

量子多体系の基底状態の動的安定性

大阪市立大学大学院・工学研究科 工藤 和恵 (Kazue Kudo)
Department of Applied Physics,
Osaka City University

1 動的安定性の指標

量子系の動的安定性は量子カオスやエネルギー拡散など様々な分野で研究されてきた。最近では、量子情報の分野で動的安定性の指標として fidelity がよく用いられている。fidelity は次のように定義される： $F(t) = |\langle \psi_0(t) | \psi_\delta(t) \rangle|$ 。ここで $|\psi_0(t)\rangle$ は無摂動の、 $|\psi_\delta(t)\rangle$ は摂動のある場合の時間発展である。すなわち fidelity とは、 $|\psi_0(t)\rangle$ と $|\psi_\delta(t)\rangle$ のオーバーラップを表している。あるいは、他の解釈として Loschmit エコー (動的不可逆性)、量子コンピュータでの位相コヒーレンスの損失などとして研究されている。特に、初期状態が無摂動ハミルトニアン固有値であるとき、 $P(t) = F(t)^2$ を survival probability と呼ぶ。

これまで行われてきた研究は、少数自由度系やランダム行列を用いた議論がほとんどであった [1]。また、初期状態としては高励起状態やランダムな状態を扱うものが大半を占めていた。これに対して、本研究では量子多体系における基底状態の動的安定性を議論する。動的安定性の指標としては基底状態の survival probability を、モデルは次近接相互作用を含む量子 XXZ スピン鎖を用いる。このモデルの特長は、次近接相互作用を変化させることで可積分性を調節できることである。すでに準位統計による研究で、その可積分的、カオス的性質の変化が確認されている [2]。また、基底状態近傍の低エネルギー領域でもこの性質が現れている。このことは、ランダム行列などの系ではおこらない。

量子 XXZ スピン鎖を用いた動的性質の研究としては、エネルギー拡散を議論したものがある [3]。摂動として進行波の形の磁場を加えた場合の基底状態からのエネルギー拡散を議論していた。その場合は、次近接相互作用に依存したエネルギー拡散の振舞いの変化が見られた。本研究では、摂動として空間的にランダムで時間的には周期的な振動磁場を加える。摂動の選び方で動的安定性の振舞いがどう違い得るのかを示す。

2 模型と計算手法

ここで扱う模型のハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t) \quad (1)$$

と書くことができる。 \mathcal{H}_0 、 $\mathcal{H}_1(t)$ はそれぞれ無摂動、摂動のハミルトニアンであり、次式のように与える：

$$\mathcal{H}_0 = J_1 \sum_{j=1}^L (S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z) + J_2 \sum_{j=1}^L (S_j^x S_{j+2}^x + S_j^y S_{j+2}^y + \Delta S_j^z S_{j+2}^z), \quad (2)$$

$$\mathcal{H}_1(t) = \sum_{j=1}^L B_j \sin(\omega t) S_j^z. \quad (3)$$

ここで、 $S_j^\alpha = (1/2)\sigma_j^\alpha$ であり、 $(\sigma_j^x, \sigma_j^y, \sigma_j^z)$ は j 番目のサイトのパウリ行列である。境界条件は、周期的境界条件とする。無摂動系は、 $J_1 > 0$ かつ $J_2 > 0$ のとき、フラストレートした反強磁性スピン鎖に対応する。また、異方性パラメタ Δ の範囲は、 $0 < \Delta < 1$ とする。その場合には、準位統計がカオス的な特徴を見せることが確認されている [2]。ただし、 $J_2 = 0$ のときは、無摂動系は可積分である。摂動は、空間的にランダムで時間的には周期的な振動磁場である。ランダムな磁場 B_j は次のような平均と分散を持つガウス乱数で与える：

$$\langle B_j \rangle = 0, \quad \langle B_j B_k \rangle = B_0^2 \delta_{jk}. \quad (4)$$

survival probability は次式で定義する：

$$P(t) = \langle |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2 \rangle_{\text{ave}} = \langle \tilde{P}(t) \rangle_{\text{ave}}. \quad (5)$$

ここで $\langle \rangle_{\text{ave}}$ はランダム磁場の平均を意味している。初期状態 $|\psi(0)\rangle$ は、 \mathcal{H}_0 の基底状態にとる。 $|\psi(t)\rangle$ は、時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathcal{H}(t) |\psi(t)\rangle = [\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t)] |\psi(t)\rangle \quad (6)$$

の解である。

数値計算では、次式を利用する：

$$|\psi(t)\rangle = U(t; t - \Delta t) U(t - \Delta t; t - 2\Delta t) \dots U(\Delta t; 0) |\psi(0)\rangle. \quad (7)$$

短い時間 $\Delta t (= 10^{-3})$ ごとに時間発展演算子 $U(t + \Delta t; t)$ を 4 次の指数分解法で計算する。異なる 100 個のスピン鎖に対して同一の初期状態から時間発展させて $\tilde{P}(t)$ を求め、その平均を $P(t)$ とする。系のサイズは $L = 10$ で、 $S_{\text{tot}}^z = 0$ のブロック (252 準位を含む) を用いて数値計算を行う。¹

3 短時間の振舞い

まず、survival probability の短時間の振舞いを解析的に議論する。波動関数を次のように展開する：

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-i\varepsilon_n t} |\phi_n\rangle. \quad (8)$$

¹系の対称性から、ハミルトニアンが S_{tot}^z ごとにブロック分かれ、 S_{tot}^z の異なる状態同士は相関を持たない。

ここで $\hbar\varepsilon_n$ と $|\phi_n\rangle$ はそれぞれ \mathcal{H}_0 の第 n 励起状態の固有値と固有関数である。また、 $\hbar\varepsilon_0$ と $|\phi_0\rangle$ は基底状態の固有値と固有関数である。式 (8) をシュレーディンガー方程式 (6) に代入し、左から $\langle\phi_m|$ をかけると、

$$\dot{a}_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n \langle\phi_m|\mathcal{H}_1(t)|\phi_n\rangle e^{i(\varepsilon_m - \varepsilon_n)t} a_n(t). \quad (9)$$

これを初期条件

$$a_n(0) = \begin{cases} 1 & \text{for } n = 0 \\ 0 & \text{for } n \neq 0 \end{cases} \quad (10)$$

のもとで解析する。

ここで、行列 $\{Z_{nm}\}$ を導入する：

$$\langle\phi_n|\mathcal{H}_1(t)|\phi_m\rangle = -\sin(\omega t) Z_{nm}; \quad Z_{nm} = \sum_{j=1}^L \langle\phi_n|B_j S_j^z|\phi_m\rangle. \quad (11)$$

ここで、 Z_{nm} は n や m に依らない平均、分散を持つ乱数であると仮定する。ランダム磁場 B_j の性質 (4) を反映して、 Z_{nm} は次のような平均、分散を持つと考えられる：

$$\langle Z_{nm} \rangle = 0, \quad \langle Z_{nm} Z_{n'm'} \rangle = \frac{B_0^2 \gamma}{4} \delta_{nn'} \delta_{mm'}. \quad (12)$$

ここで、 γ は \mathcal{H}_0 のエネルギー・スペクトルの性質を反映するパラメタとする。

平均前の survival probability $\tilde{P}(t)$ は次のように書ける：

$$\tilde{P}(t) = |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2 = \sum_n |\langle\phi_0|a_0^*(t)a_n(t)e^{i(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)t}|\phi_n\rangle|^2 = |a_0(t)|^2. \quad (13)$$

この時間微分は、

$$\frac{d}{dt} \tilde{P}(t) = \frac{d}{dt} |a_0(t)|^2 = \dot{a}_0(t) a_0^*(t) + a_0(t) \dot{a}_0^*(t) \quad (14)$$

で、式 (9) を式 (14) に代入すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{P}(t) &= \text{Re} \left[-\frac{i}{\hbar} \langle\phi_0|\mathcal{H}_1(t)|\phi_0\rangle a_0(t) a_0^*(t) \right] \\ &\quad + \text{Re} \left[-\frac{i}{\hbar} \sum_{n \neq 0} \langle\phi_0|\mathcal{H}_1(t)|\phi_n\rangle e^{i(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)t} a_n(t) a_0^*(t) \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

ここで、右辺第 1 項は括弧の中身が純虚数のためゼロになることに注意する。 $m = 0$ のときの式 (9) の複素共役を積分すると、

$$a_0^*(t) = a_0^*(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t dt' \sin(\omega t') Z_{0n} e^{-i(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)t'} a_n^*(t'). \quad (16)$$

これを式(15)に代入して

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{P}(t) &= \text{Re} \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n \neq 0} \sin(\omega t) Z_{0n} e^{i(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)t} a_n(t) \right] \\ &+ \text{Re} \left[\frac{1}{\hbar^2} \sum_{n \neq 0} \sum_m Z_{0n} Z_{0m} \sin(\omega t) e^{i(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)t} \int_0^t dt' \sin(\omega t') e^{-i(\varepsilon_0 - \varepsilon_m)t'} a_n(t) a_m^*(t') \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

式(9)の積分を利用して式(17)を書き換えると、

$$\frac{d}{dt} \tilde{P}(t) = \dot{\tilde{P}}_1(t) + \dot{\tilde{P}}_2(t). \quad (18)$$

ここで、 $\dot{\tilde{P}}_1(t)$ と $\dot{\tilde{P}}_2(t)$ はそれぞれ次のようになる：

$$\dot{\tilde{P}}_1(t) = \text{Re} \left[-\frac{1}{\hbar^2} \sum_{n \neq 0} \sum_m Z_{0n} Z_{nm} \sin(\omega t) e^{i(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)t} \int_0^t dt' \sin(\omega t') e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_m)t'} a_m(t') \right]. \quad (19)$$

$$\dot{\tilde{P}}_2(t) = \text{Re} \left[\frac{1}{\hbar^2} \sum_{n \neq 0} \sum_m Z_{0n} Z_{0m} \sin(\omega t) e^{i(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)t} a_n(t) \int_0^t dt' \sin(\omega t') e^{-i(\varepsilon_0 - \varepsilon_m)t'} a_m^*(t') \right]. \quad (20)$$

式(19)の Z_{nm} に関する平均をとり、摂動展開の最低次を考える。具体的には十分短い時間 t では $a_0(0) = 1$ 以外は $a_m(t') = 0$ であると仮定する。

$$\begin{aligned} \langle \dot{\tilde{P}}_1(t) \rangle_{\text{ave}} &= \text{Re} \left[-\frac{B_0^2 \gamma}{4\hbar^2} \sum_{n \neq 0} \sin(\omega t) e^{i(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)t} \int_0^t dt' \sin(\omega t') e^{-i(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)t'} \right] \\ &= -\frac{B_0^2 \gamma}{4\hbar} \sum_{n \neq 0} \frac{1}{2} \omega^2 t^3 + O(t^4) \simeq -\frac{B_0^2 \gamma}{8\hbar} (\mathcal{N} - 1) \omega^2 t^3. \end{aligned} \quad (21)$$

ここで \mathcal{N} はヒルベルト空間の次元である。式(20)に関しても同様の操作をする。具体的には十分短い時間 t では $n \neq m$ のとき $\langle a_n(t) a_m^*(t') \rangle_{\text{ave}} = 0$ と仮定する。

$$\begin{aligned} \langle \dot{\tilde{P}}_2(t) \rangle_{\text{ave}} &= \text{Re} \left[\frac{B_0^2 \gamma}{4\hbar^2} \left\langle \sum_{n \neq 0} \sin(\omega t) e^{i(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)t} a_n(t) \int_0^t dt' \sin(\omega t') e^{-i(\varepsilon_0 - \varepsilon_n)t'} a_n^*(t') \right\rangle_{\text{ave}} \right] \\ &= \frac{B_0^2 \gamma}{4\hbar} \sum_{n \neq 0} \frac{1}{2} \langle |a_n(t)|^2 \rangle_{\text{ave}} \omega^2 t^3 + O(t^4) \simeq \frac{B_0^2 \gamma}{8\hbar} [1 - P(t)] \omega^2 t^3. \end{aligned} \quad (22)$$

ここでは次の条件を使った： $|a_0(t)|^2 + \sum_{n \neq 0} |a_n(t)|^2 = 1$ 。式(21)、(22)を式(18)に代入する：

$$\frac{d}{dt} P(t) = -\frac{B_0^2 \gamma}{8\hbar} (\mathcal{N} - 1) \omega^2 t^3 + \frac{B_0^2 \gamma}{8\hbar} [1 - P(t)] \omega^2 t^3. \quad (23)$$

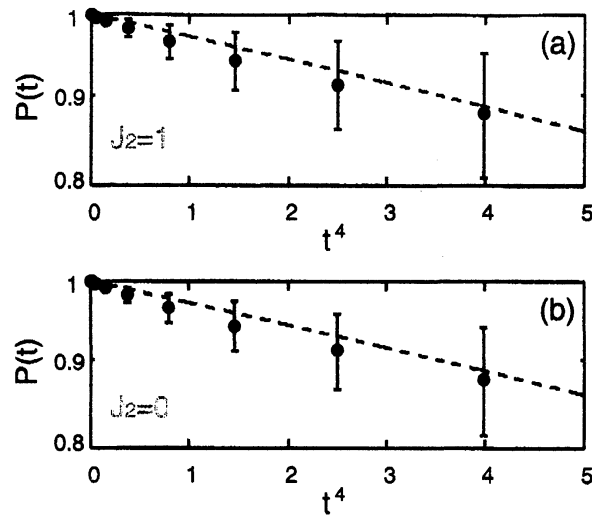


図 1: survival probability $P(t)$: (a) $J_2 = 1.0$ (b) $J_2 = 0$. ここで $\Delta = 0.3$, $B_0 = 0.3$, $\omega = 1.0$. エラーバーつきの点は数値計算結果、破線は理論曲線。

これを、初期条件 $P(0) = 1$ のもとで積分すると、十分短い時間での survival probability の表式が得られる：

$$P(t) = (\mathcal{N} - 1) \exp\left(-\frac{B_0^2 \gamma}{32 \hbar^2} \omega^2 t^4\right) + 2 - \mathcal{N}. \quad (24)$$

式 (24) の中で、無摂動ハミルトニアン \mathcal{H}_0 のエネルギー・スペクトルの性質を表す唯一のパラメタが γ である。 γ は式 (12) で定義されているが、数値的には以下のようにして値を求めることができる：

$$\gamma = \left\langle 4B_0^{-2} \mathcal{N}^{-2} \sum_{n,m} \sum_{j=1}^L |\langle \phi_n | B_j S_j^z | \phi_m \rangle|^2 \right\rangle_{\text{ave}}. \quad (25)$$

実際に計算してみると、 J_2 や Δ にはほとんどよらず、 $L = 10$ かつ $S_{\text{tot}}^z = 0$ のとき $\gamma \simeq 0.0399$ である。このことは、この系のダイナミクスの短時間の振舞いが、無摂動系のエネルギー・スペクトルの特徴とは無関係であるということを意味している。これは、以前の我々のエネルギー拡散に関する研究 [3] の結果とは対照的なものである：エネルギー拡散は J_2 に依存した振舞いを見せていた。その研究 [3] では、無摂動系には同じハミルトニアンを用い、摂動として進行波の磁場を加えていた。これらの比較から考えられることは、本研究において摂動として用いた磁場のランダム性が、動的安定性の振舞いの J_2 への依存性を崩してしまったということである。

式 (24) を数値的に確認しよう。数値計算による結果が図 1 である。数値計算の結果は理論曲線 (破線) によくのっている。また、 $J_2 = 1.0$ と $J_2 = 0$ では、結果にほとんど差が見られない。これは、先に議論した通りである。

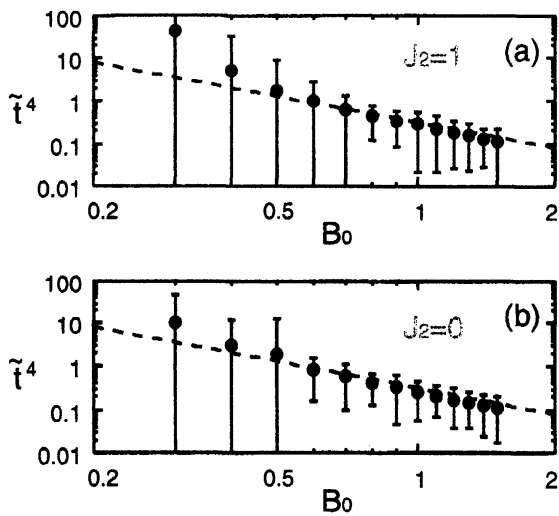


図 2: \tilde{t} の B_0 依存性: (a) $J_2 = 1.0$ 、(b) $J_2 = 0$ 。ここで $\Delta = 0.3$ 、 $\omega = 1.0$ 。

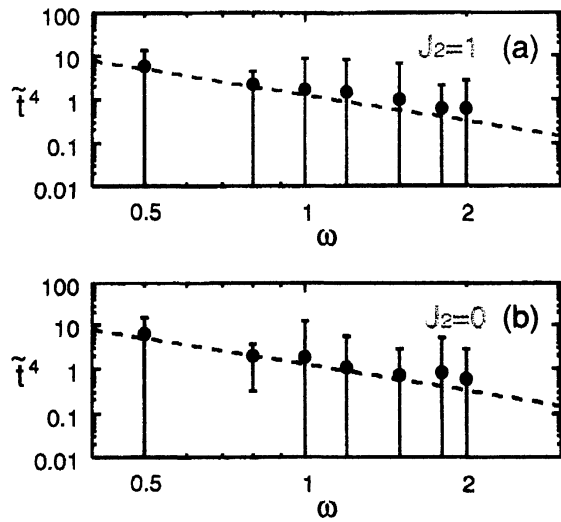


図 3: \tilde{t} の ω 依存性: (a) $J_2 = 1.0$ 、(b) $J_2 = 0$ 。ここで $\Delta = 0.3$ 、 $B_0 = 0.5$ 。

次に $P(t)$ が、ある値 \tilde{p} まで減少するのにかかる時間 \tilde{t} を調べてみる。式 (24) で $P(t) = \tilde{p}$ として

$$\tilde{t}^4 = \frac{32\hbar^2}{\gamma B_0^2 \omega^2} \ln \frac{\mathcal{N} - 1}{\mathcal{N} + \tilde{p} - 2} \simeq \frac{32\hbar^2}{\gamma B_0^2 \omega^2} \frac{1 - \tilde{p}}{\mathcal{N}}. \quad (26)$$

ここでは $\tilde{p} = 0.9$ として、数値計算した結果を示す。図 2 は \tilde{t}^4 の B_0 依存性を示している。 B_0 の小さい領域を除いては、 $J_2 = 1.0$ でも $J_2 = 0$ でも同一の理論曲線によく一致している。 B_0 の小さい領域においては、無摂動系の低エネルギー領域で比較的大きなギャップが存在することが影響していると考えられる。図 3 は \tilde{t}^4 の ω 依存性を示しており、図 2 と同様に $J_2 = 1.0$ でも $J_2 = 0$ でも同一の理論曲線によく一致している。

4 比較的長時間の振舞い

比較的長時間の $P(t)$ の振舞いは解析的に調べることは難しいので、数値的に計算した結果のみを示す。図 4 には、 $P(t)$ が周期的に振動しながら減衰している様子が見られる。その振動数は約 2ω 、すなわち摂動の磁場の振動数の 2 倍である。その理由は、 $P(t)$ が振動数 ω の三角関数の積を含んでいるからだと考えられる。 $J_2 = 1.0$ でも $J_2 = 0$ でも $P(t)$ の振舞いにそれほど大きな違いは見られない。また、長時間後でも、扱っている系が有限であるため、 $P(t)$ はある程度の値までしか下がらない。

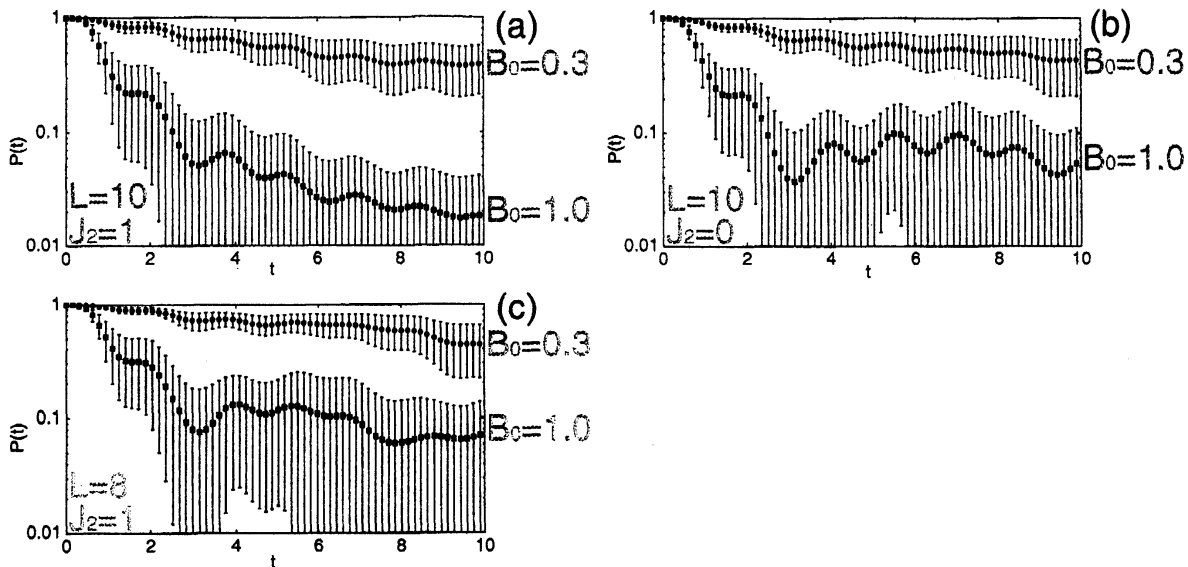


図 4: 比較的長時間の $P(t)$ の振舞い: (a) $L = 10, J_2 = 1.0$; (b) $L = 10, J_2 = 0$; (c) $L = 8, J_2 = 1.0$ 。ここで $\Delta = 0.3, \omega = 2.0$ 。

5 まとめと結論

量子多体系の基底状態の動的安定性を調べるために、空間的にランダムで時間的には周期的な振動磁場中の量子 XXZ スピン差の survival probability $P(t)$ を議論した。 $P(t)$ の短時間の振舞いを解析的に導き、それを数値計算によって確認した。 $P(t)$ の振舞いは、無摂動ハミルトニアンの性質 (次近接相互作用 J_2 、つまりカオス的か可積分か) には、ほとんど依存しなかった。すなわち、この系のダイナミクスは主に摂動 (空間的にランダムな振動磁場) の性質を反映しているといえる。この結果は、摂動が空間的にも時間的にも規則的であった場合のエネルギー拡散の研究結果 [3] とは対照的である。このことから、摂動の加え方によって、動的安定性の振舞いの傾向は大きく異なりうるということが言える。

参考文献

- [1] 例えば M. Wilkinson and E.J. Austin, J. Phys. A **28** (1995) 2277; D. Cohen, Lect. Notes Phys. **597** (2002) 317; T. Prosen, Phys. Rev. E **65** (2002) 036208.
- [2] K. Kudo and T. Deguchi, J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 1992.
- [3] K. Kudo and K. Nakamura, Phys. Rev. B **71** (2005) 144427.