孤立量子多体系におけるエルゴード性

沙川貴大（東京大学）

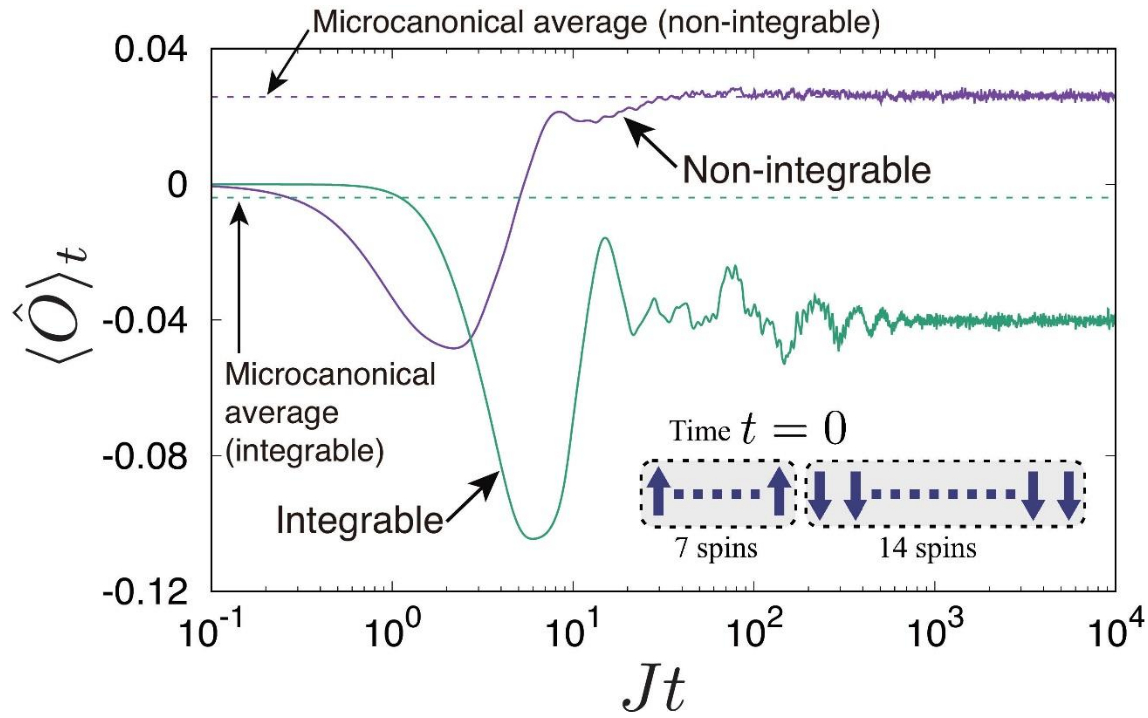
平衡統計力学の基本原理のひとつは等重率の原理であり，「マクロな物理量の熱平衡値は，そのミクロカノニカル平均と一致する」と述べることができる。この原理は無数の実験によって経験的に確かめられており，基本的な物理法則として確立している。しかしそこから一歩踏み込んで，ミクロな（量子）力学に基づいて，等重率の原理が「なぜ」正しいのかそのメカニズムを理解したい，という問いを立ててみよう。これは１９世紀にボルツマンが提起して以来，統計力学の基礎にかかわる重要な問いだと考えられてきた。

そのシナリオとして長年にわたって議論されてきたのが，エルゴード性である。大まかに言うと，エルゴード性とは「物理量の長時間平均が，ミクロカノニカル平均と一致する」という性質である。現在では，おおむね「等重率の原理が成り立つメカニズムは，エルゴード性である」という理解が広く受け入れられている。ただしこのシンプルな命題には様々な留保が必要であり，とくに古典系と量子系では状況が大きく異なる。そしてより深い理解を目指した現代的観点からの研究が，世界的に活発に行われるようになっている（標準的なレビューとして，たとえば文献[1]を参照）。

本稿で以下に紹介するのは，量子系，とくに外界から孤立した量子多体系におけるエルゴード性についての研究状況である。この設定を考える理由はいくつかある。第一に，世界は本当はすべて量子系であり，統計力学の基礎も量子力学に基づいて考えるのが自然であろうというフィロソフィーがある。第二に，冷却原子気体などの技術によって，実験的にも理想的な孤立量子多体系を実現できるようになってきたことが挙げられる。すなわちボルツマン以来の古い問いが，現代の量子技術によって実験物理の問題になってきている。

設定をもう少し詳しく述べよう。多体スピン系や多粒子系などの量子多体系を考える。着目するのは，物理量 $\hat{O}$の期待値$\langle \hat{O} \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle$の時間発展である。ここで$|\psi(t)\rangle$は時刻$t$における状態ベクトル（純粋状態）であり，シュレーディンガー方程式に従ってユニタリ時間発展をしている。ハミルトニアンは並進対称・局所相互作用として，物理量は局所物理量（たとえば磁化など）を考えるのが一般的である。

まずはこのような設定における物理量期待値の時間発展を，具体例で見てみよう。図１に数値厳密対角化の結果を示す。ハミルトニアンが非可積分・可積分の場合ともに，一定の緩和時間のあとに，定常値（長時間平均の値）に緩和している。その定常値は，非可積分の場合はミクロカノニカル平均と一致しているのに対して，可積分の場合は一致していない。このような振る舞いは，この例に限らず，様々な系における数値計算で観察されている（有名な論文として[3]がある）。



〈図 1〉孤立量子多体系のダイナミクス

可積分（integrable）系はスピン 1/2 の 1 次元 XXZ 模型であり，そこに次近接相互作用を入れたものが非可積分（non-integrable）系である。後者のみ長時間平均とミクロカノニカル平均（microcanonical average）が一致している。なお，物理量としてはホッピングを採用している。文献[2)]より転載。

このような観察をもとにして，問題を改めて定式化してみよう。理解したいことは，なぜ等重率の原理が成り立つか，その物理的なメカニズムである。これは二つの問題に分割することができる：

（1）物理量期待値は，どのように長時間平均に緩和するのか。

（2）その長時間平均の値は，なぜミクロカノニカル平均と一致するのか。

まず（1）について考える。ユニタリ時間発展する量子多体系においても，ある現実的な（系のサイズについて指数関数的に増大したりはしない）緩和時間のあと，長時間平均に緩和することが様々な数値計算や実験で確かめられている。それが（準安定状態などではなく）真の長時間平均であることは，量子系においては対角分布と呼ばれる密度行列と比較することで，数値的に精密に確かめることができる。理論的には，定常値への緩和自体は比較的一般的な初期条件のもとで示されるが，緩和が現実的な時間スケールで起こるかどうかは難しい問題で，個々の量子多体系について研究が進められている。なお，長時間平均に緩和していることは，そもそも平衡統計力学を適用するための設定の一部とも見做せることに注意しておく（ガラスのように緩和していない系には，平衡統計力学をそのまま適用するこ

とは出来ない)。また，多体系の再帰時間は非常に長く，再帰は事実上無視できるとして良い。

次に（2）について考えよう。これはまさにエルゴード性の問題である。その背後のメカニズムとして，注目を集めているのが固有状態熱化仮説（Eigenstate Thermalization Hypothesis, ETH）である。これは，すべてのエネルギー固有状態$|E_i\rangle$について，その期待値がミクロカノニカル平均と一致することを主張する：$\langle E_i|\hat{O}|E_i\rangle \simeq \langle \hat{O}\rangle_{\mathrm{MC}}$。大まかに言うと，「単一のエネルギー固有状態だけで，熱平衡状態を表すことができる」という主張である。ETH が成り立てばエルゴード性が成り立つことは簡単な計算で示すことが出来る。近年の研究により，（後述の例外を除いて）様々な非可積分系で ETH が成り立つことが数値的に検証されており，一方で可積分系では ETH が成り立たないことも分かっている。これは図 1 と整合的である。すなわちこのような設定では，非可積分系だけでエルゴード性が，したがって等重率の原理が成り立つのだ。

ETH は孤立量子系のダイナミクスを考えるうえで重要な性質である。たとえば最近筆者らは，ETH に基づいて，熱浴の初期状態がエネルギー固有状態であるような孤立量子多体系においても，熱力学第二法則や「ゆらぎの定理」と呼ばれる関係式が成り立つことを証明した[4),5)]。熱浴の状態として（ミクロカノニカル分布など）統計力学のアンサンブルを用いないため，これはいわば「量子力学から直接的に熱力学第二法則を導いた」研究であると言えるだろう。

最後に，いくつかの例外的な状況について述べておきたい。不純物がありハミルトニアンが並進対称でない場合は，しばしば多体局在（many-body localization）と呼ばれる局在現象が起こる。この場合は緩和時間が指数関数的に長くなり，ETH も成り立たない。また，並進対称な非可積分系においても，量子多体傷跡（quantum many-body scar）状態と呼ばれる，ETH を満たさない状態が現れうることが知られている。このような例外的な状況，すなわちエルゴード性が成り立たない状況は興味深く，量子多体系の物理のフロンティアとなっている。

参考文献

1) T. Mori *et al.*: J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **51**, 112001 (2018).
2) 金子和哉，伊與田英輝，沙川貴大: 日本物理学会誌 **73**, 361 (2018).
3) M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii: Nature **452**, 854 (2008).
4) E. Iyoda, K. Kaneko, and T. Sagawa: Phys. Rev. Lett. **119**, 100601 (2017).
5) E. Iyoda, K. Kaneko, and T. Sagawa: Phys. Rev. E **105**, 044106 (2022).

※本稿は、パリティ編集委員会（編）『物理科学,この 1 年 2022』（丸善出版、2022 年 2 月）に掲載されたものです。許可を得て転載しています。