

量子力学から熱力学第二法則へ



金子和哉

東京大学大学院工学系研究科
kaneko@noneq.c.u-tokyo.ac.jp



伊與田英輝

東京大学大学院工学系研究科
iyoda@ap.t.u-tokyo.ac.jp



沙川貴大

東京大学大学院工学系研究科
sagawa@ap.t.u-tokyo.ac.jp

ミクロな運動を記述するニュートンの運動方程式やシュレーディンガー方程式は、時間反転に関して対称である。一方、マクロな現象を記述する熱力学は、熱平衡状態への緩和や熱力学第二法則に代表される不可逆性をもつ。一見すると、可逆なミクロの力学と不可逆な熱力学は矛盾している。このミクロとマクロの整合性の問題は、19世紀にはボルツマンが議論し、20世紀初頭にはフォン・ノイマンが量子力学に基づき研究をしたが、解決には至らなかった難問である。

近年、冷却原子などの実験系で理想的な孤立量子系が実現されるようになり、不可逆性の起源をめぐる問題が再び注目を集めている。理論と実験の両面から、シュレーディンガー方程式に従った時間発展で、量子純粋状態でさえも、熱平衡状態へ緩和（熱平衡化）することが明らかになってきた。理論的にも、従来の統計力学を使わず、量子力学だけから熱平衡化を理解する試みがなされている。とくに、「量子多体系において、全てのエネルギー固有状態が熱平衡状態を表す」という固有状態熱化仮説（Eigenstate Thermalization Hypothesis, ETH）が、熱平衡化を説明する機構として有力視されている。ETHは、数値計算で多くの非可積分系において確認されているが、数学的な証明はない。一方で我々は、一般の並進対称な局所相互作用する量子多体系において、「(全てとは限らない)ほとんどのエネルギー固有状態が熱平衡状態を表す」という弱い形のETHを証明した。

また、以上とは異なる研究の流れの中で、

第二法則の基礎についても大きな進展があった。とくに重要なのは、「ゆらぎの定理」の発見である。ゆらぎの定理は、エントロピー生成のゆらぎを考慮することで、第二法則を不等式ではなく等式の形で表現したものだ。第二法則は、ゆらぎの定理から自然に導かれる。しかし、孤立量子系の熱平衡化の研究とは異なり、ゆらぎの定理は統計力学を基にしている。とくに熱浴の初期状態として、通常のカノニカル分布を仮定しているため、冷却原子などの緩和過程には適用できない。というのも、熱浴の初期状態は一般にカノニカル分布とは限らないからだ。

では、これら二つの研究の流れを統合し、熱浴の初期状態が量子純粋状態のときにも、第二法則とゆらぎの定理を示すことができるだろうか。我々はこの問題に取り組み、熱浴の初期状態がエネルギー固有状態の場合にも、第二法則とゆらぎの定理が短い時間の間では成り立つことを数学的に証明した。証明の鍵となるのは、ETHに加えて、量子多体系の相互作用の局所性である。相互作用が局所的な量子多体系では、情報の伝搬速度に上限が存在することが、リーブ・ロビンソン限界（Lieb-Robinson bound）として厳密に示されている。これを利用して、我々は熱浴がカノニカル分布ではないことの影響を厳密に評価した。

我々の結果は量子力学と熱力学第二法則を直接的に結び付けるシナリオを明らかにしたと言え、量子多体系の非平衡ダイナミクスより深い理解につながる事が期待される。

1. はじめに

マクロで不可逆な現象と、ミクロな世界を支配する可逆な物理法則は、どのようにつながっているのだろうか。この疑問を、統計力学ではなく量子力学を出発点にして考えるのが、本稿のテーマである孤立量子系の熱力学である。まず、本題に入る前に歴史的な経緯を紹介しよう。

ミクロとマクロをつなぐ問題を、最初に精力的に研究した人物が、ボルツマンである。ボルツマンは気体分子運動論に基づいて、古典力学から熱力学第二法則を基礎づけようとし、1872年に有名なH定理を証明した。しかし、彼の議論では、不可逆性を導入する近似が行われている。したがって、ボルツマンによりこの問題に決着がついたわけではなく、これがむしろ論争の発端となった。

この問題を量子力学から考察したのがフォン・ノイマンである。彼は弱冠25歳のときにこの問題に取り組み、現代的な理論に通ずる定理を発見して、1929年にドイツ語で論文を出版した¹⁾。彼のアプローチの特徴は、可逆なシュレーディンガー方程式を近似なしで用いて——すなわち孤立した量子系を考えて——熱平衡化を議論した点だ。しかし、この早すぎた論文の存在はいったん忘れ去られてしまい、21世紀に入ってから再発見された。

また1970年代には、ベリー位相で有名なベリーが量子カオスの立場から、ベリーの予想(Berry's conjecture)を提唱し²⁾、それをもとにスレドニキ(Srednicki)が熱平衡化の機構を議論した³⁾。現代の視点では、この議論は「エネルギー固有状態が熱平衡状態を表す」というエネルギー固有状態熱化仮説(Eigenstate Thermalization Hypothesis, ETH)に他ならない。

しかし、フォン・ノイマンやベリーの研究が行われた時代、孤立した量子多体系の熱力学は、実験的に検証することがきわめて困難であった。この古くからの問題が今になって再び注目を集めるようになった一因は、孤立量子多体系が実験的に実現可能になったことだ。その一つの例が、極低温に冷却された原子集団をレーザーで真空中にトラップした冷却原子である。冷却原子を使った実験で、可逆なシュレーディンガー方程式に従う系も、実際に熱平衡化することが観測されている⁴⁾。

他にも熱平衡化の理論に関する研究がいくつか行われていたが^{5), 6)}、熱平衡化の機構の理解が大きく進展したのはこの10年である。とくにリゴル(M. Rigol)らによる研究⁷⁾が契機となり、ETHが現代的な観点から大きな注目を集めている⁸⁾。

このような背景のもと、本稿では、近年の孤立量子系における熱平衡化の理論を簡単にレビューし、我々の研究成果である量子純粋状態の第二法則とゆらぎの定理⁹⁾を紹介する。まず第2節では、熱平衡状態の典型性(typicality)

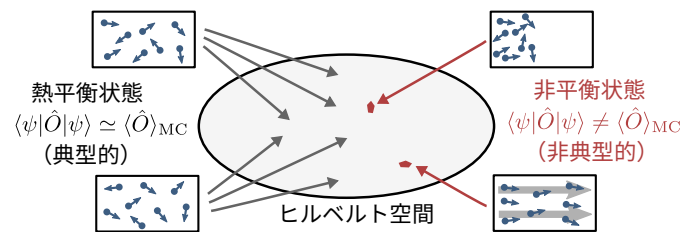


図1 熱平衡状態の典型性の概念図。楕円で囲まれた領域がエネルギーシエルから定まるヒルベルト空間を表している。その中の大部分を覆っている灰色の領域が熱平衡状態に対応し、赤色のごくわずかな領域が非平衡状態に対応する。非平衡状態に対応する純粋状態の割合は、熱力学極限でゼロに近づく。

と呼ばれる性質を議論する。そして第3節で、孤立量子系の熱平衡化を理解するうえで重要となる2つの概念、対角分布への緩和とETHを解説する。第4節ではいったん話題を変え、熱平衡化の研究とは異なる流れで発見されたゆらぎの定理(fluctuation theorem)に焦点を当てる。第5節で、ETHとゆらぎの定理を統合した我々の研究を紹介する。最後に第6節でまとめを述べる。

2. 熱平衡状態の典型性

孤立した量子系の緩和ダイナミクスを議論する前に、熱平衡状態とはそもそも何であるかを考えよう。標準的な統計力学の基本原則の一つは、等重率の原理である。等重率の原理によれば、熱平衡状態は(エネルギー E 、幅 ΔE)のエネルギーシエル内の状態を、等確率で混合したマイクロカノニカル分布で記述される。

等重率の原理は、典型性の観点から以下のように言い換えることができる。典型性とは、単一の状態ベクトルで記述される量子純粋状態のうち、大多数が熱平衡状態を表すという性質である(図1)。具体的には、エネルギーシエルのヒルベルト空間から、純粋状態 $|\psi\rangle$ を一様ランダムに選ぶことを考える($|\psi\rangle$ はエネルギー固有状態とは限らない)。このとき、物理量 \hat{O} に対して、1に近い確率で、 $|\psi\rangle$ における期待値 $\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$ とマイクロカノニカル平均 $\langle \hat{O} \rangle_{MC}$ が一致することが証明できる^{10, 11, 12)}。つまり \hat{O} の期待値を見る限り、ほとんどの(典型的な)純粋状態はマイクロカノニカル分布と区別不可能ということだ。したがって、等重率の原理は「ヒルベルト空間から一様ランダムに選んだ状態のほとんどが、熱平衡状態を記述する」と言い換えられる。なお、典型性を利用した量子多体系の熱平衡状態の数値計算手法も考案されている¹³⁾。

では典型性に基づいて、熱平衡化のダイナミクスは理解できるだろうか。素朴に考えると、少数の例外的な非平衡状態から出発すれば、系はほどなく典型的な熱平衡状態に至るようにも思える。しかしよく考えると、決定論的なシュレーディンガー方程式に従う時間発展で、一様ランダムな状態が

生成される理由はない¹。実際、1次元XY模型やXXZ模型のような量子可積分系¹⁵⁾や、アンダーソン局在 (Anderson localization) や多体局在 (many-body localization, MBL) といった局在系¹⁶⁾では、系は熱平衡化しないことが知られている。一方で典型性の議論は、ハミルトニアン of 具体的な形には何も仮定をしていないため、可積分系や局在系にも当てはまってしまい、熱平衡化する系としない系の違いを説明できない。熱平衡状態の典型性だけでは、孤立量子系の熱平衡化の機構は理解できないのだ。

3. 孤立量子系の熱平衡化

次に、孤立量子系の熱平衡化のダイナミクスを考えることで、熱平衡化の機構を議論しよう。

3.1. 対角分布への緩和

まずは定常状態への緩和 (equilibration) について考える。緩和とは、十分時間が経過したときに物理量の期待値が (小さなゆらぎを除いて) 時間発展しなくなることである。とくに、緩和後の定常値が熱平衡値に一致する場合は熱平衡化 (thermalization) だ。本小節では緩和の機構を考え、3.2節以下で熱平衡化の機構を考える。

シュレーディンガー方程式に従う時間発展では、物理量の期待値は初期値に近い値にいつかは戻ってきってしまう。これはポアンカレの再帰定理の量子力学版である。しかしこの再帰にかかる時間は、非可積分なマクロ量子系の場合、宇宙年齢に比べて遥かに長い。つまり、我々が観測をしている時間スケールでは再帰は起こらないといえる。そして、物理量の期待値だけに着目した場合、再帰が起こるまでの間であれば定常値に緩和しうる¹⁷⁾。この定常値は、長時間平均に他ならない。以下では、この緩和について詳しく議論しよう。

量子系のハミルトニアンを \hat{H} とする。簡単のため固有エネルギー E_j ($j = 1, 2, \dots, D$) に縮退はないと仮定し、対応する固有状態を $|E_j\rangle$ とする。初期状態を $|\psi_0\rangle = \sum_{j=1}^D c_j |E_j\rangle$ としたとき、時刻 t の状態は $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi_0\rangle$ 、密度演算子で書けば $\hat{\rho}(t) := |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$ である。 $\hat{\rho}(t)$ の長時間平均は、以下で与えられる対角分布 (diagonal ensemble) である：

$$\hat{\rho}_{\text{DE}} := \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \hat{\rho}(t) dt = \sum_{j=1}^D |c_j|^2 |E_j\rangle \langle E_j|. \quad (1)$$

ここで最右辺は $|E_j\rangle$ について対角的だ。これが $\hat{\rho}_{\text{DE}}$ が対角分布と呼ばれている理由である。なお統計力学に登場するアンサンブルは、対角分布の特別な場合に相当する。 $|c_j|^2$ がエネルギーシェル内で一樣な場合がマイクロカノニカル分

¹ 量子コンピュータを用いても、一樣ランダムな状態を生成するには、キュービット数について少なくとも指数関数程度の長時間が必要である¹⁴⁾。

布であり、 $|c_j|^2 = e^{-E_j/k_B T}/Z$ の場合がカノニカル分布である (k_B はボルツマン定数、 T は温度、 Z は分配関数)。

次に、対角分布への緩和を主張する定理を述べよう。物理量 \hat{O} の時刻 t での期待値を $\langle \hat{O} \rangle_t := \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle$ とすると、その長時間平均は

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \langle \hat{O} \rangle_t dt = \sum_{j=1}^D |c_j|^2 \langle E_j | \hat{O} | E_j \rangle \quad (2)$$

で与えられる。これは対角分布での \hat{O} の期待値 $\langle \hat{O} \rangle_{\text{DE}} := \text{Tr}[\hat{O} \rho_{\text{DE}}]$ に他ならない。この長時間平均のまわりの、 $\langle \hat{O} \rangle_t$ の時間ゆらぎについて考える。時間ゆらぎが小さければ、 $\langle \hat{O} \rangle_t$ は定常値に緩和しているといえる。このとき、以下の不等式が成立する¹⁷⁾：

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau |\langle \hat{O} \rangle_t - \langle \hat{O} \rangle_{\text{DE}}|^2 dt \leq \frac{\|\hat{O}\|^2}{D_{\text{eff}}}. \quad (3)$$

ここで左辺が単位時間あたりの時間ゆらぎを表している。右辺の $\|\hat{O}\|^2$ は演算子ノルムであり、演算子 \hat{O} の最大特異値を表している。 D_{eff} は有効次元と呼ばれる量であり、

$$D_{\text{eff}} := \frac{1}{\sum_{j=1}^D |c_j|^4} \quad (4)$$

と定義される。有効次元は、初期状態が実質的にどれだけの数のエネルギー固有状態の重ね合わせになっているか表し、 $1 \leq D_{\text{eff}} \leq D$ が成り立つ。 $D_{\text{eff}} = D$ が成り立つのは、 $|\psi_0\rangle$ がエネルギー固有状態の一樣な重ね合わせのときだ。一方、初期状態が単一のエネルギー固有状態であれば、 $D_{\text{eff}} = 1$ である。したがって (3) 式は、初期状態が十分多くのエネルギー固有状態の重ね合わせになっていれば、物理量の期待値の時間ゆらぎは小さい、すなわち定常値へ緩和することを意味している²⁾。

量子多体系の非平衡ダイナミクスの研究で頻りに用いられる設定は、あるハミルトニアン of 基底状態を用意し、磁場などの外部パラメータを急激に変化 (クエンチ) させ、物理量の期待値の時間発展を調べるといものである。このとき初期状態の D_{eff} が十分大きければ、不等式 (3) により緩和が起こることがわかる。しかし一般に $\langle \hat{O} \rangle_{\text{DE}}$ は熱平衡値と一致するとは限らない (すなわち、長時間平均とマイクロカノニカル平均が一致する保証はない) ことに注意しよう。

図2は、非可積分および可積分な1次元スピン模型における、クエンチ後のダイナミクスの数値計算結果である。非可積分、可積分どちらの場合でも、長時間領域でほぼ定常値に緩和している。非可積分系では緩和後の値がマイクロカノニカル平均に近いのに対して、可積分系ではマイクロカノニカル平均からずれている。このような可積分系と非可積分系の振る舞いの違いを説明するのが、冒頭で述べた ETH である。

²ただしこの議論からは、緩和時間の長さについては何も言えない。

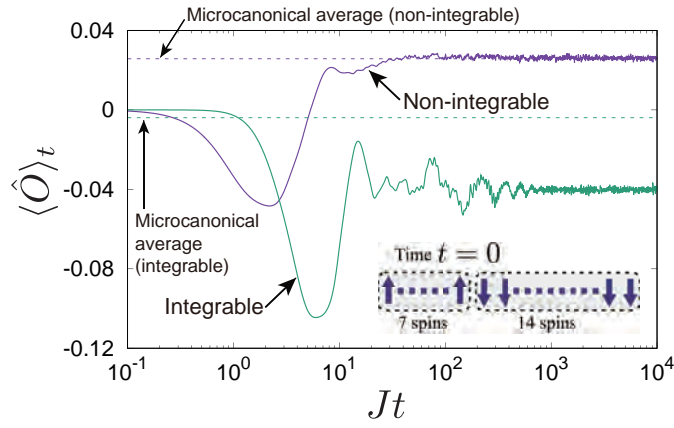


図2 可積分系と非可積分系における物理量期待値の時間発展。数値厳密対角化によるシミュレーション結果を示している。模型は、ハミルトニアンが $\hat{H} = \sum_{i=1}^L \{J(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + \Delta \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z) + J'(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+2}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+2}^y + \Delta' \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+2}^z)\}$ で与えられる(次近接相互作用を加えた)スピン $1/2$ の1次元XXZ模型である。ここで \hat{S}_i^α ($\alpha = x, y, z$) は、サイト i 上のスピン $1/2$ の演算子を表す。物理量は3サイトだけ離れたホッピング $\hat{O} = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+3}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+3}^+)$ である。 $L = 21$ であり、初期状態は左から7番目までのスピンの上を向いた状態 $|\uparrow^{\otimes 7} \downarrow^{\otimes 14}\rangle$ である。相互作用のパラメータは、可積分の場合 $J = 1, \Delta = 0.5, J' = \Delta' = 0$ 、非可積分の場合 $J = 1, \Delta = 0.5, J' = 0.8, \Delta' = 1$ である。直線は、それぞれの場合における物理量のミクロカノニカル平均を表す。非可積分系と可積分系のどちらの場合も、物理量の期待値はほぼ定常値に緩和する。非可積分系では定常値がミクロカノニカル平均に一致するのに対して、可積分系では一致しない。

3.2. 固有状態熱化仮説 (ETH)

では、非可積分系で長時間平均が熱平衡値と一致するのはなぜだろうか。この機構として有力な仮説がETHだ^{3, 5, 7}。ETHは、「全てのエネルギー固有状態について、物理量の期待値が、同じエネルギーのミクロカノニカル平均に一致する」という仮説である。式で書くと、

$$\langle E_j | \hat{O} | E_j \rangle \simeq \langle \hat{O} \rangle_{MC} \quad (5)$$

が全てのエネルギー固有状態で成立するというのがETHである。ここで式(5)の右辺はエネルギー E_j 付近でのミクロカノニカル平均を表す。このETHは後で紹介する弱いETH (weak ETH) と区別するために、強いETH (strong ETH) とも呼ばれる。

さて、物理量の長時間平均は(2)式で与えられるのであった。これはエネルギー固有状態での物理量期待値を $|c_j|^2$ の重みで混合したものに他ならない。したがって強いETH(5)を仮定すれば、

$$\langle \hat{O} \rangle_{DE} \simeq \langle \hat{O} \rangle_{MC} \quad (6)$$

が成り立つ。すなわち長時間平均とミクロカノニカル平均が一致する。このように強いETHは、孤立量子系が熱平衡化するための十分条件である³。

³この意味で、強いETHはエルゴード仮説の量子版と見なすことができる。ただし古典系のエルゴード仮説を統計力学の基礎と考えることには(測度の選択などに関する)微妙な問題があることが知られている。一方、その量子版である強いETHは、本稿で議論したように統計力学の基礎として重要であると考えられる。

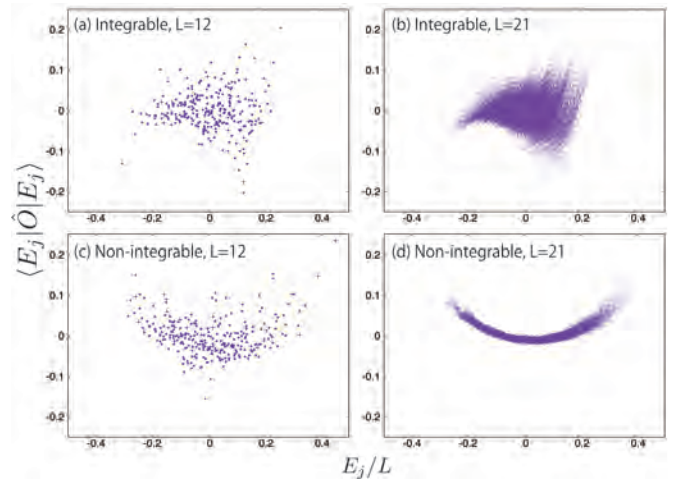


図3 各エネルギー固有状態での物理量の期待値。図2と同じハミルトニアンと物理量で計算を行った。(a)と(b)が可積分系、(c)と(d)が非可積分系の場合。系のサイズは(a)と(c)が $L = 12$ 、(b)と(d)が $L = 21$ である。

強いETHを数学的に証明するのは困難である。しかし、数値計算により多くの非可積分系で強いETHの成立が確認され、非可積分系における熱平衡化の機構として有力視されている⁸。ただし強いETHは、粒子数などの局所的な保存量のセクターごとにしか成立しないことに注意が必要である⁴。一方、可積分系および局在系では、局所的な保存量が系のサイズと同じ数だけあるため、強いETHは成り立たない。

図3は、図2と同じ系で、エネルギー固有状態ごとに物理量の期待値を数値厳密対角化により計算した結果である。数値計算が可能なサイズの有限系では、有限サイズ効果により、 $\langle E_j | \hat{O} | E_j \rangle$ と $\langle \hat{O} \rangle_{MC}$ は異なる値をとる。これは図3の縦方向の広がりに対応する。強いETHが成立する系では、この広がりの幅は、サイズを大きくしていくとともに減少し、熱力学極限では $\langle E_j | \hat{O} | E_j \rangle$ が一本の滑らかな曲線を描くと期待される。一方で、強いETHが成立しない可積分系では、サイズを大きくしても広がりには消えず、 $\langle \hat{O} \rangle_{MC}$ と異なる期待値をもつエネルギー固有状態が存在し続ける。以上のことは、より精密かつ系統的な数値計算でも確認されている^{18, 19, 20}。

3.3. 弱いETH

次に、ピロリ(G. Biroli)ら²²)により提案された弱いETHを紹介する。「ほとんど全てのエネルギー固有状態について、物理量の期待値が、同じエネルギーのミクロカノニカル平均に一致する」というのが、弱いETHの主張である。強いETHとは異なり、弱いETHでは非熱的なエネルギー固有状態の存在は否定されない。しかし、非熱的なエネルギー固有状態の数は、熱的なエネルギー固有状態の数に比べる

⁴非局所的で非自明な保存量を考慮しなければ、強いETHが成り立たない非可積分系も知られている²¹。

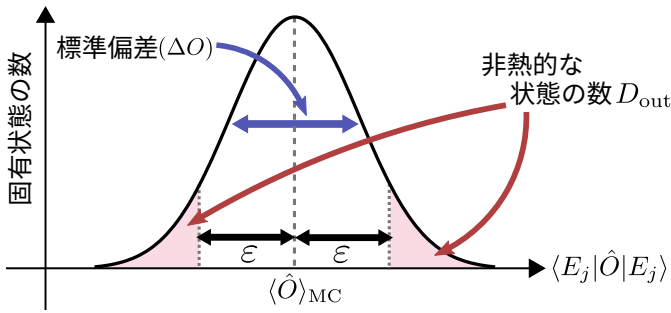


図4 $\langle E_j | \hat{O} | E_j \rangle$ の分布と、その標準偏差 (ΔO) と大偏差 D_{out} の概念図。 D_{out} は平均値 $\langle \hat{O} \rangle_{MC}$ から ϵ 以上離れたエネルギー固有状態の数を表す。

と圧倒的に少なく、その割合は熱力学極限でゼロになることを弱い ETH は主張している。また、弱い ETH は可積分系でも成り立つ。なお、元々のピロリらの論文で弱い ETH は厳密には証明されていなかった。一方で我々は、一般の量子多体系において、以下の形の弱い ETH を厳密に証明した^{9) 5)}。

物理量の期待値 $\langle E_j | \hat{O} | E_j \rangle$ は、エネルギーシェルの中で、図4のような分布関数を描く。この分布の広がりの特徴づける量として、 $\langle E_j | \hat{O} | E_j \rangle$ の分散

$$(\Delta O)^2 := \frac{1}{D_{shell}} \sum_{E - \Delta E \leq E_j \leq E} \left(\langle E_j | \hat{O} | E_j \rangle - \langle \hat{O} \rangle_{MC} \right)^2 \quad (7)$$

を考える (図4を参照)。 D_{shell} はエネルギーシェルに含まれているエネルギー固有状態の数である。

ここで、以下の4つの条件を仮定する (他にもいくつかの技術的仮定が必要である)。

- ハミルトニアンは $d (\geq 1)$ 次元の格子上で定義されており、並進対称である。
- 相互作用が局所的である。すなわち、ハミルトニアンが局所的な演算子の和で表される。
- 対応するカノニカル分布の相関関数が指数減衰する (これは系が臨界点直上にはないことに対応している)。
- 物理量 \hat{O} が、系のサイズ N に対して、 N^α ($0 \leq \alpha < 1/2$) の大きさの領域で定義された準局所物理量である ($\alpha = 0$ の場合が局所物理量である)。

これらの仮定のもとで我々が証明したのは、熱力学極限において、 $(\Delta O)^2$ がゼロに収束するということである。すなわち、マクロな系では図4の分布関数の広がりは無視できるくらい小さく、 $\langle E_j | \hat{O} | E_j \rangle$ のほとんど全ては $\langle \hat{O} \rangle_{MC}$ に近い値となる。これは弱い ETH に他ならない。ただしこの議論からは、分布関数の裾野 (図4でピンク色の部分) が

⁵⁾ その際、一般化されたアンサンブルの等価性に関する厳密な結果²³⁾ が重要な役割を果たした。

表1 非可積分系, 可積分系, 局在系における熱平衡化と ETH のまとめ。
熱平衡化 強い ETH 弱い ETH

	熱平衡化	強い ETH	弱い ETH
非可積分系	○	○	○
可積分系	×	×	○
局在系	×	×	×

完全に消えることは結論できず、したがって強い ETH の成否については何も言えない。

また、非熱的なエネルギー固有状態の数を直接的に評価することで、以下のような形の弱い ETH も証明されている^{24, 25)}。物理量の期待値が $\langle \hat{O} \rangle_{MC}$ から ϵ 以上離れた、つまり $|\langle E_j | \hat{O} | E_j \rangle - \langle \hat{O} \rangle_{MC}| \geq \epsilon$ を満たすエネルギー固有状態の数を D_{out} とする (図4を参照)。上記の4つの条件に加え、さらに \hat{O} が N に依存しない局所物理量 (つまり $\alpha = 0$) の場合に、

$$\frac{D_{out}}{D_{shell}} \leq e^{-\gamma N} \quad (8)$$

が成り立つ。ここで γ は ϵ^2 のオーダーの正の定数である。すなわち、エネルギーシェル内の非熱的なエネルギー固有状態の割合は、 N に関して指数関数以上の速度で減少する。(8)式は、量子多体系の大偏差原理 (証明は難解である)^{26, 27)} に基づいて証明できる^{24, 25)}。

(8)式は不等式なので、等号が成立するかどうかは一般論からは分からない。最近の数値計算²⁰⁾によると、可積分系では等号が成立し、 D_{out}/D_{shell} は指数関数的に減少する。ここで D_{shell} は N に関して指数関数的に増加する⁶⁾。したがって可積分系の場合は、 D_{out} 自身も指数関数的に増大する。一方で非可積分系では、 D_{out}/D_{shell} は指数関数よりも速く減衰²⁰⁾、ある有限の N で D_{out} は厳密にゼロになると考えられる⁷⁾。これは非熱的な固有状態が全く存在しなくなることに対応し、強い ETH に他ならない。

3.4. 熱平衡化のまとめ

熱平衡化と ETH の成否をまとめたのが、表1である。強い ETH は非可積分系だけで成立する。前述のように弱い ETH は可積分系でも成立する。しかし局在系では並進対称の仮定が満たされておらず、弱い ETH も成立しない⁸⁾。

また、熱平衡化が起きる (物理量の定常値がミクロカノニカル平均と一致する) のも、非可積分系だけである。これは強い ETH が熱平衡化の十分条件であるだけでなく、実際にその機構であることを示唆している。一方で、弱い ETH だけが成り立つ可積分系は熱平衡化しない。その理由は、

⁶⁾ s をエントロピー密度として、 $D_{shell} = e^{sN}$ が成り立つ。これはボルツマンの公式に他ならない。

⁷⁾ ただしこれを明確に見るためには、 D_{out} の定義に技術的な修正が必要である²⁰⁾。

⁸⁾ ただし、2次元以上の多体局在についてはよく分かっていない²⁸⁾。

多数の局所保存量の存在に起因して、クエンチ後の非熱的なエネルギー固有状態に、指数関数的に大きな重みがかかってしまうことである⁹。このことから、弱い ETH だけでは熱平衡化の機構として不十分であり、強い ETH の成否が熱平衡化を左右することがわかる。

4. 第二法則とゆらぎの定理

ここで少し話題を変えて、第二法則とゆらぎの定理について議論しよう。ゆらぎの定理が発見されたのは、孤立量子系の熱平衡化の研究が盛んになるよりも前、1990年代である。ゆらぎの定理は、エントロピー生成が負になる稀な事象の確率が満たす普遍的な関係式を明らかにしたもので、そこから第二法則を導くことができる。また、揺動散逸定理のような線形応答の関係式を、非平衡非線形領域にまで拡張した関係式も導くことができる。すなわちゆらぎの定理は、それまで知られていた第二法則や非平衡統計力学の関係式を統一した理論と見ることができる。

ゆらぎの定理は、散逸力学系において初めて発見され、その後、古典確率過程、ハミルトニアン力学系、そして量子系においても示された^{30, 31, 32}。実験的にも多彩な系で検証されており、量子系では NMR やイオントラップなどで実験が行われている³³。

以下では、本稿の主題である量子系のゆらぎの定理^{34, 35}について解説する。対象とするのは、熱力学系（システム）が温度 T の熱浴と接触した系である。システムと熱浴を合わせた全体系が、時刻 $t = 0$ から τ までユニタリ時間発展をする。システムと熱浴は相互作用によって、熱を交換しながら状態を変化させていく。そのため、システムだけに着目した場合、時間発展はユニタリにならない。システムが初期時刻に純粋状態であったとしても、後の時刻で一般には混合状態になってしまう。これは、システムと熱浴の間に生じたエンタングルメントに起因する。

ゆらぎの定理を考える上で重要な概念は、以下のように定義されるエントロピー生成 (entropy production) である：

$$\Sigma := \Delta S - \frac{Q}{k_B T}. \quad (9)$$

右辺第 1 項の $\Delta S := S(\tau) - S(0)$ は、システムのフォンノイマン・エントロピー $S(t) := -\text{Tr}[\hat{\rho}_S(t) \log \hat{\rho}_S(t)]$ の時間変化である ($\hat{\rho}_S(t)$ は時刻 t におけるシステムの状態)。一方、右辺第二項の Q は、熱浴からシステムに放出された熱量である。 $-Q/k_B T$ は熱浴のエントロピー変化と解釈されるため、 Σ はシステムと熱浴を合わせた全系のエントロピー増加と解釈される。後で詳しく述べるように、 Σ が必ず非負になるというのが第二法則に他ならない。

⁹ XY 模型の緩和後の状態は、局所保存量によって構成される一般化ギブス分布 (generalized Gibbs ensemble, GGE) で記述されることが知られている¹⁵。ただし XXZ 模型の場合は、準局所的な保存量も考慮した準局所一般化ギブス分布 (quasi-local GGE) を考える必要がある²⁹。

次にゆらぎの定理を定式化するために、確率的エントロピー生成 (stochastic entropy production) という概念を導入する。時刻 t におけるシステムの密度演算子が、 $\hat{\rho}_S(t) = \sum_j p_j(t) |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)|$ と対角化されているとしよう。この状態に対して、基底 $\{|\psi_j(t)\rangle\}$ での射影測定を行う。このとき、結果 j が得られる確率 $p_j(t)$ の対数が、システムの確率的エントロピーである、すなわち $s[j, t] := -\log p_j(t)$ 。このアンサンブル平均は、 $\langle s[j, t] \rangle := \sum_j p_j(t) \{-\log p_j(t)\} = S(t)$ となり、システムのフォンノイマン・エントロピーに一致する。ゆらぎの定理においては、上述の測定を初期時刻 $t = 0$ と終時刻 τ に行い、状態 $|\psi_j(0)\rangle$ から状態 $|\psi_k(\tau)\rangle$ への遷移に伴う確率的エントロピーの変化を $\Delta s := s[k, \tau] - s[j, 0]$ とする。同様に、熱浴に対して初期時刻と終時刻にエネルギーの射影測定を行い、測定結果の差を $-q$ とおく。 q のアンサンブル平均が Q に他ならない。以上の定義のもと、確率的エントロピー生成を、

$$\sigma := \Delta s - \frac{q}{k_B T} \quad (10)$$

と定義する。 σ のアンサンブル平均がエントロピー生成である、すなわち $\langle \sigma \rangle = \Sigma$ 。なお σ は小さな確率で負になる。

さて、熱浴の初期状態が温度 T のカノニカル分布と仮定する。このとき、積分型ゆらぎの定理 (integral fluctuation theorem) と呼ばれる関係式、

$$\langle e^{-\sigma} \rangle = 1 \quad (11)$$

が成立する。 $\langle e^{-\sigma} \rangle$ は、確率的エントロピー生成を指数関数の肩にのせてから、アンサンブル平均をとった量を表す。この等式は、システムの状態が熱平衡から遠く離れている場合でも常に成り立つ。なお、(11) 式はしばしばジャルジンスキー等式 (Jarzynski equality) とも呼ばれる。

ゆらぎの定理 (11) から、第二法則を導くことができる。指数関数は下に凸な関数なので、イェンセンの不等式より、 $\langle e^{-\sigma} \rangle \geq e^{-\langle \sigma \rangle}$ が成立する。この不等式と (11) 式を組み合わせると、

$$\Sigma \geq 0 \quad (12)$$

が導かれる。すなわち、エントロピー生成は平均すると必ず非負であり、これが第二法則に他ならない。

実際、(12) 式を書き換えると、 $\Delta S \geq Q/k_B T$ となり、熱力学でよく知られたクラウジウス不等式と同じ形になる。ただし、 ΔS はボルツマン・エントロピーの変化ではなく、フォンノイマン・エントロピーの変化である¹⁰。後者は情報理論的なエントロピーなので、ここから情報と熱力学には深い関係があることが示唆される³⁶。実際、情報を消去すると

¹⁰前者は熱平衡状態でしか定義できないのに対して、後者は非平衡状態でも定義でき、カノニカル分布では両者は一致する。

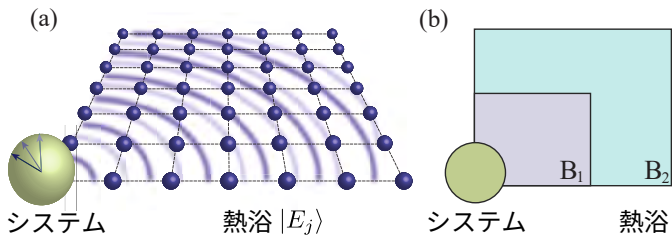


図5 我々の設定の模式図. (a) 全系はシステムと熱浴からなり、熱浴は並進対称な格子系である。システムの初期状態は任意で、熱浴の初期状態はエネルギー固有状態 $|E_j\rangle$ である。格子に描かれた波模様は、情報が伝搬する様子を表す。(b) (13) 式と (14) 式の証明における熱浴の分割方法。

熱が発生するというランダウア原理 (Landauer's principle) は、(12) 式の特別な場合である。

このように、ゆらぎの定理 (11) は第二法則を含んでいる。ゆらぎの定理が意味することは、確率的エントロピー生成の高次のゆらぎを全て足し合わせると¹¹、第二法則は実は (不等式ではなく) 等式で表せたということだ。なお、(11) 式よりも詳細な情報を含んだ関係式として、詳細ゆらぎの定理 (detailed fluctuation theorem) も知られている^{30, 31)}。

さて、(11) 式において本質的な仮定は、熱浴の初期状態がカノニカル分布であることだ。カノニカル分布は、エネルギーを固定したときに、フォンノイマン・エントロピーが最大になる特殊な分布である。この初期状態の特殊性が、ゆらぎの定理と第二法則の証明で重要な役割を果たしている。

しかし第2節および第3節で述べたように、熱平衡状態を表す量子状態はカノニカル分布だけではない。では、熱浴の初期状態が量子純粋状態、とくにエネルギー固有状態のときにも、第二法則は成立するのだろうか。これが次節で考える問題である。

5. 量子純粋状態における第二法則とゆらぎの定理

これまでの内容をふまえて、我々の結果⁹⁾である量子純粋状態における第二法則とゆらぎの定理について議論する。とくに、熱浴の初期状態がカノニカル分布ではなく単一のエネルギー固有状態の場合にも、短い時間の間ならこれらが成立することを示す。

5.1. 我々の定理

基本的な設定は、第4節で解説した量子系のゆらぎの定理の場合と同じである。ただし、熱浴は並進対称な格子上の系であり、前述の弱い ETH の証明に必要な仮定が全て満たされているとする。さらに熱浴の初期状態はエネルギー固有状態 $|E_j\rangle$ とする (図5を参照)。

この設定のもとで我々は、(12) 式の右辺に微小な負の誤差項が加わった不等式、すなわち近似的な第二法則が成立

¹¹ (11) の左辺の指数関数をべき展開すると、 σ の高次のゆらぎの項が現れる。

することを厳密に証明した。正確な定理の主張は、「任意の誤差 $\varepsilon_{2nd} > 0$ と任意の時刻 $t \geq 0$ に対して、十分大きな熱浴をとれば、終時刻 t までのエントロピー生成について、

$$\Sigma \geq -\varepsilon_{2nd} \quad (13)$$

が、ほとんど全ての $|E_j\rangle$ に対して成立する」というものである。ここで、ほとんど全ての $|E_j\rangle$ とは、熱浴についての弱い ETH により存在が保証されている、熱的なエネルギー固有状態を指す。さらに、もし強い ETH も成立するならば、全ての $|E_j\rangle$ に対して (13) 式が成立する。

さらに我々は、同じ設定において、ゆらぎの定理が近似的に成り立つことを証明した。すなわち、任意の $\varepsilon_{FT} > 0$ と $t \geq 0$ に対して、十分大きな熱浴をとれば

$$|\langle e^{-\sigma} \rangle - 1| \leq \varepsilon_{FT} \quad (14)$$

がほとんど全ての $|E_j\rangle$ について成り立つ¹²。なお、熱浴のサイズを固定すれば (14) 式はある時間の範囲内だけで成立する。我々の結果は、ゆらぎの定理という熱ゆらぎの基本的な性質が、量子力学だけから創発することを意味している。

以上の結果は、統計力学的なアンサンブルを仮定せず、単一のエネルギー固有状態から出発しても、第二法則とゆらぎの定理が成立することを示している。この結果は、統計力学を経由せずに、直接的に量子力学と第二法則を結びつけているといえるだろう¹³。

5.2. リーブ・ロビンソン限界

さて、(13) 式と (14) 式の証明を議論する前に、証明の鍵となるリーブ・ロビンソン限界 (Lieb-Robinson bound, LR 限界)^{39, 40)} を解説しよう。LR 限界は、格子上的量子多体系を伝わる情報の伝播速度の上限を表す不等式であり、相互作用が局所的な場合に成立する。

格子上的2つの領域 X, Y を考え、その間の距離を $d(X, Y)$ とする。領域 X, Y 上で定義された物理量 \hat{O}_X, \hat{O}_Y に対する LR 限界は、

$$\|[\hat{O}_X(t), \hat{O}_Y]\| \leq C e^{-\mu[d(X, Y) - v_{LR}t]} \quad (15)$$

と表される。 $\hat{O}_X(t)$ はハイゼンベルク表示の時間発展を表しており、左辺は領域 X の情報が時刻 t にどれだけ領域 Y に影響を与えるかを表している。また、右辺に現れる C はハミルトニアンには依存しない正の定数である。一方、 μ と

¹²ただし、ゆらぎの定理については追加の仮定 $[\hat{H}_S + \hat{H}_B, \hat{H}_I] = 0$ が必要である。ここで $\hat{H}_S, \hat{H}_B, \hat{H}_I$ はそれぞれシステム、熱浴、両者の間の相互作用のハミルトニアンである。

¹³なお別のアプローチによっても、カノニカル分布を仮定せずにある種の熱力学第二法則が導かれている^{37, 38)}。このアプローチでは、ユニタリ発展を開始する時刻をランダムにとる (random waiting time と呼ばれる)。しかしこのアプローチでは、導かれる第二法則はフォンノイマン・エントロピーを含んだ (12) 式ではなく、またゆらぎの定理を導くこともできない。

v_{LR} はハミルトニアンから定まる正の定数である。 v_{LR} はリープ・ロビンソン速度 (LR 速度) と呼ばれる, 情報の伝播速度の上限を表す量で, 大まかには音速に対応する. 実際, $d(X, Y) > v_{LR}t$ のとき, (15) 式の右辺は指数関数的に小さい. すなわち, $d(X, Y) \leq v_{LR}t$ で定義される領域¹⁴の外側には, ほとんど X からの情報が伝わらない.

5.3. 証明の概略

それでは, ETH と LR 限界を組み合わせると, (13) 式と (14) 式の証明の概略を議論しよう. まず, 図 5 (b) のように, 熱浴を B_1 と B_2 の 2 つの部分に仮想的に分割する. システムに接触している領域が B_1 である. 熱浴の状態 $|E_j\rangle$ が熱的であれば, 領域 B_1 の状態はカノニカル分布と区別できない. 弱い ETH によれば, ほとんど全ての $|E_j\rangle$ はこれを満たすことが保証されている.

一方, B_2 まで含めると, 熱浴はカノニカル分布とは異なる. したがってその影響により第二法則が破綻する可能性がある. しかし LR 限界により, B_2 の影響がシステムに到達するまでには, 有限の時間が必要である. この時間 (リープ・ロビンソン時間, LR 時間) は, およそ $\tau_{LR} \simeq d(S, B_2)/v_{LR}$ と見積もられる. それまでの間であれば, システムの時間発展は, 熱浴がカノニカル分布である場合とほとんど同じであり, したがって第二法則とゆらぎの定理が成立する. 実際には, LR 時間よりも前であっても, ETH および (15) の右辺からくる微小な誤差が付け加わるため, $-\varepsilon_{2nd}$ および ε_{FT} が現れる. なお後述のように, 第二法則はより長い時間スケールでも別の機構で成立するが, ゆらぎの定理は LR 時間程度までしか成り立たない.

ここで LR 時間の長さについてコメントしておく. 弱い ETH と LR 限界の解析を厳密に行うと, 熱浴の一辺の長さ L に対して, $\tau_{LR} \propto L^\alpha/v_{LR}$ ($0 < \alpha < 1/2$) となるように B_1, B_2 をとれば, 上記の証明が成立する. したがって, $L \rightarrow \infty$ の熱力学極限で LR 時間は無限になる. しかし, 現実には熱浴のサイズは有限のため, LR 時間も有限である.

例として, 部屋の中の空気を熱浴, そこにあるコーヒーをシステムとする. この場合の LR 時間は非常に短く, たとえば 10 メートル四方の部屋であれば 10 ミリ秒程度である. これは, もし空気がエネルギー固有状態であれば, ゆらぎの定理はごく短時間でしか成立しないことを意味する¹⁵.

一方, 冷却原子の場合には, LR 時間は実験の時間スケールと比べて十分長い. たとえば J を光格子上のトンネリングの振幅とすると, 実験の時間スケール \hbar/J に対して LR 時間は $L^\alpha \hbar/J$ 程度である. 現在あるいは近い将来の技術に

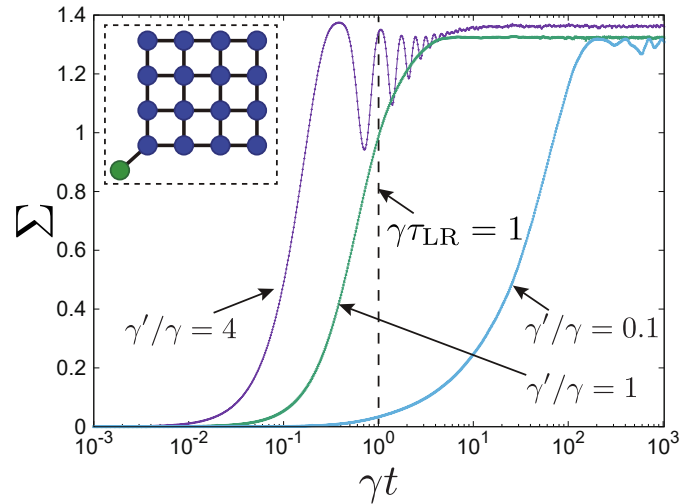


図 6 エントロピー生成の数値計算結果. パラメータは $\omega/\gamma = 10$, $g/\gamma = 0.1$, $\gamma'/\gamma = 0.1, 1, 4$ である. システムの初期状態は $|\psi\rangle = \hat{c}_0^\dagger |0\rangle$, 熱浴の初期状態はボソン数 4 のエネルギー固有状態であり, $k_B T = 10\gamma$ のカノニカル分布にもっとも近いエネルギーの固有状態を選んだ. 中央の点線が LR 時間を表す. エントロピー生成は, LR 時間 τ_{LR} より短い領域と長い領域の両方で非負の値をとる. $\gamma'/\gamma = 4$ の場合の $\gamma t = 1$ 付近での振動は, システムと熱浴間のラビ振動である. (インセット) 数値計算に用いた格子構造. 左下の緑の点がシステム, 青の格子が熱浴を表す.

より $L = 10^4$ とできれば, LR 時間は実験の時間スケールの 100 倍程度になる. この意味でも, 冷却原子などの「人工的」な量子系は, 熱力学を研究する格好の舞台といえる.

5.4. 数値計算

我々は数値厳密対角化により, 具体的な模型で第二法則が成立することを確認した. 模型は 2 次元格子上のハードコアボソンである. ここでハードコアボソンとは, 強い斥力によって同一サイトに 2 粒子以上入れないボソンを意味する. システムは 1 サイトで, 熱浴は 4×4 の正方格子である (図 6 のインセットを参照). システム, システムと熱浴の相互作用, 熱浴のハミルトニアンは, それぞれ

$$\begin{aligned} \hat{H}_S &= \omega \hat{c}_0^\dagger \hat{c}_0, & \hat{H}_I &= -\gamma' \sum_{(0,j)} (\hat{c}_0^\dagger \hat{c}_j + \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_0), \\ \hat{H}_B &= \omega \sum_i \hat{n}_i - \gamma \sum_{(i,j)} (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i) + g \sum_{(i,j)} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j, \end{aligned} \quad (16)$$

である. \hat{c}_i (\hat{c}_i^\dagger) はハードコアボソンの消滅 (生成) 演算子で, $[\hat{c}_i, \hat{c}_j] = [\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger] = [\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger] = 0$ ($i \neq j$ のとき), $\{\hat{c}_i, \hat{c}_i\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_i^\dagger\} = 0$, $\{\hat{c}_i, \hat{c}_i^\dagger\} = 1$ という交換関係を満たす. 熱浴のサイズが小さいため, LR 時間は $\gamma\tau_{LR} \sim 1$ 程度である.

図 6 が数値計算で得られたエントロピー生成の時間発展である. エントロピー生成は短時間領域で立ち上がり, 長時間領域でほぼ一定値に飽和している. エントロピー生成は常に非負であり, 第二法則が成立していることが確かめられる.

5.3 節の議論で第二法則が保証されているのは, LR 時間

¹⁴これは特殊相対論における光円錐の類似である.

¹⁵実際の空気中のコーヒーでは, ゆらぎの定理が成立する時間スケールはずっと長いはずである. 日常的な状況においては, もちろん熱浴はエネルギー固有状態ではなく, それがゆらぎの定理が長時間にわたって成立する理由だと考えられる. このような状況におけるゆらぎの定理は, 量子力学から創発しているわけではなく, 古典確率過程によって記述できる³⁰⁾.

より短い時間領域 ($\gamma t \lesssim 1$) だけであった。しかし図 6 では、LR 時間より長い時間領域 ($\gamma t \gtrsim 1$) でも第二法則は成立している。この長時間領域での第二法則は、我々の別の研究で理論的に示されている⁴¹⁾。エントロピー生成が長時間領域で飽和することは、3.1 節で議論した対角分布への緩和に基づいて証明できる。さらに、エントロピー生成の飽和値の非負性は、強い ETH を仮定して証明した。

6. おわりに

本稿では、量子力学に基づく熱力学の基礎に焦点を当て、孤立量子系の熱平衡化とゆらぎの定理について解説した。さらに我々の研究結果⁹⁾である、量子純粋状態の第二法則とゆらぎの定理について紹介した。この結果により、量子系のエントロピー生成の振る舞いが、純粋状態の場合にも理解できるようになったといえる。

量子多体系の熱力学は、統計物理、物性物理、そして量子情報との境界領域で活発に研究されている。さらに最近になって、量子重力理論の観点からも注目されており、今後も分野横断的な発展が期待される。

本稿の執筆にあたり、貴重なコメントをいただいた清水明氏、白石直人氏、田崎晴明氏、中田芳史氏に感謝致します。

参考文献

- 1) J. von Neumann, Z. Phys. **57**, 30 (1929), 英訳: Eur. Phys. J. H **35**, 201 (2010); (translated by R. Tumulka).
- 2) M. V. Berry, J. Phys. A **10**, 2083 (1977).
- 3) M. Srednicki, Phys. Rev. E **50**, 888 (1994).
- 4) S. Troitzky, *et al.*, Nat. Phys. **8**, 325 (2012).
- 5) J. M. Deutsch, Phys. Rev. A **43**, 2046 (1991).
- 6) H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **80**, 1373 (1998).
- 7) M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii, Nature **452**, 854 (2008).
- 8) L. D'Alessio, Y. Kafri, A. Polkovnikov, and M. Rigol, Adv. Phys. **65**, 239 (2016).
- 9) E. Iyoda, K. Kaneko, and T. Sagawa, Phys. Rev. Lett. **119**, 100601 (2017).
- 10) P. Bocchieri and A. Loinger, Phys. Rev. **114**, 948 (1959).
- 11) A. Hams and H. D. Raedt, Phys. Rev. E **62**, 4365 (2000).
- 12) S. Popescu, A. J. Short, and A. Winter, Nat. Phys. **2**, 754 (2006).
- 13) S. Sugiura and A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. **108**, 240401 (2012).
- 14) F. G. S. L. Brandão, A. W. Harrow, and M. Horodecki, Commun. Math. Phys. **346**, 397 (2016).
- 15) L. Vidmar and M. Rigol, J. Stat. Mech. 064007 (2016).
- 16) R. Nandkishore and D. A. Huse, Ann. Rev. Condens. Matter Phys. **6**, 15 (2015).
- 17) P. Reimann, Phys. Rev. Lett. **101**, 190403 (2008).
- 18) H. Kim, T. N. Ikeda, and D. A. Huse, Phys. Rev. E **90**, 052105 (2014).
- 19) W. Beugeling, R. Moessner, and M. Haque, Phys. Rev. E **89**, 042112 (2014).
- 20) T. Yoshizawa, E. Iyoda, and T. Sagawa, arXiv:1712.07289.
- 21) N. Shiraishi and T. Mori, Phys. Rev. Lett. **119**, 030601 (2017).
- 22) G. Biroli, C. Kollath, and A. M. Läuchli, Phys. Rev. Lett. **105**, 250401 (2010).
- 23) H. Tasaki, arXiv:1609.06983.
- 24) H. Tasaki, J. Stat. Phys. **163**, 937 (2016).
- 25) T. Mori, arXiv:1609.09776.
- 26) K. Netočný and F. Redig, J. Stat. Phys. **117**, 521 (2004).
- 27) Y. Ogata, Commun. Math. Phys. **296**, 35 (2010).
- 28) A. Chandran, A. Pal, C. R. Laumann, and A. Scardicchio, Phys. Rev. B **94**, 144203 (2016).
- 29) E. Ilievski *et al.*, Phys. Rev. Lett. **115**, 157201 (2015).
- 30) U. Seifert, Rep. Prog. Phys. **75**, 126001 (2012).
- 31) M. Esposito, U. Harbola, and S. Mukamel, Rev. Mod. Phys. **81**, 1665 (2009).
- 32) T. Sagawa, arXiv:1202.0983v3. Published in “*Lectures on Quantum Computing, Thermodynamics and Statistical Physics*” (Kinki University Series on Quantum Computing, World Scientific, 2012).
- 33) S. An, *et al.*, Nat. Phys. **11**, 193 (2015).
- 34) J. Kurchan, arXiv:cond-mat/0007360.
- 35) H. Tasaki, arXiv:cond-mat/0009244.
- 36) J. M. R. Parrondo, J. M. Horowitz, and T. Sagawa, Nat. Phys. **11**, 131 (2015).
- 37) H. Tasaki, arXiv:cond-mat/0011321.
- 38) T. N. Ikeda, N. Sakumichi, A. Polkovnikov, and M. Ueda, Ann. Phys. **354**, 338 (2015).
- 39) E. H. Lieb and D. W. Robinson, Commun. Math. Phys. **28**, 251 (1972).
- 40) M. B. Hastings and T. Koma, Commun. Math. Phys. **265**, 781 (2006).
- 41) K. Kaneko, E. Iyoda, and T. Sagawa, Phys. Rev. E. **96**, 062148 (2017).

著者紹介

金子和哉氏： 専門は統計物理。量子力学に基づいて熱力学第二法則を理解する研究に取り組んでいる。

伊與田英輝氏： 専門は統計物理。量子多体系の非平衡物理に興味がある。

沙川貴大氏： 専門は統計物理と量子情報。物理と情報の関係に広く興味がある。

(2018 年 2 月 13 日原稿受付)

From quantum mechanics to the second law of thermodynamics

Kazuya Kaneko, Eiki Iyoda, and Takahiro Sagawa

abstract: The origin of irreversibility is one of the most fundamental questions in theoretical physics, ever since the seminal

consideration of Boltzmann. In this decade, thermalization of isolated quantum systems has attracted renewed attentions, in light of modern experiments such as ultracold atoms. In this article, we review the recent progress in this field, and discuss our theoretical result: the second law of thermodynamics and the fluctuation theorem for many-body pure quantum states.