物性研究・電子版 Vol. 8, No. 1, 081210 (2020年2月号)

孤立量子多体系の緩和の理論

森貴司

概要

平衡統計力学では，マクロ系を長い時間放置すると等重率の原理に従う熱平衡状態へと緩和することが要請される．この理論的な要請を量子力学から説明できるだろうか？もしも外界から完全に孤立した量子多体系があったとしたら，それは本当に熱平衡状態に緩和するだろうか？このような基礎的な問いを解明しようとする理論および実験研究がいま力強く進められている．本稿では，問題の背景を説明した後，簡単な量子力学モデルの具体的な計算を通して孤立量子系の緩和を理解するために重要となる概念を説明する．

1　はじめに

環境から完全に切り離された量子系—これを**孤立量子系**とよぶ—は熱力学的な経験事実と整合する振る舞いを見せるだろうか？特に，孤立量子系は熱平衡状態への緩和（**熱化**，あるいは**熱平衡化**とよぶ）を示すだろうか？この基礎的な問いに関する近年の理論的進展を紹介し，緩和現象という一見変哲もない現象の背後にある物理の奥深さを多少なりとも伝えることが講義の目的である．

ふつう，熱力学的な考察の対象となる身近な物理系は決して孤立系ではない．孤立した多体力学系という概念は極端な理想化を伴うものであり，現実世界と大きいギャップがあるように見える．それでは，孤立系を研究する意義は何だろうか．この疑問への回答としては例えば以下のようなものが考えられるだろう：

> 孤立系という設定は，ミクロな力学の可逆性とマクロな現象の不可逆性の関係を理論的に解明するという目的に適している．実際には，マクロな物理系は環境との相互作用に曝されているかもしれないが，まずは，孤立系で緩和現象が説明され得るかを理解したい．孤立系についての考察の結果，環境との相互作用が緩和現象にとって不可欠なものなのか，それとも単に副次的な働きをするにすぎないのかがわかるはずだ．

実際，このような努力の副産物として新しい物理が生まれてきた例もある[*1]．一方，最近の孤立量子系の緩和の理論の進展の背景には，孤立量子系のダイナミクスが冷却原子気体やトラップされたイオンを使った実験で観測できるようになってきたことがある．すると，孤立量子系は現実的な設

[*1] 古典的な例としては，Fermi-Pasta-Ulam による数値実験 [1] はその後のソリトン理論の発展につながり，可積分に近い系における Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM) の定理との関係が議論された．より最近の例では，例えば多体局在現象 (Many-Body Localization; MBL)[2] や Bethe 可解モデルにおける準局所保存量の発見 [3]，あるいは量子多体系の「典型的な量子状態」の考え方を数値計算手法として応用する試み [4–6] を挙げることができる．

定として意味を持つようになり，それを研究する次のような動機も生じてくる：

> 孤立量子系の振る舞いを理論的に研究することは，現実的な問題として重要になってきた．単に，なぜマクロ系は緩和するのか，という理論的な問題に答えるだけではなく，孤立量子系だからこそ生じる興味深い現象を予言し，理解したい．

本稿では，この分野の最近の進展を理解するのに必要な基礎的概念について説明する．

2 理論的背景

2.1 孤立量子系

孤立量子系とは，環境から完全に切り離された量子系であり，ハミルトニアン $\hat{H}=\sum_n E_n\left|n\right\rangle\left\langle n\right|$ で特徴付けられる．ここで $\left|n\right\rangle$ はエネルギー固有値 E_n に属するエネルギー固有状態である．エネルギー固有値が幅 $E-\Delta E$ から E の間にあるすべてのエネルギー固有状態によって張られる Hilbert 部分空間

$$\mathcal{H}_{E,\Delta E}:=\mathrm{Span}\left\{\left|n\right\rangle : E_n\in[E-\Delta E,E]\right\} \tag{1}$$

を**エネルギーシェル**とよぶ．ここで ΔE はミクロなスケールで見ると十分大きいが，マクロなスケールで見ると十分小さい値にとっておけばよい．以下の議論は ΔE の詳細な値には依存しない．いま，仮定として，初期時刻 $t=0$ では量子系はエネルギーシェルに属する純粋状態 $\left|\psi(0)\right\rangle\in\mathcal{H}_{E,\Delta E}$ で表わされるとしよう．時刻 t の量子状態 $\left|\psi(t)\right\rangle$ は Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left|\psi(t)\right\rangle=\hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle \tag{2}$$

に従って時間発展する．この方程式を形式的に解くと

$$\left|\psi(t)\right\rangle=e^{-i\hat{H}t/\hbar}\left|\psi(0)\right\rangle \tag{3}$$

となる．時刻 0 の状態を時刻 t の状態に変換する時間発展演算子 $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ はユニタリ演算子である．ユニタリ変換の重要な性質として，二つの状態ベクトルの間の距離を変えないという性質がある．一方，熱力学的な経験事実によれば，マクロ系を放置すると初期状態のほとんどの性質は失われ，少数の熱力学的変数のみで特徴付けられる熱平衡状態と呼ばれる状態に緩和する（熱平衡化）．ユニタリ変換では初期状態の情報は失われないし，時間変化しない「定常な量子状態」に落ち着くこともない．

さらに，統計力学では熱平衡状態をミクロカノニカル分布 ρ_{mc}，あるいはカノニカル分布 $\rho_{\mathrm{can}}=e^{-\beta\hat{H}}/Z$ を用いて記述する．これらは混合状態である．一方，孤立量子系では，もし初期状態が純粋状態 $\left|\psi(0)\right\rangle$ であれば時間発展した後も純粋状態 $\left|\psi(t)\right\rangle$ であり，決して混合状態にはならない．

以上の議論から孤立量子系では熱平衡化が起こらないことが結論できそうである．しかし，問題はこれで終わりではない．

2.2　熱平衡状態の典型性

上の議論では，我々は暗黙のうちに二つの異なる量子状態 $|\psi\rangle$ と $|\psi'\rangle$ を互いに区別できると仮定してきた．もしも任意のエルミート演算子が測定可能量ならば，確かに，異なる二つの量子状態の見分けはつくし，純粋状態と混合状態の見分けもつく．しかし，我々がマクロ系を相手にするとき，なにも「任意の測定可能量」に興味があるわけではない．マクロ系での観測可能量を適切に制限することが必要である．そこで，$i=1,2,\dots,N$ でラベル付けされた格子点上で定義された量子系（量子スピン系）を考え，物理量のクラスとして**局所物理量**と **k-local 物理量**を導入する．

局所物理量　局所的な領域 $X\subset\{1,2,\dots,N\}$ のみに非自明に作用する演算子．より正確には，領域 X の長さ ℓ_X を $\ell_X=\max_{i,j\in X}d(i,j)$ と定義したとき，$\ell_X\le\ell$ を満たすものを**長さ ℓ の局所物理量**とよぶ．ここで $d(i,j)$ は格子点 i と j の間の距離である（ユークリッド距離でもよいしハミング距離でもよい）．例えば，1 次元スピン 1/2 系で $\hat\sigma_i^x$，$\hat\sigma_i^z\hat\sigma_{i+1}^z$，$\hat\sigma_i^x\hat\sigma_{i+2}^y$ はそれぞれ長さ 0,1,2 の局所物理量である．また，格子点 i を含む領域に作用する局所物理量 $\hat O_i$ の和 $\sum_i\hat O_i$ も局所物理量とよぶこともある．

k-local 物理量　演算子が作用する領域 X が高々 k 個以下の格子点からなるもの．つまり $|X|\le k$．長さ ℓ はいくら大きくても構わない．例えば $\hat\sigma_i^x\hat\sigma_{i+N/2}^x$ は局所物理量ではないが，2 個の格子点 i と $i+N/2$ のみに非自明に作用するので，2-local 物理量である．

局所物理量のみ，あるいは k-local 物理量のみが観測可能量であると制限すれば，二つの異なる量子状態が互いに区別がつかなくなる，ということがあってもよい．特に，純粋状態 $|\psi\rangle$ がミクロカノニカル分布 $\rho_{\rm mc}$ とこの意味で区別がつかないとき，つまり

$$\langle\psi|\hat O|\psi\rangle\approx\mathrm{Tr}\,\hat O\rho_{\rm mc}\tag{4}$$

が任意の局所物理量（または任意の k-local 物理量）について満たされるなら，状態 $|\psi\rangle$ は $\rho_{\rm mc}$ と**局所的に等価**であるという．ミクロカノニカル分布（またはカノニカル分布）と局所的に等価な量子状態 $|\psi\rangle$ のことを熱平衡状態に対応する量子状態と解釈できる．

それでは，一つの量子状態が $\rho_{\rm mc}$ と局所的に等価であるということはそもそもあり得ることだろうか．$|\psi\rangle$ が $\rho_{\rm mc}$ と局所的に等価であるという主張は，言い換えると，任意の局所的な領域 X について

$$\rho_\psi^X:=\mathrm{Tr}_{X^c}|\psi\rangle\langle\psi|\approx\mathrm{Tr}_{X^c}\rho_{\rm mc}\tag{5}$$

が満たされるということである．ここで，ρ_ψ^X は状態 $|\psi\rangle$ の領域 X への縮約密度行列である（式中の X^c は，X に含まれない領域全体を指す）．式 (5) は，系全体の状態 $|\psi\rangle$ が純粋状態でも，部分系 X のみを観測すると混合状態 ρ_ψ^X となり，しかもそれは系全体の状態が $\rho_{\rm mc}$ だと仮定して導かれる縮約密度行列 $\mathrm{Tr}_{X^c}\rho_{\rm mc}$ と等しいことを主張する．

量子力学では，系全体の状態が純粋状態でも，部分系の状態は混合状態になり得る．これは部分系とそれ以外の部分の間に**量子エンタングルメント**が存在するときに可能である．

もし，X と X^c の間の相互作用が弱ければ，部分系 X のハミルトニアンを $\hat{H}_X$ として，

$$\mathrm{Tr}_{X^c}\rho_{\mathrm{mc}} \approx \frac{e^{-\beta \hat{H}_X}}{\mathrm{Tr}_X e^{-\beta \hat{H}_X}} \tag{6}$$

と書け，したがって式 (5) は

$$\rho_\psi^X \approx \frac{e^{-\beta \hat{H}_X}}{\mathrm{Tr}_X e^{-\beta \hat{H}_X}} \tag{7}$$

を意味する．つまり，系全体は純粋状態でも，部分系の縮約密度行列はカノニカル分布となる．

実際，システムサイズ N を十分大きくとれば，式 (7) はエネルギーシェル $\mathcal{H}_{E,\Delta E}$ 内のほとんどすべての量子状態 $|\psi\rangle$ について満たされることが証明されている．つまり，ほとんどすべての量子状態は小さい部分系を見るとカノニカル分布になっている．このことは **canonical typicality** とよばれる [7]．

より一般的な定理が Popescu らによって得られている [8]．いま，X と X^c の間の相互作用が弱いことは仮定しない．システムサイズ N が十分大きければ，式 (5) がほとんどすべての量子状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{E,\Delta E}$ について成立する．ただし X は $|X| \ll N$ であればどのようにとっても構わない．すなわち，エネルギーシェル内のほとんどすべての量子状態は，ミクロカノニカル分布と (k-local の意味で）局所的に等価である．

このように，熱平衡状態はほとんどすべての量子状態が共通して持つ性質であり，このことを**熱平衡状態の典型性**という．以下に，熱平衡状態の典型性についていくつか注釈を加えよう．

物理量の局所性は典型性の成立にとって重要か？

いま，任意のエルミート演算子 $\hat{O}$ を仮定する．これは非局所的な演算子でも構わない．次に，純粋状態 $|\psi\rangle$ をエネルギーシェル $\mathcal{H}_{E,\Delta E}$ からランダムに選ぶ．すると，任意の $\epsilon > 0$ に対して，

$$\left(\left| \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle - \mathrm{Tr}\,\hat{O}\rho_{\mathrm{mc}} \right| \geq \epsilon \text{ となる確率} \right) \leq \frac{\|\hat{O}\|^2}{\epsilon^2 D} \tag{8}$$

が証明される [9, 10]．ここで $D := \dim \mathcal{H}_{E,\Delta E}$ はエネルギーシェルの次元，すなわち，エネルギー固有値が $E - \Delta E$ と E の間にあるエネルギー固有状態の数であり，大きさとしては $D = e^{\mathcal{O}(N)}$ のオーダーの巨大な数である．

この結果からわかることは，熱平衡状態の典型性にとって重要なのは，注目する物理量の数がすべてのエルミート演算子の数に比べて十分少ないことだけであり，局所性は実はどうでもよいということである．

熱平衡化を典型性から理解できるか？

熱平衡状態の典型性は，量子状態を一つ選ぶと，それは典型的には熱平衡状態に対応しており，非平衡状態は極めて非典型的な状態だということを意味する．すると，熱平衡化は，非典型的な状態から典型的な状態に推移することに対応し，熱平衡化の極めて自然な見方を与えてくれる．それでは，これで熱平衡化の物理は理解できたといえるだろうか．答えはノーである．上に述べた意味

での熱平衡状態の典型性の重大な難点の一つは，$N \gg 1$ を満たすどんなマクロ系でも常に成立してしまうことである．実際，典型性の証明では Hilbert 空間の次元が巨大であることだけが使われており，そこにはほとんど物理が存在しない．一方，熱平衡化については，どんなマクロ系でも起こるわけではないことがわかっている．したがって，熱平衡化を単なる熱平衡状態の典型性の帰結と考えるわけにはいかない．非典型的な状態から出発すればいずれ典型的な状態に移るだろう，という主張は一見自然ではあるがそれほど自明なものではなく，この微妙な点を追究することによって，孤立量子系の緩和現象の背後に興味深い物理があることがわかってきたのである．

実験

孤立量子系の熱平衡化（あるいはその破れ）を観測した実験はいくつかあるが，その中でも，ここでは Kaufman et al. [11] を簡単に説明しよう．この実験では，冷却したルビジウム原子気体を 1 次元光格子に閉じ込め Bose-Hubbard モデルを実現する．まず，すべてのサイトに原子が一つずつ占有した状態を初期状態として準備し，時間発展させる．原子は隣のサイトにトンネル効果により飛び移ることができるため，各サイトの粒子数の分布は時間変化していく．この実験では時間発展後の各サイトの粒子数分布を測定し，実際，それが熱平衡分布に緩和する様子を観測した．

この実験で興味深い点は量子状態の純粋度 $P = \mathrm{Tr}\,\rho^2$ をも測定していることである．ここで ρ は量子系の密度行列であり，もし量子系が純粋状態を保っていたとすると $\rho = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ であり，$P = 1$ である．一方，系全体の状態が本当にミクロカノニカル分布に緩和してしまったとしたら，$P = 1/D = e^{-O(N)} \ll 1$ となる．この実験では，元の量子系のコピーを用意して時間発展後に互いに干渉させるという方法 [12] を利用して量子状態の純粋度を測定することに成功した．その結果，粒子数分布が熱平衡分布に緩和した後でも，純粋度 P は 1 に近い値を保っていることがはっきりと示された．つまり，粒子数分布のような局所物理量を見るとミクロカノニカル分布と区別がつかないが，系全体の状態は純粋状態のままである，という孤立量子系の熱平衡化の特徴をこの実験はクリアに見せてくれる．

3　簡単なモデルの解析

孤立量子系の熱平衡化を理解する出発点として，まず孤立系の Schrödinger 方程式による時間発展で本当に緩和現象が記述できるのかを簡単なモデルの解析によって確認してみよう．ここで考えるモデルは 1 次元の Ising 型のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N} J_{ij}\hat{\sigma}_i^z\hat{\sigma}_j^z \tag{9}$$

である（$\boldsymbol{\sigma}_i$ はサイト i の Pauli 演算子）．簡単のため周期境界条件を課し，スピンの数 N は奇数とする．標準的な Ising モデルでは相互作用は最近接サイト間のみに働くとするが，いまは相互作用は遠くのスピン同士にも働き，J_{ij} はサイト i と j の間の距離 $|i-j|_{\mathrm{P}}$ のみに依存すると仮定する：$J_{ij} = J(|i-j|_{\mathrm{P}})$．ここで $|i-j|_{\mathrm{P}}$ は周期境界条件で測った距離で，$|i-j|_{\mathrm{P}} := \max\{|i-j|, N-|i-j|\}$

と定義される．

いま，時刻 $t=0$ ではすべてのスピンは x 方向にそろっているとする：

$$|\psi(0)\rangle = |{\uparrow_x}, {\uparrow_x}, \ldots, {\uparrow_x}\rangle . \tag{10}$$

ここで $|{\uparrow_x}\rangle$ は $\hat{\sigma}^x|{\uparrow_x}\rangle = |{\uparrow_x}\rangle$ を満たす．この初期状態から出発して，物理量 $\hat{\sigma}_1^{\pm} = (\hat{\sigma}_1^x + i\hat{\sigma}_1^y)/2$ の期待値 $\langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_t = \langle\psi(t)|\hat{\sigma}_1^{\pm}|\psi(t)\rangle$ の時間発展を調べよう．Schrödinger 描像から Heisenberg 描像に移ると，$\langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_t = \langle\hat{\sigma}_1^{\pm}(t)\rangle_0$ と書ける．ここで $\hat{\sigma}_1^{\pm}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\sigma}_1^{\pm}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ である．

公式 $f(\hat{\sigma}^z)\hat{\sigma}^{\pm} = \hat{\sigma}^{\pm}f(\hat{\sigma}^z \pm 2)$ を使うと

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_1^{\pm}(t) &= \hat{\sigma}_1^{\pm}e^{i\hat{H}(\hat{\sigma}_1^z\to\hat{\sigma}_1^z\pm 2)t/\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{\sigma}_1^{\pm}e^{2i\sum_j^N J(|i-j|_{\mathrm{P}})t/\hbar} \\ &= \hat{\sigma}_1^{\pm}\prod_{j=1}^{N}\left[\cos(2J(|i-j|_{\mathrm{P}})t/\hbar) + i\hat{\sigma}_j^z\sin(2J(|i-j|_{\mathrm{P}})t/\hbar)\right]\end{aligned} \tag{11}$$

と変形できる．初期状態 (10) で平均をとると

$$\langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_t = \langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_0\prod_{j=1}^{N}\Big[\cos(2J(|i-j|_{\mathrm{P}})t/\hbar) + i\langle\hat{\sigma}_j^z\rangle_0\sin(2J(|i-j|_{\mathrm{P}})t/\hbar)\Big] = \frac{1}{2}\prod_{n=1}^{(N-1)/2}\cos^2(2J(n)t/\hbar) \tag{12}$$

を得る．

いま，特別な場合として $J(n) = 2^{-(n+1)}\hbar\Omega$ を代入しよう．これは，スピン間の距離とともに指数関数的に減衰していく相互作用に相当する．このようなモデルは Emch [13] と Radin [14] によって解析された．公式

$$\prod_{n=1}^{\infty}\cos(2^{-n}x) = \frac{\sin x}{x} \tag{13}$$

を式 (12) に代入して変形すると

$$\langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_t = \frac{1}{2}\left(\frac{\sin(\Omega t)}{\Omega t}\right)^2\left[\frac{2^{-(N-1)/2}\Omega t}{\sin(2^{-(N-1)/2}\Omega t)}\right]^2 \tag{14}$$

となる．この式の角括弧 $[\ldots]$ の部分は N に依存する有限サイズ効果を表わす．この部分は $N\to\infty$ で 1 に漸近するから，熱力学的極限 $N\to\infty$ でのスピンの時間発展は

$$\langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_t = \frac{1}{2}\left(\frac{\sin(\Omega t)}{\Omega t}\right)^2 \tag{15}$$

のように求まる．初期値 1/2 から平衡値 0 に向かって緩和していく振る舞いが得られた．実際，$\hat{\sigma}_1^{\pm}$ の平衡状態での期待値は 0 であるから，$\hat{\sigma}_1^{\pm}$ は熱平衡化することがわかる．しかし，このモデルでは $\hat{\sigma}_i^z$ は保存量であり緩和しないため，すべての局所物理量がこのように熱平衡化するわけではない．

次に有限の N の効果（つまり式 (14) の角括弧の部分）を考察してみよう．式 (14) をよく吟味すると，n を自然数として，$t = n(\pi/\Omega)2^{(N-1)/2}$ のとき $\langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_t$ は初期値 1/2 に戻ってくることが

わかる．これは**再帰現象**と呼ばれており，力学の可逆性の反映である*2．ただし，このモデルでは再帰時間は $e^{O(N)}$ のように N とともに増大するので，多体系では再帰現象は観測時間内にはまず起こらない*3．

この簡単なモデルの解析から次のことがわかる．

十分長時間観測すれば，ほとんどすべての時刻で局所物理量はほぼ一定の値をとる（例えば $\langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_t \approx 0$）．これは，すなわち**長時間ゆらぎ**が小さいこと

$$\overline{\langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_t^2} - \overline{\langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_t}^2 \approx 0 \tag{16}$$

を意味している．ここで，$\overline{O(t)} = \lim_{T\to\infty}(1/T)\int_0^T dt\, O(t)$ は長時間平均を表わす．また，いまのモデルでは $\hat{\sigma}_1^{\pm}$ のような一部の局所物理量では長時間平均が熱平衡値と一致する：

$$\overline{\langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_t} \approx \mathrm{Tr}\,\hat{\sigma}_1^{\pm}\rho_{\mathrm{mc}}. \tag{17}$$

緩和と熱平衡化

いまのモデルの解析から，孤立量子系は緩和現象を見せることがわかった．力学の可逆性による再帰現象が存在するため，真に定常な状態への緩和は起こらない（系が緩和したように見えても，長い時間待っていれば必ず初期状態の近くに戻ってくる）．しかし再帰は非常に稀な現象であり，物理量の量子力学的期待値がほとんどすべての時刻で実質的に一定の値をとることが孤立量子系の緩和に対応する．すなわち，物理量 $\hat{O}$ が

$$\delta O^2 = \overline{\langle\hat{O}\rangle_t^2} - \overline{\langle\hat{O}\rangle_t}^2 \ll \|\hat{O}\|^2 \tag{18}$$

を満たすとき，物理量 $\hat{O}$ は長時間後に**緩和** (equilibration) するという*4．式 (18) に加えて，長時間平均が熱平衡値 $\langle\hat{O}\rangle_{\mathrm{eq}} := \mathrm{Tr}\,\hat{O}\rho_{\mathrm{mc}}$ にほぼ等しい

$$\overline{\hat{O}}_t \approx \langle\hat{O}\rangle_{\mathrm{eq}} \tag{19}$$

とき，物理量 $\hat{O}$ は**熱平衡化** (thermalization) する，という．

4 緩和の十分条件

まずは，孤立量子系が緩和する条件を調べよう．ハミルトニアン $\hat{H}$ を持つ孤立量子系を考える．いま，エネルギーシェル $\mathcal{H}_{E,\Delta E}$ を考え，表記を簡単にするため，エネルギーシェル内のエネ

*2 有限の領域に閉じ込められた古典力学系において必ず再帰現象が生じることは Poincaré によって証明されたが，その量子版（量子再帰定理）も一般的に証明されている [15]．

*3 一般の量子多体系では，再帰時間は典型的には $\exp(\exp(O(N)))$ のように N とともに信じられない速さ（指数関数の指数関数）で増大する．N 粒子古典系では再帰時間は通常 $\exp(O(N))$ 程度である．

*4 $\|\hat{O}\|$ は $\hat{O}$ の演算子ノルムであり，$\|\hat{O}\| := \sup_{|\psi\rangle:\langle\psi|\psi\rangle=1}\sqrt{\langle\psi|\hat{O}^\dagger\hat{O}|\psi\rangle}$ と定義される．

ルギー固有値および固有状態を適当にラベル付けしてそれぞれ E_n，$|n\rangle$ と書く：$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$，$E-\Delta E \le E_n \le E$．初期状態 $|\psi(0)\rangle$ はエネルギーシェル内のエネルギー固有状態の重ね合わせで与えられると仮定する：$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$．Schrödinger 方程式を形式的に解くことで，時刻 t での量子状態 $|\psi(t)\rangle$ は $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle$ で与えられることがわかる．したがって，物理量 $\hat{O}$ の量子力学的期待値 $\langle\hat{O}\rangle_t = \langle\psi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle$ の長時間平均は

$$\overline{\langle\hat{O}\rangle_t} = \sum_n |c_n|^2 \hat{O}_{nn} \tag{20}$$

と計算される．ただし，エネルギー縮退はないと仮定し，$\hat{O}_{nm} = \langle n|\hat{O}|m\rangle$ と表記した．

緩和の条件は時間ゆらぎ δO が小さいこと，つまり式 (18) を満たすことだった．時間ゆらぎを実際に計算すると

$$\delta O^2 = \sum_{n\neq m}\sum_{k\neq l} c_n^* c_m c_k c_l^* \overline{e^{i(E_n-E_m-E_k+E_l)t/\hbar}} \hat{O}_{nm}\hat{O}_{kl}^* = \sum_{n\neq m}\sum_{k\neq l} c_n^* c_m c_k^* c_l \delta_{E_n,E_m}\delta_{E_k,E_l} \tag{21}$$

と変形される．ここで，**非共鳴条件**[*5]

$$E_n - E_m = E_k - E_l \neq 0 \quad ならば \quad n=k \text{ かつ } m=l \tag{22}$$

を仮定すると，

$$\delta O^2 = \sum_{n\neq m} |c_n|^2|c_m|^2|\hat{O}_{nm}|^2 \tag{23}$$

という簡単な形になる．ここで，相加平均と相乗平均の関係より $|c_n|^2|c_m|^2 \le (|c_n|^4+|c_m|^4)/2$ だから，

$$\delta O^2 \le \sum_n |c_n|^4(\hat{O}\hat{O}^\dagger)_{nn} \le \frac{\|\hat{O}\|^2}{D_{\mathrm{eff}}} \tag{24}$$

を得る [18]．ここで，初期状態 $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$ の**有効次元** D_{eff} を

$$D_{\mathrm{eff}} = \frac{1}{\sum_n |c_n|^4} \tag{25}$$

と定義した．有効次元は，初期状態が大体何個程度のエネルギー固有状態を重ね合わせることで作られるかを表わしている．典型的には $D_{\mathrm{eff}} = e^{O(N)}$ であり，多体系では非常に大きな数になる．したがって，不等式 (24) の右辺は非常に小さく，条件 (18) が満たされることがわかる．このように，**非共鳴条件を満たす量子多体系では，大抵の初期状態について緩和が生じる**ことがわかる．

節 3 で考察した Ising 型のモデルでは，相互作用が指数減衰しながら系全体に広がっている場合（$J_{ij} = 2^{-(|i-j|_{\mathrm{P}}+1)}\hbar\Omega$）に $\langle\hat{\sigma}_1^{\pm}\rangle_t$ の緩和が起こることを導いたが，もし相互作用を有限の距離で完全に切ってしまうと，非共鳴条件を強く破ってしまい，緩和は起こらなくなる．ただし，これは Ising 型のモデルの特殊性によるもので，相互作用の長距離性が非共鳴条件の本質というわけではない．

---

*5 緩和の議論における非共鳴条件の重要性は，古くは von Neumann [16] によって認識されていた．また，非共鳴条件を用いた緩和のミクロな導出は Tasaki [17] によってなされた．

5 固有状態熱化仮説 (ETH)

5.1 strong ETH

熱平衡化の条件は，緩和が起こり，かつ式 (19) が満たされることだった．いま，緩和が起こることは仮定する．エネルギー縮退はないと仮定し，初期状態 $|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ について物理量 $\hat{O}$ の長時間平均を計算すると $\overline{\langle\hat{O}\rangle_t} = \sum_n |c_n|^2 \hat{O}_{nn}$ となる．すると，式 (19) は

$$\sum_n |c_n|^2 \hat{O}_{nn} \approx \langle\hat{O}\rangle_{\mathrm{eq}} \tag{26}$$

と書ける．もしこれが**任意の**初期状態について成立すべきと要請すれば，演算子 $\hat{O}$ の**すべての**対角要素が熱平衡値に近いこと，つまり

$$\text{すべての } n \text{ について} \quad \hat{O}_{nn} \approx \hat{O}_{\mathrm{eq}} \tag{27}$$

が結論される．言い換えると，すべてのエネルギー固有状態がミクロカノニカル分布と局所的に等価であれば，熱平衡化が説明される．式 (27) が任意の局所物理量 $\hat{O}$ について成立することを**強い意味での固有状態熱化仮説**（strong ETH），あるいは単に固有状態熱化仮説（ETH）という[*6]．

なお，すべての局所物理量が式 (27) を満たさなくても，ある物理量 $\hat{O}$ が式 (27) を満たすなら，少なくともその物理量は熱平衡化する．節 3 で扱った Ising 型のモデルでは，$\hat{O} = \hat{\sigma}_1^{\pm}$ とすると式 (27) を満たすことが確かめられる．節 3 では，特別な初期状態のもとで具体的にダイナミクスを計算して $\hat{\sigma}_1^{\pm}$ が熱平衡化することを確かめたが，実は，$\hat{\sigma}_1^{\pm}$ は任意の初期状態について熱平衡化することがこの考察だけから結論されるのである．

Strong ETH は広いクラスの非可積分量子多体系で成立すると考えられており，いくつかのモデルの数値計算でその傍証が得られている [19, 20]．また，von Neumann は 1929 年の先駆的な研究 [16] で，基準となるハミルトニアンにランダムなユニタリ変換を施すことによって得られたランダムハミルトニアンは，Hilbert 空間の次元が大きければほぼ確実に strong ETH を満たすことを証明している[*7]．

実際，ランダム行列と strong ETH には密接な関係がある．いま，局所演算子 $\hat{O}$ の固有値と固有ベクトルをそれぞれ O_i，$|i\rangle$ とすると，$\hat{O}$ のエネルギー表示での行列要素 $\hat{O}_{nm}$ は $\hat{O}_{nm} = \sum_i O_i \langle n|i\rangle \langle i|m\rangle$ となる．いま，エネルギー固有状態 $|n\rangle$ は $\{|i\rangle\}$ の基底でランダムベクトルとみなせることを仮定する．すなわち，$\psi_{n,i} := \langle i|n\rangle$ はランダム変数で，

$$\mathbb{E}[\psi_{n,i}] = 0, \qquad \mathbb{E}[\psi_{n,i}\psi_{m,j}^*] = \frac{1}{D}\delta_{nm}\delta_{ij}, \qquad \mathbb{E}[\psi_{n,i}\psi_{m,j}] = 0 \tag{28}$$

[*6] ETH は Eigenstate Thermalization Hypothesis の略．

[*7] ざっくり言うと，ほとんどすべてのハミルトニアンは strong ETH を満たすということ．

を満たす（ここで $\mathbb{E}[\dots]$ はランダム平均を表わす）．すると

$$\begin{cases} \mathbb{E}[\hat{O}_{nm}] = \dfrac{1}{D}\displaystyle\sum_i O_i \delta_{nm} = \langle \hat{O} \rangle_{\mathrm{eq}} \delta_{n,m}, \\ \mathbb{E}[\hat{O}_{nm}^2] - \mathbb{E}[\hat{O}_{nm}]^2 = \dfrac{1}{D} \langle \hat{O}^2 \rangle_{\mathrm{eq}} \end{cases} \tag{29}$$

が導かれる．ゆえに，平均 0，分散 1 の複素ランダム変数 $R_{nm} = R_{mn}^*$ を用いて

$$\hat{O}_{nm} = \langle \hat{O} \rangle_{\mathrm{eq}} \delta_{n,m} + \sqrt{\frac{\langle \hat{O}^2 \rangle_{\mathrm{eq}}}{D}} R_{nm} \tag{30}$$

と書ける[*8]．対角要素を見ると $\hat{O}_{nn} \approx \langle \hat{O} \rangle_{\mathrm{eq}}$ がすべての n で成り立つから，これは strong ETH に対応する．さらに，式 (30) によれば，すべての非対角成分は非常に小さい：$\hat{O}_{nm} \sim 1/\sqrt{D}$（$D = e^{O(N)}$ に注意）．これは**非対角 ETH** と呼ばれることもある．

非対角 ETH は，緩和が任意の初期状態で起こることを保証する．節 4 では，$\delta O^2 = \sum_{n \neq m} |c_n|^2 |c_m|^2 |\hat{O}_{nm}|^2$ に相加平均と相乗平均の関係を利用して不等式 (24) を導いた．そのかわりに，

$$\delta O^2 \leq \sum_{n \neq m} |c_n|^2 |c_m|^2 \max_{n \neq m} |\hat{O}_{nm}|^2 \leq \max_{n \neq m} |\hat{O}_{nm}|^2 \tag{31}$$

のように δO^2 を評価しよう．ここで非対角 ETH を使えば δO が任意の初期状態について小さいことが結論される．

非対角 ETH は任意の初期状態で緩和が起こることを保証し，strong ETH は任意の初期状態で長時間平均が熱平衡値に等しいことを保証するから，両方を合わせると任意の初期状態に対して熱平衡化が起こることが導かれたことになる．

Strong ETH が成り立たない例として，（準）局所保存量を持つ可積分系[*9]や多体局在 (many-body localization) を起こすランダム系が知られている．これらの系は strong ETH を破るだけでなく，一般に熱平衡化もしない．

最近，（準）局所保存量を持たないにもかかわらず strong ETH を破る並進対称な短距離相互作用モデルのひとつの一般的な構成法が提案された [23]．その方法で構成されたモデルの中には，strong ETH を破るにもかかわらず一般に熱平衡化するものも存在する [24]．つまり，strong ETH は熱平衡化の必要条件ではないのである．

[*8] ただし，式 (30) にはハミルトニアンが局所物理量であることが一切取り入れられていない．Srednicki [21] はその効果を取り入れ，式 (30) の修正版

$$\hat{O}_{nm} = \langle \hat{O} \rangle_{\mathrm{eq}} \delta_{n,m} + e^{-S(\bar{E}_{nm})/2} R_{nm} f_O(\bar{E}_{nm}, \omega_{nm})$$

を提案した．ここで $\bar{E}_{nm} = (E_n + E_m)/2$，$\omega_{nm} = E_n - E_m$，$S(E)$ はミクロカノニカル分布を用いて計算した熱力学エントロピー，$f_O(\bar{E}_{nm}, \omega_{nm})$ は大きい $|\omega_{nm}|$ について指数関数的に減衰するなめらかな関数である．

[*9] これまで，エネルギーが $E - \Delta E$ から E の幅の中のエネルギーシェルを考察してきたが，他のマクロな保存量についてもある幅を考えてシェルをさらに細かく分けると，その細かいシェルの中では strong ETH が成立することが相互作用のない可積分系について証明されている [22]．これは一般化 ETH と呼ばれ，それを使うと，可積分系は長時間後に一般化 Gibbs アンサンブルと呼ばれる状態に緩和することが証明される．

5.2 weak ETH

Strong ETH は熱平衡化が任意の初期状態で生じることを説明するが，これは一般に強すぎる要請のように見える．そこで，strong ETH の主張を弱めて

$$\text{ほとんどすべての } n \text{ について} \quad \hat{O}_{nn} \approx \langle \hat{O} \rangle_{\mathrm{eq}} \tag{32}$$

を要請してみよう．これは**弱い意味での ETH**（weak ETH）と呼ばれる．Strong ETH との違いは，少数であれば，熱平衡状態と局所的に等価ではないエネルギー固有状態の存在を許すところにある．

Weak ETH はほとんどすべての初期状態が熱平衡化することを説明する．しかも，weak ETH は並進対称性を持つ量子多体系についてかなり一般的に証明できる [25–27]．すると，weak ETH によって孤立量子系の熱平衡化が説明できたと考えたくなるかもしれない．しかし，weak ETH が一般的に証明できてしまうことは，むしろ weak ETH の問題点を示している．実は，weak ETH は可積分系でも成立する性質なのである．一方，熱平衡化は可積分系では起こらないことがわかっている．したがって weak ETH だけから熱平衡化が説明されたと考えるわけにはいかない．

ただし，weak ETH は熱平衡化を議論するにあたって無価値であるというわけではない．実際，weak ETH に基づいて，熱平衡化が生じるための初期状態についての具体的な条件を導くことができる．任意の有限温度の 1 次元系，あるいは十分高温の 2 次元以上の系では，式 (32) を満たさないエネルギー固有状態の数の割合が系のサイズ N について指数関数的に少ないことが証明される [26]．つまり，任意の ϵ についてある定数 $\gamma > 0$ が存在し，

$$\Big(|\hat{O}_{nn} - \langle \hat{O} \rangle_{\mathrm{eq}}| > \epsilon \text{ を満たすエネルギー固有状態 } |n\rangle \text{ の数} \Big) < e^{-\gamma N} D \tag{33}$$

が証明される．したがって，もしも初期状態を構成するエネルギー固有状態の数 D_{eff} が

$$D_{\mathrm{eff}} \gg e^{-\gamma N} D \tag{34}$$

を満たすなら，その初期状態は熱平衡状態と局所的に等価なエネルギー固有状態だけからほぼ構成されており，熱平衡化を起こす．

式 (34) の応用例として，孤立量子系の中の小部分だけが平衡から乱された後に再び熱平衡状態に戻るか (return to equilibrium) という問題を考えることができる．小部分を注目する量子系，残りの部分を熱浴と考えれば，熱浴と接した開放量子系が熱平衡状態に緩和するか，という問題だと考えてもよい．ふつう，開放量子系の議論では，熱浴も含めた全体を孤立系とみなし，熱浴の自由度を適切に消去して，さらにいくつかの近似 (Born 近似や Markov 近似など）を経てはじめて熱平衡状態への緩和が導出される [28]．しかし，もし熱浴も含めた系全体が weak ETH を満たすと仮定するなら，開放量子系の緩和を厳密に証明できる（文献 [29] の節 4.7.4 を見よ）．前述のとおり，weak ETH は可積分系でも成り立つ性質だったから，熱浴も含めた系全体が可積分系だったとしても開放量子系の緩和は保証されることになる．

6 さいごに

本稿では近年の孤立量子系の緩和ダイナミクスの研究を理解するのに必要な基礎的事項について説明した．より進んだ話題（可積分系での緩和の理論や prethermalization と呼ばれる現象など）やより厳密な議論に関心のある読者はレビュー論文 [29] を参照されたい．

参考文献

[1] E. Fermi, P. Pasta, S. Ulam, and M. Tsingou, Los Alamos Report No. LA-1940 (1955).

[2] R. Nandkishore and D. A. Huse, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **6**, 15 (2015).

[3] E. Ilievski, J. De Nardis, B. Wouters, J.-S. Caux, F. H. L. Essler, and T. Prosen, Phys. Rev. Lett. **115**, 157201 (2015).

[4] S. Sugiura and A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. **108**, 240401 (2012).

[5] M. Imada and M. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 3354 (1986).

[6] A. Hams and H. De Raedt, Phys. Rev. E **62**, 4365 (2000).

[7] S. Goldstein, J. L. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zanghì, Phys. Rev. Lett. **96**, 050403 (2006).

[8] S. Popescu, A. J. Short, and A. Winter, Nature Phys. **2**, 754 (2006).

[9] A. Sugita, RIMS Kokyuroku **1507**, 147 (2006).

[10] P. Reimann, Phys. Rev. Lett. **99**, 160404 (2007).

[11] A. M. Kaufman, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, R. Schittko, P. M. Preiss, and M. Greiner, Science **353**, 794 (2016).

[12] R. Islam, R. Ma, P. M. Preiss, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, and M. Greiner, Nature **528**, 77 (2015).

[13] G. G. Emch, J. Math. Phys. **7**, 1198 (1966).

[14] C. Radin, J. Math. Phys. **11**, 2945 (1970).

[15] P. Bocchieri and A. Loinger, Phys. Rev. **107**, 337 (1957).

[16] J. von Neumann, Z. Phys. **57**, 30 (1929).

[17] H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **80**, 1373 (1998).

[18] P. Reimann, Phys. Rev. Lett. **101**, 190403 (2008).

[19] H. Kim, T. N. Ikeda, and D. A. Huse, Phys. Rev. E **90**, 052105 (2014).

[20] W. Beugeling, R. Moessner, and M. Haque, Phys. Rev. E **89**, 042112 (2014).

[21] M. Srednicki, J. Phys. A **32**, 1163 (1999).

[22] T. Ishii and T. Mori, Phys. Rev. E **100**, 012139 (2019).

[23] N. Shiraishi and T. Mori, Phys. Rev. Lett. **119**, 030601 (2017).

[24] T. Mori and N. Shiraishi, Phys. Rev. E **96**, 022153 (2017).

[25] G. Biroli, C. Kollath, and A. M. Läuchli, Phys. Rev. Lett. **105**, 250401 (2010).

[26] T. Mori, arXiv:1609.09776 (2016).

[27] E. Iyoda, K. Kaneko, and T. Sagawa, Phys. Rev. Lett. **119**, 100601 (2017).

[28] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The theory of open quantum systems* (Oxford University Press on Demand, 2002).

[29] T. Mori, T. N. Ikeda, E. Kaminishi, and M. Ueda, J. Phys. B **51**, 112001 (2018).