巨視的な遷移に対する速度限界

Ryusuke Hamazaki (RIKEN CPR Hakubi)

@ 2023/3/16, Workshop OT 2023, 東京大学

Refs.)
*<u>R. Hamazaki</u>, PRX Quantum 3 (2), 020319 (2022).
*[Review paper] Z. Gong and <u>R. Hamazaki</u>, International Journal of Modern Physics B 36 (31), 2230007 (2022).

Outline

1. イントロダクション:量子速度限界

2. 巨視的な遷移に対する速度限界

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



*連続系

3. Conclusion

Outline

1. イントロダクション:量子速度限界

2. 巨視的な遷移に対する速度限界

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



*連続系

3. Conclusion

非平衡量子ダイナミクス



非平衡量子統計力学:近年の量子物理学のフロンティア

非平衡量子系の制御技術の発展

人工量子系の発展(量子シミュレータ・量子コンピュータ)

冷却原子・イオン系、超伝導量子ビット系など
*ノイズのほとんどない孤立系の実現
*系のパラメータを自在に制御
*高い空間・時間分解能を伴う観測技術
→ 非平衡ダイナミクスの検証の舞台



Sherson et al., Nature (2010)

量子技術への期待の高まりにより、 量子系の制御に関する法則・限界を理解が求められている →非平衡量子ダイナミクスの理解が理論的な基盤となる

量子速度限界

ある非平衡状態から別の状態に遷移する状況を考える



こうした遷移の速度に対し普遍的な法則はあるか?

1. 量子状態 $\vec{\psi}_i$ が別の状態 $\vec{\psi}_f$ に変化する時間?

2.物理量A(原子の位置や励起状態にいる確率など)の速度?

量子速度限界

ある非平衡状態から別の状態に遷移する状況を考える



こうした塗物の地反に対し首連的な広則はのるか?

1. 量子状態 $\vec{\psi}_i$ が別の状態 $\vec{\psi}_f$ に変化する時間?

2.物理量A(原子の位置や励起状態にいる確率など)の速度?

MandelstamとTammの量子速度限界

1. 量子状態 $\vec{\psi}_i$ が別の状態 $\vec{\psi}_f$ に変化する時間を見積もれるか? $\vec{\psi}(0) = \vec{\psi}_i$ (複素ヒルベルト空間 \mathbb{C}^D の元) $\vec{\psi}(T) = \vec{\psi}_f$ ih $\frac{d\vec{\psi}}{dt} = H\vec{\psi}$ 速度は系のエネルギースケールに支配される Mandelstam-Tamm限界 (1945) $\vec{\psi}(0) = \vec{\psi}_i$ 孤立量子系において、初期状態 $\vec{\psi}_i$ がそれと直交する 状態 $\overrightarrow{\psi_f}$ に遷移するための時間を T_o とすると $T_{\rm o} \ge \frac{\hbar\pi}{2\Delta E} \quad \longleftarrow \quad \Delta E \cdot T_{\rm o} \ge \frac{\hbar\pi}{2} \quad \Delta E = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} \qquad \vec{\psi}_i^{\dagger} \vec{\psi}_f = 0$ 時間とエネルギー揺らぎのトレードオフ関係

L. Mandelstam and I. Tamm, J. Phys. 9 249 (1945).

期待値に対する量子速度限界

2. 物理量Aの速度を見積もれるか?

量子力学では物理量Aは演算子であり、観測ごとに測定結果は揺らぐ → その期待値 $\langle A \rangle = \overrightarrow{\psi}^{\dagger} A \overrightarrow{\psi}$ の速度を考える

物理量の期待値 $\langle A(t) \rangle$ に対する速度限界 [Mandelstam-Tamm (1945)]

$$\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \frac{2}{\hbar} \Delta A(t) \cdot \Delta E \qquad \begin{array}{l} \Delta A(t)^2 = \langle A(t)^2 \rangle - \langle A(t) \rangle^2 \\ & \text{時刻 } t \text{ での量子揺らぎ} \end{array}$$

エネルギー揺らぎが(瞬間)速度をバウンドする

$$T_{o} \ge \frac{\hbar\pi}{2\Delta E}$$
はこの式で $A = \vec{\psi}(0)\vec{\psi}(0)^{\dagger}$ とすると得られる

期待値に対する量子速度限界

2. 物理量Aの速度を見積もれるか?

量子力学では物理量Aは演算子であり、観測ごとに測定結果は揺らぐ

既存の量子速度限界は特に小さな系で成功を収めている (原子の内部状態遷移など)



エネルギー揺らぎが(瞬間)速度をバウンドする

 $T_{o} \ge \frac{\hbar\pi}{2\Delta E}$ はこの式で $A = \vec{\psi}(0)\vec{\psi}(0)^{\dagger}$ とすると得られる

巨視的な非平衡遷移

重要な非平衡過程の一つ:粒子等の巨視的な距離の輸送

興味ある物理量: 原子の平均変位 $\langle X(t) \rangle$ 、 変位の揺らぎ $\Delta X(t)$ など 巨視的な遷移: 特徴的な微視的スケール λ (格子間隔など)に比べ、 系の大きさや物理量の変化、揺らぎなどが十分大きい

> 非一様な初期状態からの緩和、量子状態の転送など、 非平衡量子系において重要な役割を果たす

巨視的な非平衡遷移

重要な非平衡過程の一つ:粒子等の巨視的な距離の輸送



既存の速度限界を用いて遷移を理解することができるか?

巨視的な遷移に対する既存の速度限界の破綻 $L \gg 1$ $\Delta X(t)$

例) 物理量 X: 一次元中の M 原子の平均位置

 $\frac{d\langle X(t) \rangle}{dt} \leq 2\Delta X \cdot \Delta E$ 実際の速度(左辺)は有限 ↔ 右辺は典型的に発散し、意味を持たない $\Delta X \sim \min(t^c, L)$ (c > 0)

巨視的な遷移に対して有効な新しい速度限界が必要

$$\frac{d\langle A(t)\rangle}{dt} \le 2\Delta A \cdot \Delta E$$

遷移は局所的に起こっている



右辺はダイナミクスの<u>局所性</u>を取り入れられていない 空間の距離構造を適切に取り入れる必要がある

cf) Wasserstein距離 $W_q(p,p')^q = \inf_{\Pi \in \mathscr{C}(p,p')} \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} d(\mathbf{x},\mathbf{y})^q \Pi(\mathbf{x},\mathbf{y})$ 距離構造

Kantorovich-Rubinstein双対

$$\frac{\langle A(t+\delta t) \rangle - \langle A(t) \rangle}{\delta t} \bigg| \leq \|A\|_{\text{Lip}} \cdot \frac{W_1(\overrightarrow{p}(t), \overrightarrow{p}(t+\delta t))}{\delta t}$$

Lipschitz定数

例えば粒子位置に関し、 ΔA のような発散が起こらない

Outline

1. イントロダクション:量子速度限界

2. 巨視的な遷移に対する速度限界

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



*連続系

3. Conclusion

連続系における一般的な議論

連続空間{x}で定義された系を考える 物理量 $A = \{A(\mathbf{x})\}$ の期待値 $\langle A(t) \rangle = d\mathbf{x}A(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x},t)$ 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! $\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ $\mathbf{\hat{m}}$ $\mathbf{\hat{m}}$ **\mathbf{\hat{m}}** $\mathbf{\hat{m}}$ **\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}** $\mathbf{\hat{m}$ **\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat{m}\mathbf{\hat{m}}\mathbf{\hat** lim |**j**|=0を仮定 $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ $\frac{d\langle A(t)\rangle}{dt} = \int d\mathbf{x}A(\mathbf{x})\dot{\rho}(\mathbf{x},t) = -\int d\mathbf{x}A(\mathbf{x})\nabla\cdot\mathbf{j}(\mathbf{x},t) = \int d\mathbf{x}\nabla A(\mathbf{x})\cdot\mathbf{j}(\mathbf{x},t)$ 部分積分 Cauchy-Schwarz ^{不等式} → $\left| \frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} \right| \leq \sqrt{\langle (\nabla A)^2 \rangle} \left\langle \left(\frac{\mathbf{j}}{\rho} \right)^2 \right\rangle$ Aの勾配 確率流密度 **R. Hamazaki**, PRX Quantum 3 (2), 020319 (2022).

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

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

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

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

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 $\psi = \sqrt{\rho}e^{i\theta}$
 $\theta: 量子位相$
 $\left|\frac{d\langle A(t)\rangle}{dt}\right| \leq \sqrt{\langle(\nabla A)^2\rangle} \sqrt{\langle(\nabla \theta)^2\rangle} = \sqrt{\langle(\nabla A)^2\rangle} \sqrt{2E_{kin}}$
 $\mathbf{j} = \rho \frac{\hbar \nabla \theta}{m}$ 原子集団の運動エネルギー
 $E_{kin} = \int d\mathbf{x} \frac{\rho |\nabla \theta|^2 \hbar^2}{2m^2}$
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**
R. Hamazaki, PRX Quantum 3 (2), 020319 (2022).

$$\left|\frac{d\langle A(t)\rangle}{dt}\right| \leq \sqrt{\langle (\nabla A)^2 \rangle} \sqrt{2E_{\text{kin}}} \leq \|\nabla A\|_{\infty} \sqrt{2E_{\text{kin}}} \\ \|\nabla A\|_{\infty} = \max_{\mathbf{x}} \|\nabla A(\mathbf{x})\|_2 \\ \frac{\langle A(t)\rangle}{\langle A(t)\rangle}$$

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 $\left| \frac{d\langle x(t) \rangle}{dt} \right| \le \sqrt{2E_{\text{kin}}}$ ($\ll \frac{2}{\hbar} \Delta x \Delta E$)

揺らぎについても同様な速度限界が存在

Remark: 分布のテール

Lieb-Robinson速度 v_{LR} (空間的な情報伝搬の速度に関する上限値) よりもタイトな速度となる: $v \le v_{LR}$

Z. Gong and **R. Hamazaki**, Int. J. Mod. Phys. B 36 (31), 2230007 (2022).

Remark: 熱力学的速度限界

Fokker-Planck方程式

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

この場合には、次の熱力学的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)

注)過剰エントロピー生成率 σ_{ex} を用いても左辺はバウンドできる 最適輸送との関連が議論できる 伊藤さん、Vuさん、吉村さんの講演

Outline

1. イントロダクション:量子速度限界

2. 巨視的な遷移に対する速度限界

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



*連続系

3. Conclusion

離散的な量子ダイナミクス

人工量子系などでは、巨視的な離散遷移ダイナミクスがしばしば重要



I. Bloch et al., Rev. Mod. Phys. (2008)
 光格子中の冷却原子:
 レーザーの定在波により「格子」
 を作り、その上に原子を並べる
 → 非平衡量子統計力学の
 検証の舞台となっている

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

離散的な系でのアイデア

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

バーテックス: *i* ∈ 𝒴 (状態の基底) エッジ: *i ≠ j* かつ *i と j* 間の 遷移があれば (*i*,*j*) ∈ 𝒴



離散的な系でのアイデア



離散的な系でのアイデア

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

バーテックス: i ∈ 𝒴 (状態の基底)
エッジ: i ≠ j かつ i と j 間の
遷移があれば (i, j) ∈ 𝔅

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

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

確率流を用いた速度限界

離散的な確率の局所保存則 $\frac{dp_i}{dt} = -\sum_{j:(j,i)\in\mathscr{C}} J_{ji}(t)$ を用いる $\frac{d\langle A(t)\rangle}{dt} = \sum_{i} A_{i} \frac{dp_{i}}{dt} = -\sum_{(i,j)\in\mathscr{C}} A_{i} J_{ji}(t) = -\frac{1}{2} \sum_{(i,j)\in\mathscr{C}} (A_{i} - A_{j}) J_{ji}(t)$ $\frac{d\langle A(t)\rangle}{dt} \le \frac{1}{2} \max_{(i,j)\in\mathscr{C}} |A_i - A_j| \sum_{(i,j)\in\mathscr{C}} |J_{ji}(t)|$ Hölder $(i,j) \in \mathscr{E}$ 不等式

または



$$\frac{\langle t \rangle}{|t|} \leq \sqrt{\sum_{(i,j) \in \mathscr{E}} r_{ij} |A_i - A_j|^2 \sum_{(i,j) \in \mathscr{E}} \frac{|J_{ji}(t)|^2}{r_{ij}}} r_{ij} > 0$$

確率流を用いた速度限界

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

 $A_i - A_i$

E

$$\frac{d\langle A(t)\rangle}{dt} \leq \frac{1}{2} \max_{\substack{(i,j)\in\mathscr{C}\\ =: }} |A_i - A_j| \sum_{\substack{(i,j)\in\mathscr{C}\\ =: }} |J_{ji}(t)|$$

エッジ8により定義された A の離散的勾配

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

巨視的な量子遷移と速度限界

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

$$L \forall T \land S, M \oplus \mathcal{F} \oplus \mathbb{R}$$

$$L \forall T \land S, M \oplus \mathcal{F} \oplus \mathbb{R}$$

*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 ← 巨視的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





 $\|\nabla A\|_{\infty}$

 $d\langle A(t)\rangle$

Remark 1. 連続系と同様、揺らぎ(量子コヒーレンス)に対する 速度限界や、分布のテールに関する不等式も導ける

> Remark 2. 連続系と同様、巨視的遷移に有効な 熱力学的速度限界も導ける 最適輸送との関係: Vuさん、吉村さんの講演



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

L サイト系、*M*原子の輸送

まとめ

人工量子系の発展により、非平衡量子統計力学は 近年の量子物理学のフロンティアとなっている

確率の局所保存則を用いて、巨視的な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 また、平均速度を超えて、揺らぎ等に関する不等式も導ける