

拡張 PXP 模型と量子多体スカーについての数理解的研究

柴田 直幸¹、松本 徳文²

¹東京大学大学院 理学系研究科 物理学専攻 桂研究室

²東京大学大学院 理学系研究科 物理学専攻 上田研究室

【著者紹介】

柴田 直幸：専門は量子多体系の理論研究であり、特に可積分系や量子開放系、量子多体傷跡状態などについて研究してきた。本研究では主に数値計算を担当した。

松本 徳文：専門は非平衡開放系の理論研究であり、これまでは開放系における量子相転移や臨界現象などについて研究してきた。本研究では主に数理解析を担当した。

【要旨】

近年、孤立した量子多体系において、示量的な数の保存量が無いにも拘らず熱平衡化が著しく遅い、あるいは全く起こらない量子多体傷跡状態と呼ばれる特別な状態が理論・実験の双方で盛んに研究されている。本研究では、そのような状態が最初に実験的に発見された Rydberg 原子鎖において、原子の hopping 自由度が付与された場合に量子多体傷跡状態が受ける影響を探索した。その結果、hopping 自由度の付与によって新たな量子多体傷跡状態が生じ、その結果として熱平衡化しない初期状態も新たに生じることを発見した。更に、量子多体傷跡状態のうちいくつかの単純なものについて、具体的な表式を明らかにした。本研究は量子多体傷跡状態や熱平衡化について従来よりも一般的な観点からの洞察を与えるものである。

【背景：孤立量子多体系の熱平衡化と量子多体傷跡状態の発見】

(1) 孤立量子多体系の熱平衡化

近年、冷却原子系などの実験技術の発達によって外界から孤立した量子多体系が実験的に実現されるようになった。更に、そのような孤立量子多体系において熱平衡化が実験的に観測された[1]。文献[1]においては、光格子にトラップされた冷却原子系について、密度波の初期状態にサイト間のトンネリングを導入すると粒子数密度が熱平衡期待

値へと緩和することが報告された (図 1)。

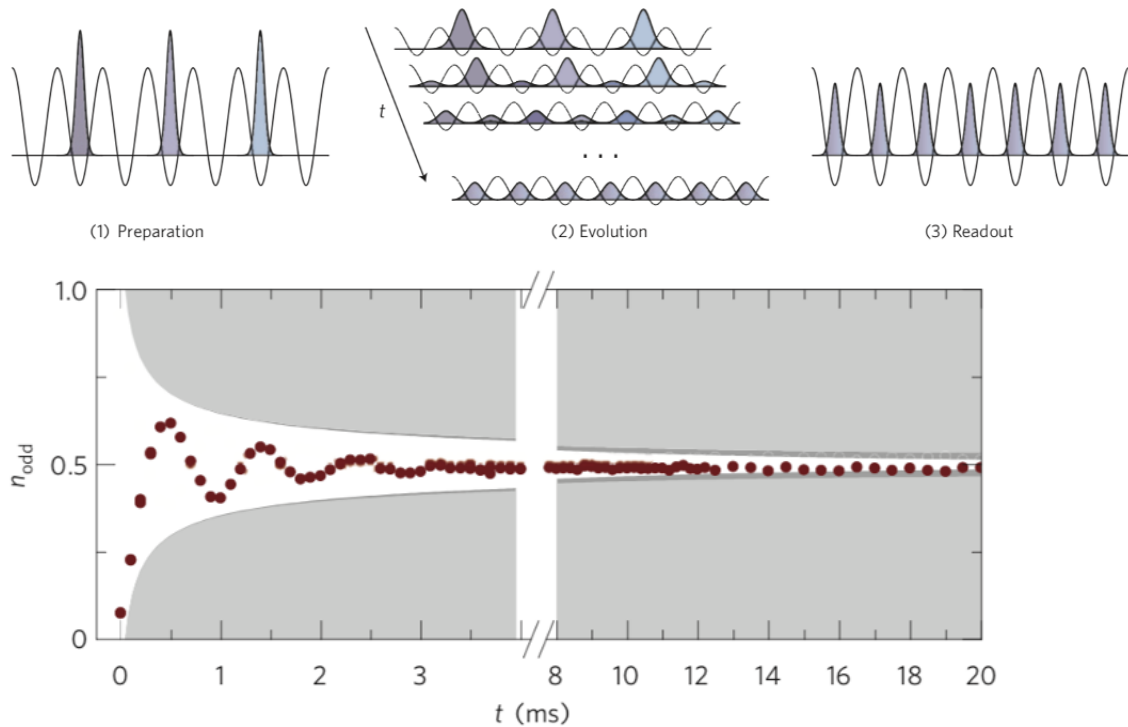


図 1：孤立した冷却原子系の熱平衡化。光格子にトラップされた冷却原子系において、密度波の初期状態にサイト間のトンネリングを導入すると、粒子数密度は熱平衡期待値へと緩和する。図は文献[1]より引用。

このようなダイナミクスにおいて、初期状態は純粋状態であり時間発展はユニタリーなので、時間発展の後も系全体は純粋状態であり続けるが、一方で統計力学においては孤立系の熱平衡状態はミクロカノニカル集団という混合状態で記述される。このような一見すると矛盾して見える事実の整合性を説明するのが固有状態熱化仮説 (Eigenstate Thermalization Hypothesis, ETH) [2]である。

(2) 固有状態熱化仮説 (ETH)

固有状態熱化仮説 (ETH) [2]とは、微小なエネルギー幅を持つエネルギーシェルに含まれるエネルギー固有状態について、局所物理量の期待値が熱力学極限において熱平衡期待値と一致するという主張である。特に、エネルギーシェル内の全エネルギー固有状態が ETH を満たすという「強い ETH」は熱平衡化の十分条件である。

示量的な数の保存量を持たない非可積分系においては、一般に強い ETH が成立し任意の初期状態が熱平衡化すると長い間信じられてきた[3]。しかし近年、この一般的期

待に対する反例が Rydberg 原子鎖の実験において発見され[4]、量子多体傷跡状態として注目されている。

(3) 量子多体傷跡状態 (quantum many-body scar state)

量子多体傷跡状態[4]とは、孤立した量子多体系において、示量的な数の保存量が無いにも拘らず熱平衡化が著しく遅い、あるいは全く起こらない特別な状態である。そのような状態が初めて実験的に発見された文献[4]においては、光格子にトラップされた冷却原子系を扱っている。各原子の内部状態については基底準位と Rydberg 準位と呼ばれる高エネルギー準位との遷移が誘起され、Rydberg 準位の隣接原子同士は強く反発するという系であり、二準位系の PXP 模型[5]によって有効的に記述される。この系においては、大部分の初期状態は素早く熱平衡状態へと緩和するが、初期状態として Z_2 密度波状態などの特定の状態を選ぶと熱平衡化が著しく遅くなること指摘された(図2)。

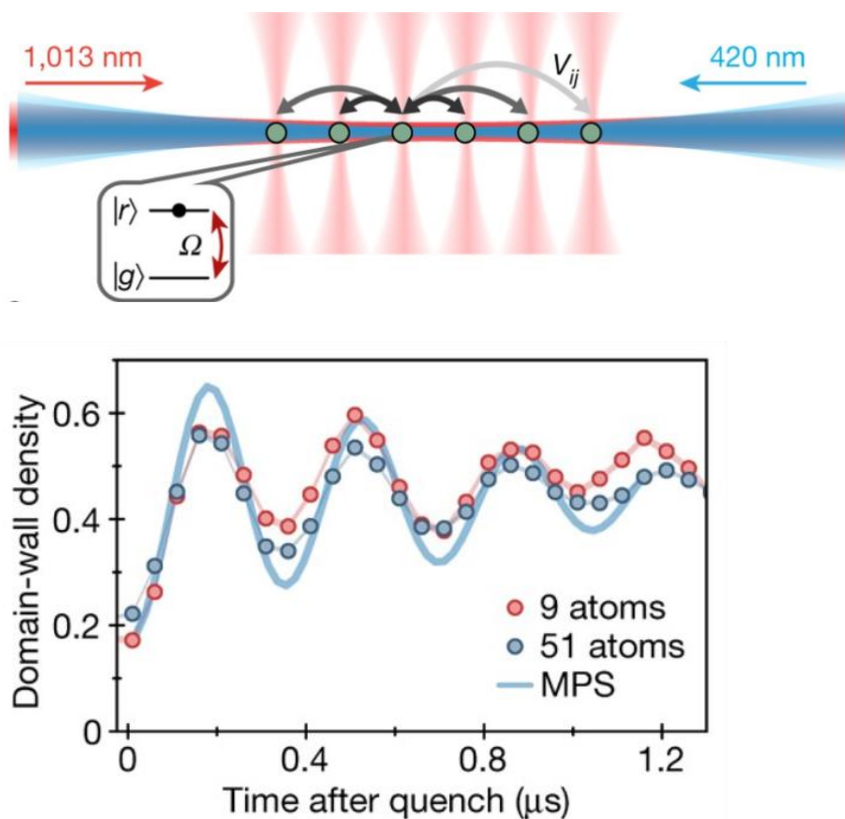


図 2 : Rydberg 原子鎖における量子多体傷跡状態。光格子にトラップされた冷却原子系において、初期状態として Z_2 密度波状態などの特定の状態を選ぶと熱平衡化が著しく遅くなることが発見された。図は文献[4]より引用。

【目的】

本研究の目的は、光格子にトラップされた冷却原子系において、トンネリングによる熱平衡化と Rydberg 相互作用によって生じる量子多体傷跡状態の寄与が競合した場合に創発するダイナミクスを探索することである。この研究は量子多体傷跡状態や熱平衡化の創発の起源について従来よりも一般的な観点からの洞察を与える。

【模型】

上記の目的を達成するために、本研究では、量子多体傷跡状態が最初に実験的に発見された Rydberg 原子鎖において、原子に hopping 自由度を付与した場合に量子多体傷跡状態が受ける影響を探索した (図 3)。具体的には、一次元格子上的ハードコアボゾン原子系を考え、各原子を基底準位 g と Rydberg 準位 r からなる二準位系として記述する。ハミルトニアンは以下のように与えられる：

$$H = H_g + H_r + H_{Rabi},$$
$$H_g = -J_g \sum_j (b_{j+1,g}^\dagger b_{j,g} + b_{j,g}^\dagger b_{j+1,g}),$$
$$H_r = -J_r \sum_j P_{j-1} (b_{j+1,r}^\dagger b_{j,r} + b_{j,r}^\dagger b_{j+1,r}) P_{j+2},$$
$$H_{Rabi} = \Omega P_{j-1} (b_{j,r}^\dagger b_{j,g} + b_{j,g}^\dagger b_{j,r}) P_{j+1}.$$

ここで、三つの項はそれぞれ、基底準位の原子の最近接ホッピング、Rydberg 準位の原子の最近接ホッピング、二準位間の Rabi 結合を表す。射影演算子 P_j は各サイトにおいて Rydberg 状態の原子が存在しない状態へと射影する。この射影は物理的には、最近接原子が同時に Rydberg 準位に励起することは大きな反発エネルギーを伴うため有効的に禁じられる、ということを表す (図 3)。また、各サイトは最大で一つの原子に占有されるというハードコア拘束条件を課す。

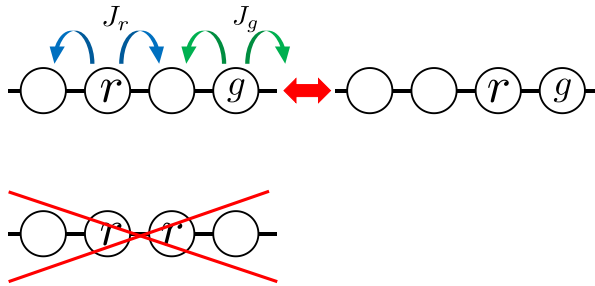


図 3: ホッピングを伴う Rydberg 原子鎖の模式図。一次元格子上的ハードコアボゾン原子系を考え、各原子を基底準位 g と Rydberg 準位 r からなる二準位系として記述する。ハミルトニアンは各準位の原子の最近接ホッピングと二準位間の Rabi 結合からなる。最近接原子が同時に Rydberg 準位に励起することは大きな反発エネルギーを伴うため有効的に禁じられる。

【数値計算の結果：低エンタングル状態および熱化しない初期状態の発見】

(1) 高エネルギーかつ低エンタングルメント状態の系列の発見

上記の模型について、数値的に厳密対角化を行い、エネルギー固有状態のエンタングルメント・エントロピーの分布を調べた。図4において、横軸がエネルギースペクトル、縦軸が half-chain entanglement entropy を表す。この図において、高エネルギーかつ低エンタングルメントの状態の系列の存在が確認される。このような異常に小さなエンタングルメントは、これらの状態が固有状態熱化仮説 (ETH) を満たさず熱的に振る舞わないことを示唆する。というのも、ETH を満たす典型的な状態はエンタングルメント・エントロピーが熱力学的エントロピーのように振る舞い体積則に従ってスケールするためである。

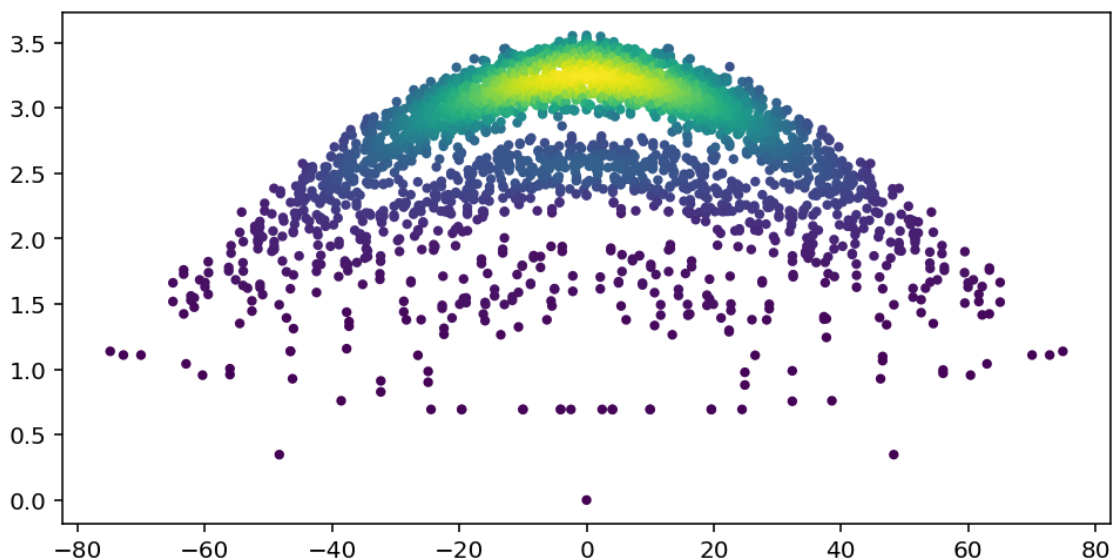


図4：エネルギー固有状態のエンタングルメント・エントロピーの分布。横軸がエネルギースペクトル、縦軸が half-chain entanglement entropy を表す。系のサイズは8サイトとし、パラメータは $J_g = \Omega = 10$ 、 $J_r = 1$ とした。高エネルギーかつ低エンタングルメントの状態の系列の存在が確認される。

(2) 特定の初期状態について熱平衡化しないダイナミクスの発見

上記の低エンタングルメント状態の系列においては一定程度のエネルギー間隔が確認される。このようなエネルギー間隔を持つ状態の系列と大きな重なりを持つ初期状態は異常に長時間に渡って熱平衡化しないことが知られている。そこで、本研究の模型においてもそのような初期状態を探索した。

はじめに、時間発展後の状態と初期状態の重なりとして定義された fidelity の時間発展を数値的に計算した。図 5 において、横軸が時間、縦軸が fidelity $F(t) = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2$ である。初期状態については、赤線が $\psi(0) = |000r000r\rangle$ の結果であり、緑線が $\psi(0) = |00000r0g\rangle$ の結果である。緑線が急速にゼロに近づくのに対して赤線は revival を示す。

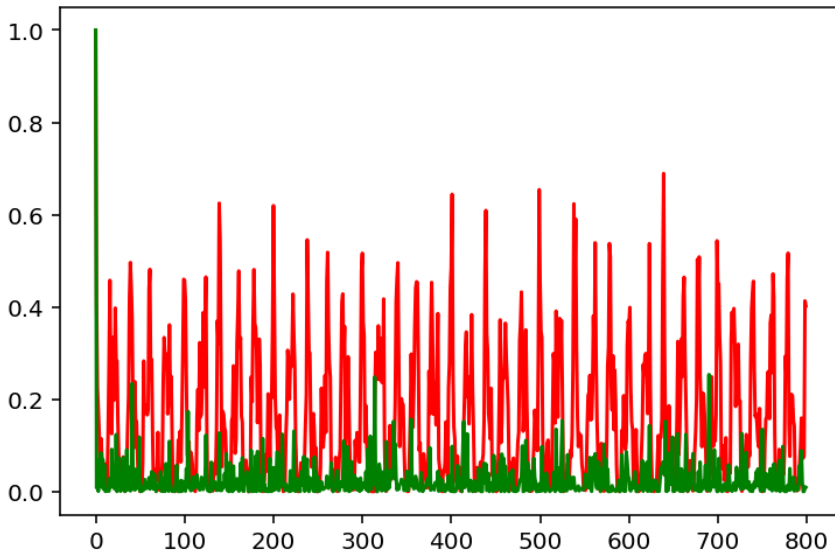


図 5 : fidelity の時間発展。

横軸が時間、縦軸が fidelity $F(t) = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2$ である。初期状態については、赤線が $\psi(0) = |000r000r\rangle$ の結果であり、緑線が $\psi(0) = |00000r0g\rangle$ の結果である。緑線が急速にゼロに近

づくのに対して赤線は revival を示す。

次に、同じ初期状態の組についてエンタングルメントの時間発展を数値的に計算した。図 6 において、横軸が時間、縦軸が half-chain entanglement entropy である。緑線が急速に大きな値に近づくのに対して赤線は低い値への revival を示す。

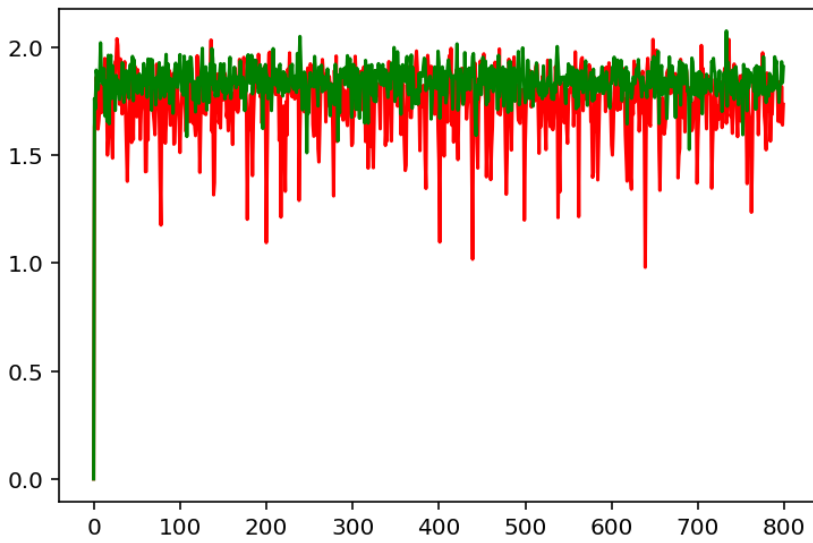


図 6：エンタングルメントのダイナミクス。横軸が時間、縦軸が half-chain entanglement entropy である。初期状態については、赤線が $\psi(0) = |000r000r\rangle$ の結果であり、緑線が $\psi(0) = |00000r0g\rangle$ の結果である。緑線が急速に大きな値に近づくのに対して赤線は低い

値への revival を示す。

これら 2 つの初期状態のダイナミクスの違いは各エネルギー固有状態との重なる分布を見ることによって理解できる。図 7 において、横軸はエネルギースペクトルであり、散布図の縦軸は half-chain entanglement entropy、棒グラフ（色は図 5, 6 に対応）の縦軸は初期状態と各エネルギー固有状態の重なる分布である。赤い棒グラフは少数の低エンタングルメント状態と大きな重なりを持ち、revival dynamics と整合する。一方で緑の棒グラフは幅広い状態との間で同程度の重なりを持ち、素早く緩和するダイナミクスと整合する。

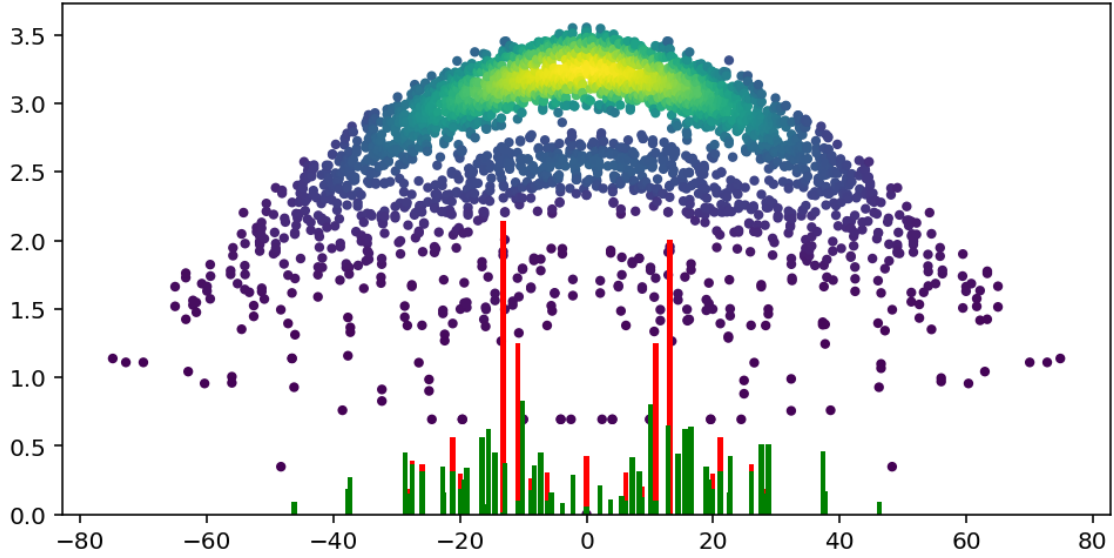


図 7: 初期状態と各エネルギー固有状態の重なるの分布。横軸はエネルギースペクトルであり、散布図の縦軸は half-chain entanglement entropy、棒グラフの縦軸は初期状態と各エネルギー固有状態の重なり（絶対値の 2 乗を 20 倍に拡大）である。赤線が $\psi(0) = |000r000r\rangle$ の結果であり、緑線が $\psi(0) = |00000r0g\rangle$ の結果である。赤い棒グラフは少数の低エンタングルメント状態と大きな重なりを持つが、緑の棒グラフは幅広い状態との間で同程度の重なりを持つ。

【解析的結果】

ダイナミクスの数値的解析に加えて、量子多体傷跡状態のうちいくつかの単純なものについて、具体的な表式を明らかにした。

(1) 一粒子量子多体傷跡状態の具体的表式

以下のような一粒子状態が具体的に構成できることを発見した：

$$|\pm, k\rangle \propto (b_{k,r}^\dagger \pm b_{k,g}^\dagger) |vac\rangle.$$

この状態はハミルトニアン の 3 つの部分の同時固有状態となっており、固有エネルギーは次の形になる：

$$E = \pm \Omega - 2(J_g + J_r) \cos k.$$

また、この状態は half-chain entanglement entropy が $\log 2$ という値を取り、実際に低エンタングルメント状態に含まれる。

(2) 二粒子量子多体傷跡状態の具体的表式

単純な二粒子量子多体傷跡状態の具体例として、以下のような並進対称な二粒子束縛状態を考える：

$$|s_1, s_2, k\rangle \propto \sum_j e^{ikj} (b_{j+2,r}^\dagger + s_1 b_{j+2,g}^\dagger) (b_{j,r}^\dagger + s_2 b_{j,g}^\dagger) |vac\rangle.$$

この状態は H_{Rabi} の固有状態であるが、ホッピング項 $H_g + H_r$ の固有状態でもあるのは波数 $k = \pi$ の場合に限られることを発見した。このような波数 $k = \pi$ を持つ束縛状態は Hubbard 模型における eta pairing 状態[6]とも形式的に類似しており、その意味でも興味深い結果であると考えられる。

【結論】

本研究においては、Rydberg 原子鎖において原子に hopping 自由度を付与した場合に量子多体傷跡状態が受ける影響を数値的・解析的に探索した。その結果、hopping 自由度の付与によってエンタングルメントの小さい新たな量子多体傷跡状態が生じることを発見した。更にその結果として、fidelity やエンタングルメントが revival を示し熱平衡化しない初期状態も新たに生じることを発見した。また、数値的解析に加えて、量子多体傷跡状態のうちいくつかの単純なものについて、具体的な表式を明らかにした。本研究は量子多体傷跡状態や熱平衡化の発現の機構について従来よりも一般的な観点からの洞察を与えるものである。

【今後の発展に関する展望】

(1) 対称性・保存量セクターに分割した上での数値解析

本研究の数値計算においては、対称性・保存量のセクターに分割せずに全ヒルベルト空間について解析を行った。今後、保存量セクター内での振る舞いを調べることによって、そのような対称性の影響がより明示的に理解できると期待される。

(2) 多粒子状態における revival dynamics の探索

本研究では少数の粒子を含む状態の時間発展に着目して熱平衡化しない初期状態を見出した。今後は、より多数の粒子を含む状態について同様の熱平衡化しないダイナミクスを探索することによって、相互作用の影響がより強く寄与する非自明な結果が得られることが期待される。

(3) 多粒子量子多体傷跡状態の具体的表式・代数構造の探索

本研究では少数の粒子を含む量子多体傷跡状態に着目して具体的表式を明らかにした。今後の発展として、多数の粒子を含む場合に一般化できるような形の表式やそれらの代数構造を探索することは興味深い方向性である。

【謝辞】

本研究の遂行にあたって、指導教員である桂法称准教授、上田正仁教授には多大なご支援・ご指導をいただいたことに深く感謝いたします。また、副指導教員である藤田誠教授、中村泰信教授にも、本研究の提案を許可いただいたこと、アドバイスをいただいたことに感謝いたします。最後に、自発融合研究の機会を与えてくださった MERIT プログラムに感謝いたします。

【参考文献】

- [1] S. Trotzky *et al.*, *Nat. Phys.*, **8**, 325 (2012)
- [2] M. Srednicki, *Phys. Rev. E* **50**, 888 (1994); M. Rigol *et al.*, *Nature* **452**, 854 (2008)
- [3] L. D'Alessio *et al.*, *Adv. Phys.* **65**, 239 (2016)
- [4] H. Bernien *et al.*, *Nature* **551**, 579 (2017)
- [5] C. J. Turner *et al.*, *Nat. Phys.* **14**, 745 (2018)
- [6] C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 2144 (1989)