質がわかる

例) Δ_2 がパラメータによって有限 $\sim \mathcal{O}(V^0)$ から

閉じる $\sim \mathcal{O}(V^{-\gamma})$ や $\sim e^{-\mathcal{O}(V)}$ 相転移などが起こる

孤立系の基底状態転移との類似性

\mathcal{L} のスペクトルギャップが緩和時間 τ_{relax} を決める (?)

時間スケールの問題

$$\hat{\rho}(t) = e^{\mathcal{L}t}[\hat{\rho}(0)] = \hat{\rho}_{\text{ss}} + \sum_{a=2}^{\dim[\mathcal{H}]^2} c_a e^{\lambda_a t} \hat{\phi}_a$$

$$c_a = \frac{\text{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\rho}(0)]}{\text{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\phi}_a]}$$

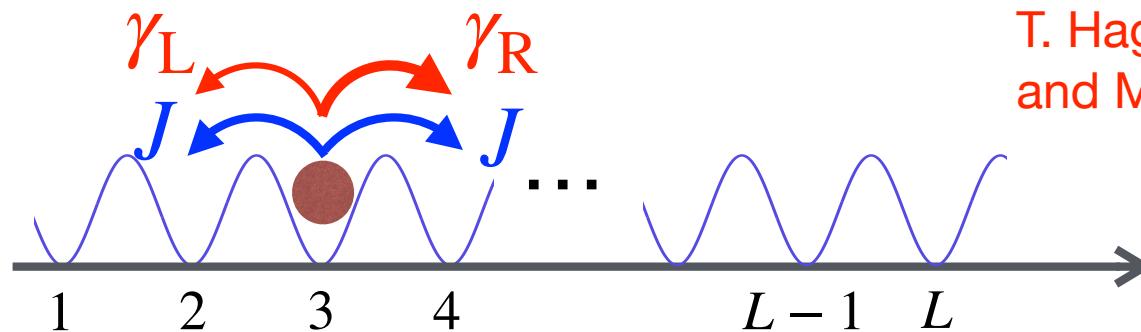
\mathcal{L} のスペクトルギャップが緩和時間 τ_{relax} を決める (?)

次のような散逸を含む一次元ボゾン系を考える：

$$\hat{H} = -J \sum_{l=1}^L \left(\hat{b}_{l+1}^\dagger \hat{b}_l + \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_{l+1} \right)$$

$$\hat{L}_{\text{R},l} = \sqrt{\gamma_{\text{R}}} \hat{b}_{l+1}^\dagger \hat{b}_l$$

$$\hat{L}_{\text{L},l} = \sqrt{\gamma_{\text{L}}} \hat{b}_{l-1}^\dagger \hat{b}_l$$



T. Haga, M. Nakagawa, RH,
and M. Ueda, PRL (2021)

緩和時間 τ_{relax} は一般に系のサイズ L と共に増大

時間スケールの問題

$$\hat{\rho}(t) = e^{\mathcal{L}t}[\hat{\rho}(0)] = \hat{\rho}_{\text{ss}} + \sum_{a=2}^{\dim[\mathcal{H}]^2} c_a e^{\lambda_a t} \hat{\phi}_a$$
$$c_a = \frac{\text{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\rho}(0)]}{\text{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\phi}_a]}$$

\mathcal{L} のスペクトルギャップが緩和時間 τ_{relax} を決める (?)

次のような散逸を含む一次元ボゾン系を考える：

$$\hat{H} = -J \sum_{l=1}^L \left(\hat{b}_{l+1}^\dagger \hat{b}_l + \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_{l+1} \right)$$
$$\hat{L}_{\text{R},l} = \sqrt{\gamma_{\text{R}}} \hat{b}_{l+1}^\dagger \hat{b}_l$$
$$\hat{L}_{\text{L},l} = \sqrt{\gamma_{\text{L}}} \hat{b}_{l-1}^\dagger \hat{b}_l$$

対応する \mathcal{L} は (一粒子、OBC、 $J = 0$ の時)

$$\Delta_2 = (\sqrt{\gamma_{\text{R}}} - \sqrt{\gamma_{\text{L}}})^2$$
を持つ

T. Haga, M. Nakagawa, **RH**,
and M. Ueda, PRL (2021)

$\rightarrow \gamma_{\text{R}} \neq \gamma_{\text{L}}$ の時 $\tau_2 = \mathcal{O}(L^0)$ $\tau_{\text{relax}} = \mathcal{O}(L)$ 矛盾？？

時間スケールの問題

$$\hat{\rho}(t) = e^{\mathcal{L}t}[\hat{\rho}(0)] = \hat{\rho}_{\text{ss}} + \sum_{a=2}^{\dim[\mathcal{H}]^2} c_a e^{\lambda_a t} \hat{\phi}_a$$
$$c_a = \frac{\text{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\rho}(0)]}{\text{Tr}[\hat{\chi}_a^\dagger \hat{\phi}_a]}$$

\mathcal{L} のスペクトルギャップが緩和時間 τ_{relax} を決める (?)

多くの場合正しいが、例外も存在する：

c_a の寄与が重要（分子が非常に小さくなりうる）

T. Haga, M. Nakagawa, RH, and M. Ueda, PRL (2021); T. Mori and T. Shirai, PRL (2020)

先ほどの例では、 $c_2 \sim e^{\mathcal{O}(L/\xi)}$ ξ ：定常状態の局在長

$$\rightarrow \tau_{\text{relax}} \sim \frac{L}{\xi \Delta_2}$$

より詳しくはZ. Gong and R. Hamazaki (2022) 参照

ここまでまとめ

Lindblad方程式のLiouvillianのスペクトルは、
CPTP写像の生成子であるがゆえの特徴的性質を持つ

無限時間後の状態の性質は実部がゼロの固有値の
種類と数によって分類ができ、
系の持つ対称性と深く関係する

スペクトルギャップは直感的には系の緩和時間を与え、
実際多くの場合にそうなっているが、
例外的な場合も構成できる

4. 非エルミートランダム行列と 開放量子カオス

開放量子多体系のスペクトルの普遍性？

Bethe ansatzを用いて解析的に

スペクトルを求められる可積分系も存在するものの、

多くの開放量子多体系では非可積分的であり

スペクトルを求めるのは通常不可能

**一般の非可積分な開放量子多体系において、
そのスペクトルに普遍性は存在するか？**

この節では非エルミートランダム行列理論に着目し、

まずその数理的な側面（対称性クラスとの関連）を述べる

エルミートランダム行列の普遍性

ランダム行列の
普遍的な統計分布

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \cdots & H_{NN} \end{pmatrix}$$

Q(H_{ij})から
ランダムに抽出

例) 固有値間隔分布 $p(s)$, $s \propto E_{\alpha+1} - E_{\alpha}$

$$Q(H_{ij}) \propto e^{-\beta H_{ij}^2}$$

(実ガウス分布)

$$Q(H_{ij}) \propto \delta(H_{ij} - 1) + \delta(H_{ij} + 1)$$

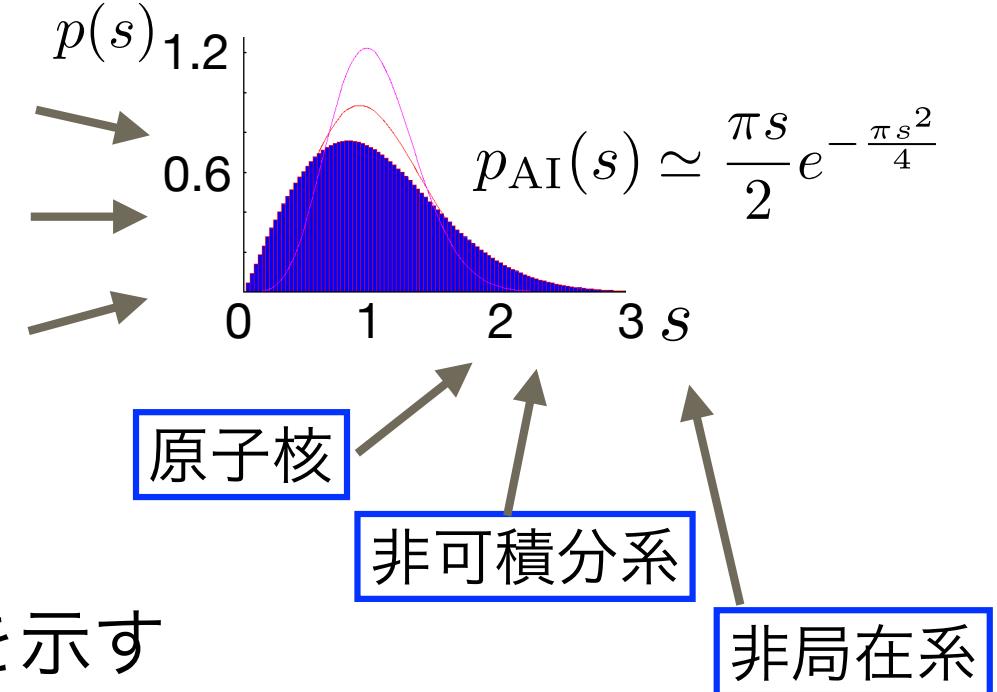
(実ベルヌーイ分布)

⋮

ランダムでないが

十分複雑な系も同様の普遍性を示す

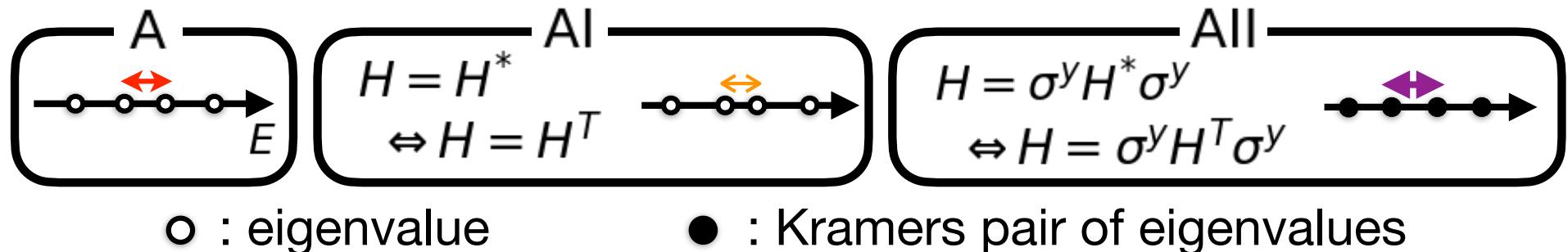
cf) 熱平衡化への応用 (非可積分性・非局在相の特徴付け)



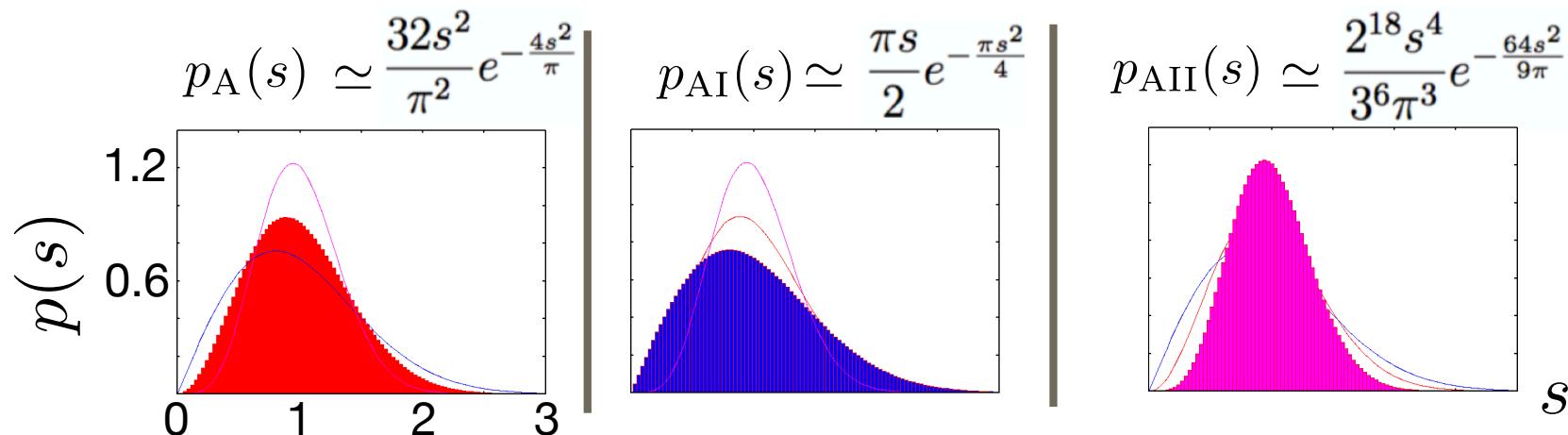
エルミートランダム行列の対称性と普遍性

Dysonによる時間反転を用いた対称性の分類

F.J. Dyson, Journal of Mathematical Physics 3, 1199 (1962)



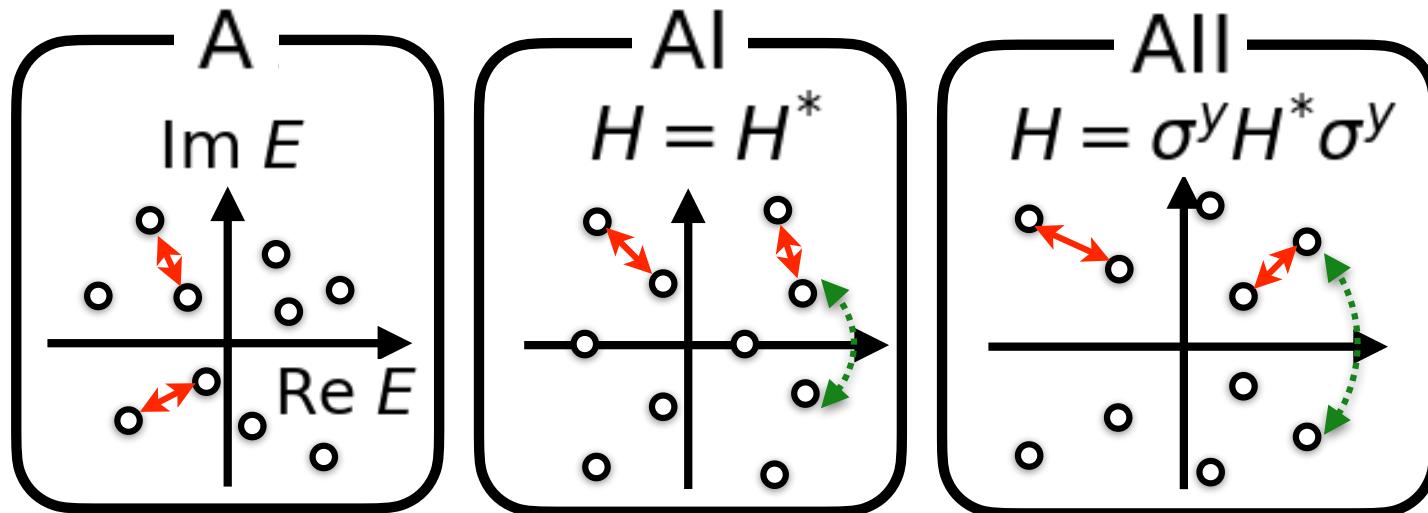
三種の対称性が三種の固有値間隔分布の普遍性を導く



非エルミートGinibreランダム行列

Ginibreによる時間反転を用いた対称性の分類

J. Ginibre, Journal of Mathematical Physics 6, 440 (1965)



複素平面上の固有値間隔分布 $p(s), s \propto \min_{\beta} |E_{\alpha} - E_{\beta}|$

← エルミートな場合と異なり、
三種の対称性は全て同じ固有値間隔分布の普遍性を導く
(対称性は非局所な固有値の相関のみに影響)

非エルミートランダム行列の普遍性

非エルミートランダム行列においても
三種の異なる普遍性クラスが現れるか？

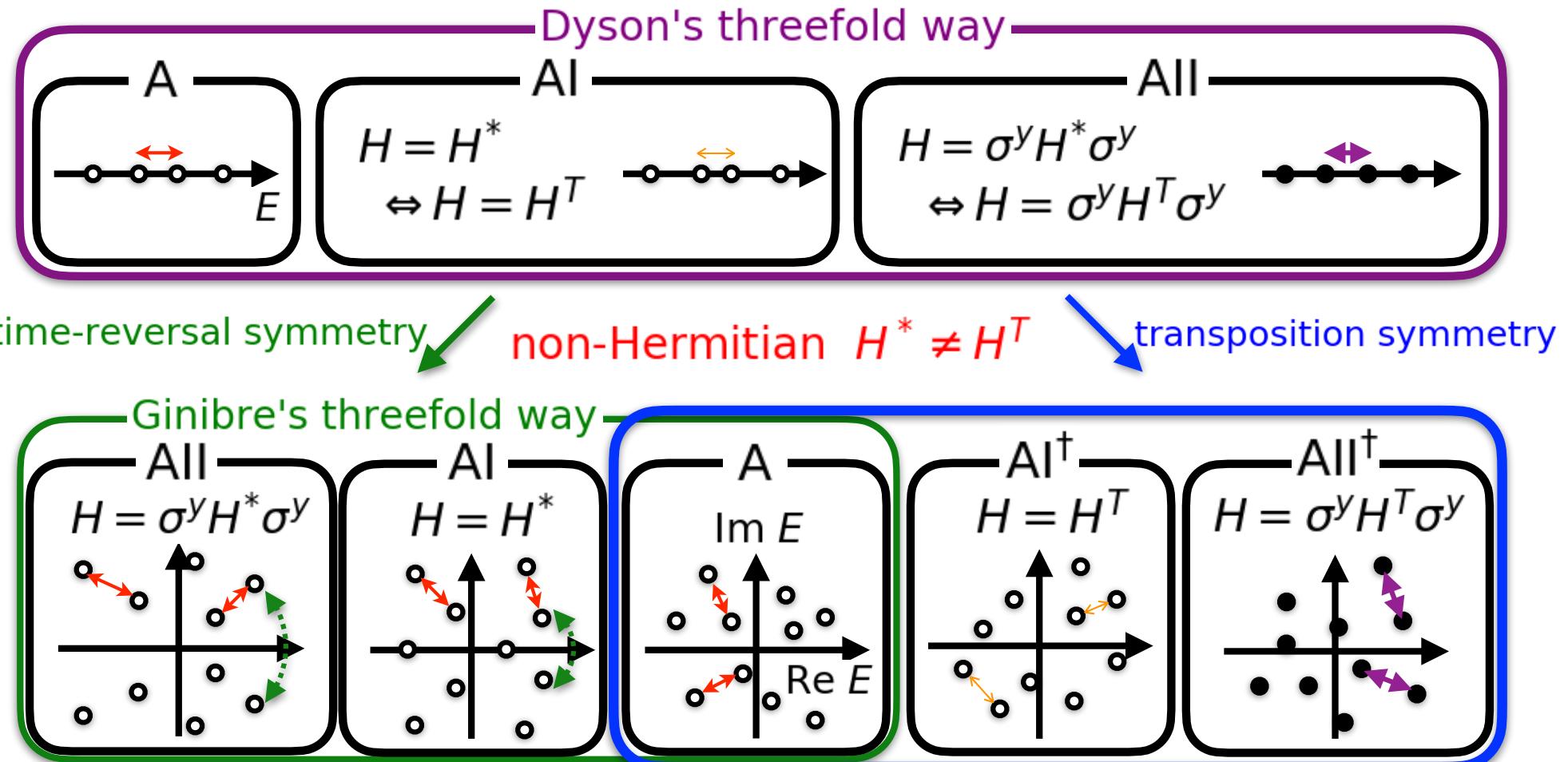
Yes

時間反転対称性でなく、転置の対称性に注目

R.Hamazaki, K. Kawabata, N. Kura and M. Ueda.
Phys. Rev. Research 2 (2), 023286 (2020)

転置の対称性クラス

転置の対称性は複素共役と異なる



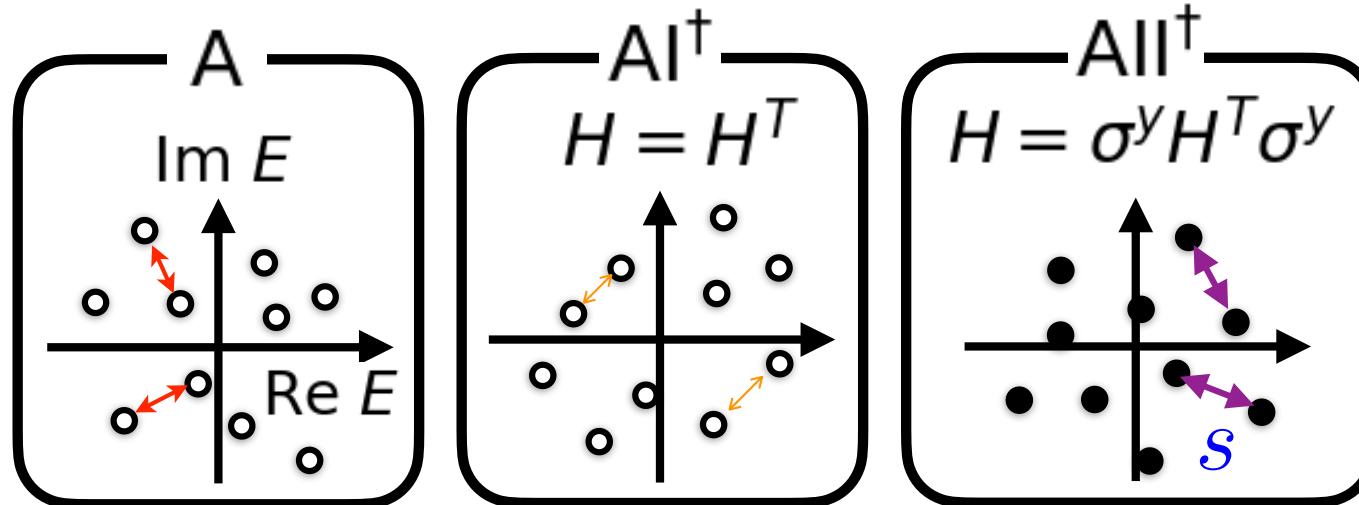
○ : eigenvalue

● : Kramers pair of eigenvalues

[D. Bernard and A. LeClair (2002); U. Magnea (2008); K. Kawabata et al. (2018)]

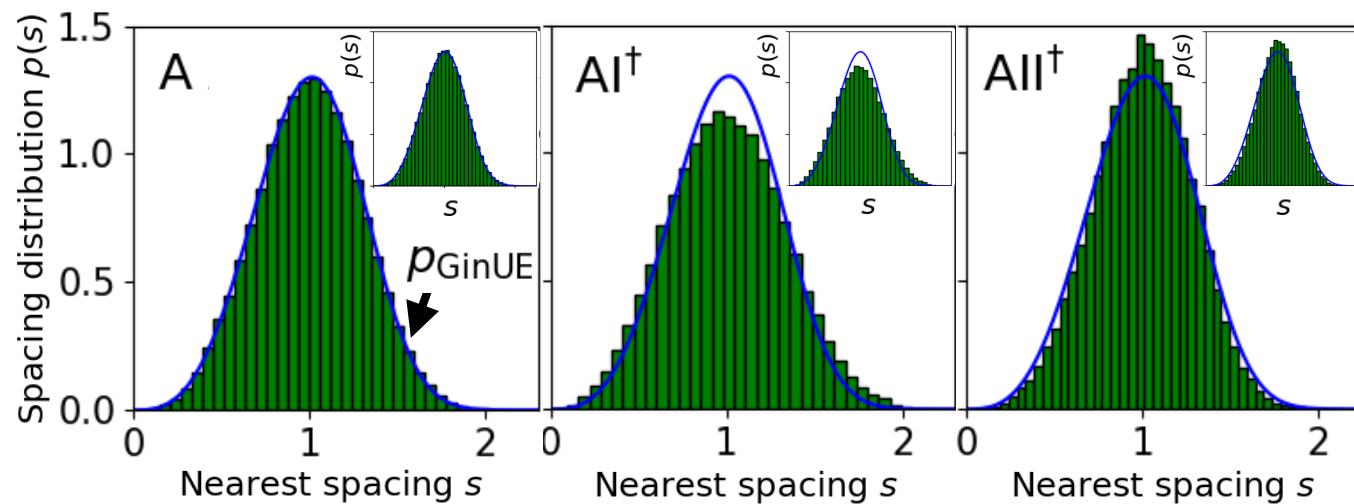
非エルミートランダム行列における三種の普遍固有値間隔分布

R. Hamazaki et al., Phys. Rev. Research 2 (2), 023286 (2020)



エルミート系と同様、
転置の対称性は
固有値間の相互作用を
変化させる

三種の固有値間隔分布の普遍性

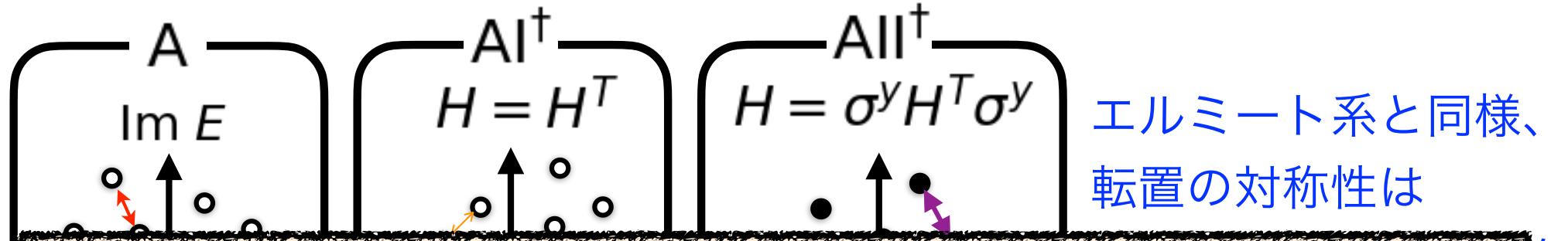


$Q(H_{ij})$:

- (main) ガウス分布
- (inset) ベルヌーイ分布

非エルミートランダム行列における三種の普遍固有値間隔分布

R. Hamazaki et al., Phys. Rev. Research 2 (2), 023286 (2020)

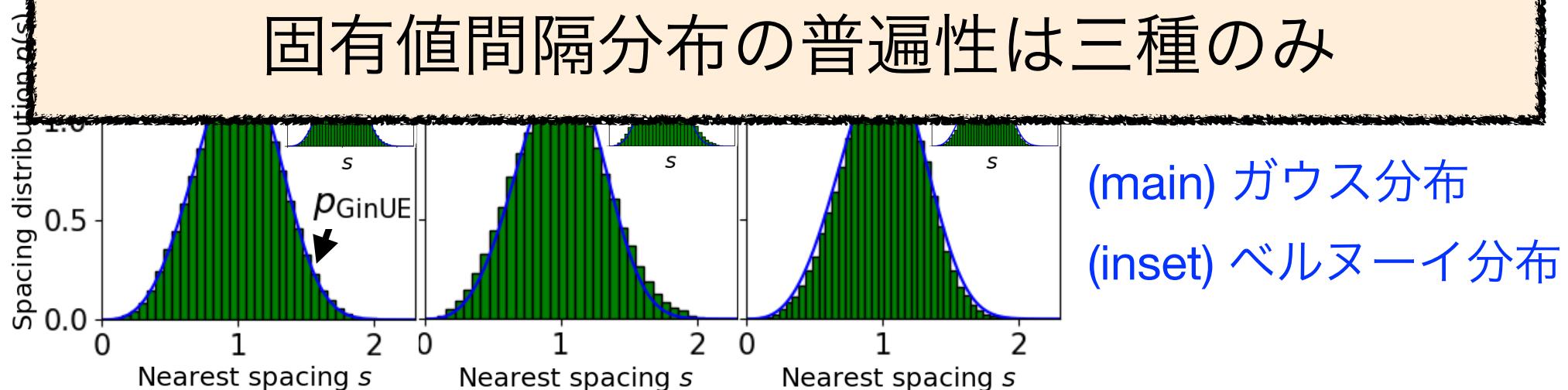


(粒子正孔対称性なども含めた)

38種知られる非エルミート対称性クラスのうち、

[Kawabata et al. PRX (2018)]

固有値間隔分布の普遍性は三種のみ

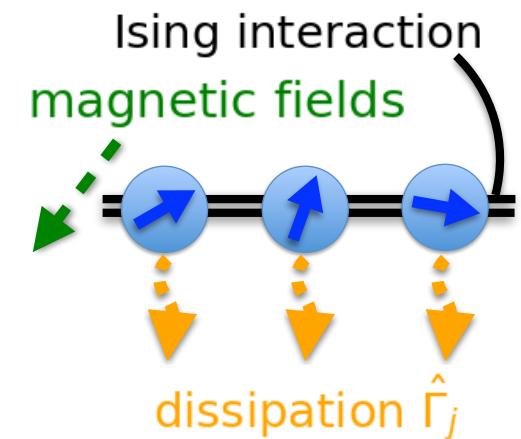


普遍性の応用：Lindblad方程式における「開放量子カオス」

R. Hamazaki et al., Phys. Rev. Research 2 (2), 023286 (2020)

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \mathcal{L}[\hat{\rho}] = -i[\hat{H}, \hat{\rho}] + \sum_{j=1}^L \gamma \left[\hat{\Gamma}_j \hat{\rho} \hat{\Gamma}_j^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \hat{\Gamma}_j^\dagger \hat{\Gamma}_j, \hat{\rho} \right\} \right]$$

$$\begin{cases} \hat{H} = - \sum_{j=1}^{L-1} (1 + \epsilon_j) \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - \sum_{j=1}^L (-1.05 \hat{\sigma}_j^x + 0.2 \hat{\sigma}_j^z) \\ \hat{\Gamma}_j = \text{(i)} \hat{\sigma}_j^z \text{ (dephasing)} \quad \text{or} \quad \text{(ii)} \hat{\sigma}_j^- \text{ (damping)} \end{cases}$$

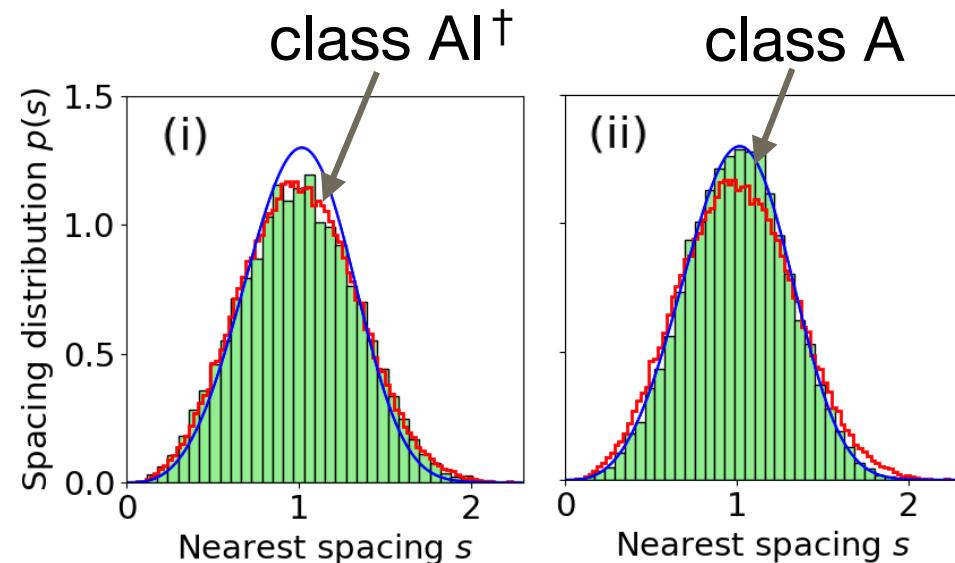


(i)のみが転置の対称性を保つ

リウビリアンスペクトル $\{\eta_\alpha\}$

$$\mathcal{L} [\hat{\nu}_\alpha] = \eta_\alpha \hat{\nu}_\alpha$$

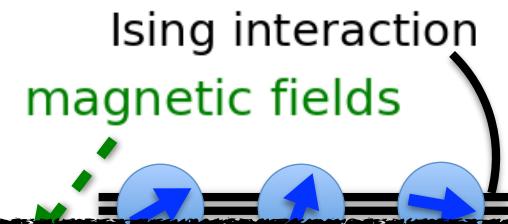
普遍性が現れる！



普遍性の応用：Lindblad方程式における「開放量子カオス」

R. Hamazaki et al., Phys. Rev. Research 2 (2), 023286 (2020)

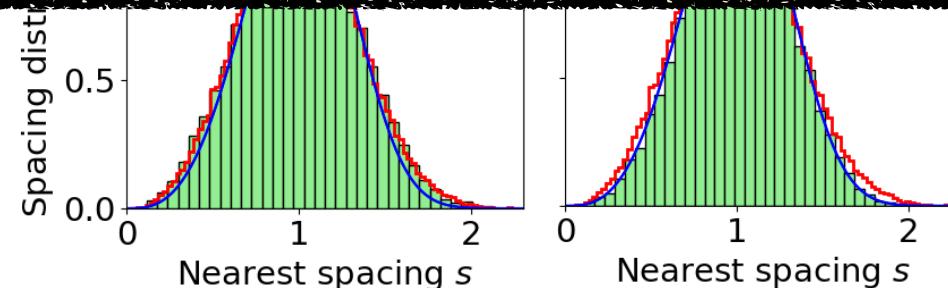
$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \mathcal{L}[\hat{\rho}] = -i[\hat{H}, \hat{\rho}] + \sum_{j=1}^L \gamma \left[\hat{\Gamma}_j \hat{\rho} \hat{\Gamma}_j^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \hat{\Gamma}_j^\dagger \hat{\Gamma}_j, \hat{\rho} \right\} \right]$$
$$\hat{H} = - \sum_{j=1}^{L-1} (1 + \epsilon_j) \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - \sum_{j=L}^L (-1.05 \hat{\sigma}_j^x + 0.2 \hat{\sigma}_j^z)$$



強い乱れなどが入ると、固有モードの「局在」により、ランダム行列の普遍性が破れる
開放量子カオス vs Lindbladian多体局在

R. Hamazaki, M. Nakagawa, T. Haga, M. Ueda, arXiv:2206.02984

普遍性が現れる！



ここまでまとめ

転置の対称性を考えることで、非エルミートランダム行列の固有値間隔分布に三種の普遍性が現れる

こうした普遍性は物理的な開放量子多体系にも現れ、開放量子カオスを特徴づける指標になると期待されている

Part IIIのまとめ

開放量子系の記述は一般に非ユニタリーであるが、特にMarkovなLindblad系を中心を開設した

Lindblad方程式のスペクトル理論から、系のダイナミクス等についての考察ができる

開放量子系におけるカオスなど、開放量子多体系の研究は現在ホットなトピックになっている