量子格点系统的平衡时间尺度

黄志强^{1,2}, 蔡庆宇^{1*}

1. 中国科学院武汉物理与数学研究所, 波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071;

2. 中国科学院大学, 北京 100049

* 联系人, E-mail: qycui@wipm.ac.cn

2018-04-15 收稿, 2018-05-17 修回, 2018-05-18 接受, 2018-09-30 网络版发表

国家自然科学基金(11725524)资助

摘要 平衡时间尺度问题是理解量子系统平衡化过程的一个重要的问题, 此问题尚无一个广泛适用而又准确的解答. 本文研究了量子格点系统的局域平衡时间尺度问题, 通过平衡与纠缠熵的关系, 给出一种新的平衡的判据, 相对其他判据, Rényi熵的计算更简单, 能与信息的传播相联系. 对平衡时间上界, 我们沿用观测上时间平均平衡这个判据. 由于这个判据与观测对应, 因此定义准确, 但计算比较复杂. 通过适当地假设系统的初始状态, 我们给出了一个新的结果. 由于对系统哈密顿量没有限制, 此结果适用范围很广. 此结果给出的平衡时间与具体观测相关, 正比于能隙坐标下观测算符与初始密度矩阵乘积分布的二阶Rényi熵. 当观测限于一个小区域时, 平衡时间上界可被限制得很小. 对于平衡时间下界, 通过计算短程相互作用、指数衰减相互作用、长程相互作用系统的局域二阶Rényi熵变化率, 我们给出了这些系统平衡时间新的下界. 本文得到的平衡时间上下界对于理解量子系统平衡化具有重要意义.

关键词 量子格点系统, 局域平衡时间, 局域 Rényi 熵

物理系统的热力学平衡问题一直是统计力学中的重要课题. 这个问题包含不同层面, 首先是如何定义系统热力学平衡, 其次是系统能否达到平衡, 再次是什么时候平衡, 最后就是系统平衡态的性质. 本文主要研究平衡时间方面, 在介绍平衡时间前, 首先介绍一些平衡的定义及一些不能达到平衡的系统.

对于热力学平衡, 它的定义并不是唯一的, 下面给出几种经典的平衡定义: (1) 观测随时间不再变化时, 系统达到平衡^[1]; (2) 不同的强度量可以定义不同的平衡, 当系统各部分的各种强度量都变得均匀时, 系统达到真正平衡^[2]; (3) 在指定的时间段内, 强度量不随时间变化, 且系统各部分间的能流、粒子流为零时, 系统达到平衡^[3]. 经典的热力学中, 平衡一般指系统各态历经, 它是基本假设之一. 在量子层面

上, 人们期望从动力学角度来解释平衡这一现象. 对于宏观物体, 它有很多宏观的输运性质, 因此通过强度量来判断平衡会非常方便. 但是对于一个封闭的量子系统, 它的演化会复杂得多, 这时可以通过时间平均来判断系统是否达到平衡: 若系统达到平衡, 则其平均而言会长期处于某个状态, 通过对物理量的时间平均, 可得到很多关于平衡状态的信息.

从强度量均匀这个要求来看, 为了达到平衡, 系统的各个部分必然要交换能量、粒子. 当系统是绝缘体时, 系统各部分无法输运能量及粒子, 这样的系统必然无法达到平衡. 绝缘体中最著名的例子就是Anderson局域化^[4], 但是Anderson局域化理论中只有无序强度, 没有固定的相互作用. 在实际情况中, 系统各部分之间总会有相互作用, 因此很难实现理想

引用格式: 黄志强, 蔡庆宇. 量子格点系统的平衡时间尺度. 科学通报, 2018, 63: 3096–3102

Huang Z Q, Cai Q Y. The equilibration time scales of the quantum lattice model (in Chinese). Chin Sci Bull, 2018, 63: 3096–3102, doi: 10.1360/N972018-00361

的Anderson绝缘体. 对于有相互作用的系统, 其实同样可以有绝缘现象, 那就是多体局域化^[5,6]. 另外, 对于一些可积系统, 它们也无法达到平衡^[7,8]. 不过很多可积系统在微扰下并不稳定, 在加入弱的相互作用之后, 它们会变得可以到达平衡^[9].

对于可以达到平衡的物理体系, 它何时能达到平衡是非常重要的, 给出一个广泛但又实用的平衡时间尺度并不容易. 对于平衡时间, 一个宽泛的界限很早就被给出^[10]. 当系统的初始态在能量本征态上的分布很集中的时候, 平衡时间可以非常长; 而当初始态在能量本征态上的分布很分散时, 平衡时间则可以非常短. 这类似于能量-时间不确定关系. 但是Goldstein等人^[10]给出的平衡时间上界会随系统的格点数指数的增加; 另一方面, 它给出的平衡时间的下界会反比于系统格点数的平方根. 大多数的物理系统的行为都不会如此极端, 这使得他们的结果没有太大的实际价值. 近年来, 有在此基础上关于平衡时间上界的进一步研究, 得到了更小的平衡时间上界^[11]. 但是, 该方法难以给出平衡时间的下界, 而平衡时间的下界表征系统达到平衡所需的最短时间, 具有重要研究意义.

1 平衡时间尺度

为了研究平衡时间尺度, 我们首先需要明确平衡以及平衡时间上下界的定义. 这里使用前面提到的时间平均平衡, 在时间平均下, 系统会集中分布在某个状态附近^[12], 而这个状态就称为平衡态. 假设系统的初始态为 ρ^0 , 则可证明其的平衡态 w 一定为能量表象下退相干的结果^[11]. 显然, 系统不同的初始态对应的平衡态不同. 判断系统平衡最直接的方法是计算系统状态与平衡状态差的算子范数, 这里称之为判据一. 但系统状态并不会无穷趋近于平衡状态, 即相应的算子范数不会随着时间的增大而无穷趋近于零. 因此, 平衡时间并不是一个精确的时间点, 而应是一个范围. García-Pintos等人^[11]认为, 计算系统状态与平衡状态差的算子范数的时间平均小到一定程度之后, 系统就达到平衡了, 这个时间就是平衡时间的上界. 如果在给定的时间范围内, 系统状态与平衡状态差的算子范数一直很大, 那么系统必然不会在这段时间内达到平衡. 因此本文认为系统状态与平衡状态差的算符范数首次减小到一定程度之后, 系统才可能满足平衡的要求, 这个时间可作为

平衡时间的下界.

判据一最直接, 但不便于理论估算, 而且判据一也过强. García-Pintos等人^[11]给出另一种方法: 计算一个观测量对于一个系统态的期望值. 若系统状态与平衡状态对于某个观测量的期望值接近, 则认为系统达到平衡, 这里称之为判据二. 显然, 由判据二得到的平衡时间与观测算符的选取有很大关系. 要得到与观测量无关的平衡时间, 可要求系统状态与平衡状态在所有的物理观测下接近, 这里将它称为判据三. 对于判据三, 一旦超出平衡时间上界, 那么任何观测无法区分系统与其平衡态, 即系统是物理上达到平衡了. 判据一、三、二依次减弱, 一般来说我们有判据三就完全足够了, 由于能够通过选取观测量算符从判据二得到判据三, 因此计算判据二是最重要的. García-Pintos等人^[11]就是基于判据二, 给出了一个较小的平衡时间上界. 但是使用判据二不易估计平衡时间的下界, 本文提出平衡判据四, 即系统状态与平衡状态的二阶Rényi熵接近. 由于Rényi熵连续、无奇点, 因此判据一强于判据四. 判据四与具体观测无关, 判据四与判据三没有直接的强弱关系. 由于判据一强于判据四, 因此由判据四得到的平衡时间的下界一定是正确的. 判据三与判据四是根据系统的不同性质来判断是否达到平衡的, 由于判据三与观测直接联系, 因此判据三更为准确, 但是判据三计算比较复杂, 不便于做某些广泛估计. 而判据四计算非常简单, 可以得到一些有用的结论. 比如前面提到的多体局域化系统, 它的纠缠熵满足面积率^[10]. 因此由判据四, 易知这种系统无法达到平衡.

二阶Rényi熵与量子系统的平衡问题直接相关^[14,15]. 关于计算二阶Rényi熵随时间的增长, 也已经有了一部分工作: 例如用Haar测度上的随机么正演化, 证明系统二阶Rényi熵随着演化的次数增加, 且集中分布在一个小的区域内^[16]. 显然, 在这个随机演化过程中, 每次演化的时间不好确定. 若我们取哈密顿量 H 的Schatten范数 $\|H\|_\infty$, 那么 $2\pi/\|H\|_\infty$ 显然是取遍Haar测度的时间的下界. 不过这个时间太短, 意义不大. 另外, 在Hubbard模型中, 有人通过对因果光锥内外的关联做出限制, 十分精确地计算了系统的弛豫时间^[17]. 不过这个计算很难用于其他一般性的模型. 对于更一般的情形, 有研究利用Lieb-Robinson界给出了二阶Rényi熵可以随时间线性增长的结论^[14,18], 这个结果只适用于一维的具有短程相互作用

用的模型. 根据Huang和Guo^[20]的结果, 在高维的具有指数衰减相互作用和长程相互作用的体系中有很多结果是类似的. 因此, 在本文中, 我们将对任意维量子格点系统, 考虑短程、指数衰减以及长程相互作用, 分别给出二阶Rényi熵的最大增长率, 并以此得到平衡时间的下界.

2 平衡时间上界

为了完整地表述平衡时间尺度问题, 我们这里回顾一些基础知识并改进García-Pintos等人^[11]给出的平衡尺度上界.

根据前面定义, 系统的平衡态为 $w = \langle \rho(t) \rangle_\infty$, 其中 $\rho(t)$ 是系统的密度矩阵, $\langle f(t) \rangle_T = \int_0^T f(t) dt / T$ 是时间平均. 系统的时间演化为

$$\rho_{jk}(t) = \rho_{jk}(0) e^{-it(E_k - E_j)}, \quad (1)$$

由此可以得到 $w_{jk, E_j \neq E_k} = 0$, $w_{jk, E_j = E_k} = \rho_{jk}(0)$. 判据二对应于下面的观测的涨落平均

$$\mathcal{D}(A, H, \rho(t)) := \frac{1}{4 \|A\|_\infty^2} |\text{Tr}(A\rho(t) - Aw)|^2, \quad (2)$$

其中 A 对应观测算符. 对于能隙不简并的哈密顿量, 还可证明它与二阶Rényi熵有如下联系^[14]

$$\text{Var}(A, H, \rho) := 4 \langle \mathcal{D}(A, H, \rho(t)) \rangle_\infty \leq e^{-S_2(w)}, \quad (3)$$

其中 S_α 是Rényi熵阶数:

$$S_\alpha := \frac{1}{1-\alpha} \log(\text{Tr}(\rho^\alpha)), \quad (4)$$

公式(3)表明, 系统稳态的二阶Rényi熵给出了系统演化态与稳态间协方差的上界. 系统稳态的二阶Rényi熵越大, 演化态的涨落偏离平衡态的幅度越小.

根据定义,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{D}(A, H, \rho(t)) \rangle_T &= \frac{1}{4} \left\langle \left| \sum_{j,k} e^{-i(E_j - E_k)t} (\rho_{jk} - w_{jk}) \frac{A_{kj}}{\|A\|_\infty} \right|^2 \right\rangle_T \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta} v_\alpha v_\beta^* \left\langle e^{-i(G_\alpha - G_\beta)t} \right\rangle_T, \end{aligned} \quad (5)$$

判据二平衡时间上界的需要足够的小. 其中 $v_\alpha = v_{(j,k)} = \rho_{jk} A_{kj} / \|A\|_\infty$, $G_\alpha = E_j - E_k$. 显然, 公式(5)中只有平衡态那部分是不随时间变化的, 其余部分都会因为涨落的平均而趋于零. 为了计算上界, García-Pintos等人^[11]使用了如下方法: 由于 $\mathcal{D}(A, H, \rho(t))$ 是

正的函数, 有

$$\langle \mathcal{D}(A, H, \rho(t)) \rangle_T \leq \frac{5\pi}{4} \langle \mathcal{D}(A, H, \rho(t)) \rangle_{L_T}, \quad (6)$$

其中

$$\langle f(t) \rangle_{L_T} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{T}{T^2 + (t - T/2)^2} f(t) \frac{dt}{\pi}, \quad (7)$$

与时间平均积分相比, 这个公式增大了正函数时间平均区间内的大小, 同时将区间外的部分也加进去了, 因此会大于原来的时间平均积分. 由于 $|\langle e^{ivt} \rangle_{L_T}| = e^{-|v|T}$, 可得

$$\langle \mathcal{D}(A, H, \rho(t)) \rangle_T \leq \frac{5\pi}{16} \sum_{\alpha\beta} v_\alpha v_\beta^* e^{-|G_\alpha - G_\beta|T}. \quad (8)$$

对比公式(5)与(8), 显然平衡态的部分增加了, 非稳态的部分减少了. 如果我们把平衡态的那部分挑出来, 参考公式(3)的证明, 有

$$\langle \mathcal{D}(A, H, \rho(t)) \rangle_T \leq \frac{5\pi}{16} e^{-S_2(w)} + \frac{5\pi}{16} \sum_{\alpha\beta, G_\alpha \neq G_\beta} v_\alpha v_\beta^* e^{-|G_\alpha - G_\beta|T}. \quad (9)$$

为了方便计算, 利用 $v_\alpha v_\beta \leq Q^2 p_\alpha p_\beta$ 对各项取绝对值并归一化, 其中 $p_\alpha = |v_\alpha|/Q$, $Q = \sum_\alpha |v_\alpha|$. 显然, 这使得 $\sum_\alpha p_\alpha = 1$, 因此 p_α 可看做概率分布.

这里不重复García-Pintos等人^[11]给出的计算平衡时间上界的步骤, 因为它的最后计算结果需要一些不明确的条件. 这里假设 p_α 在 G_α 上的分布是都多个峰值组成, 每个峰值相距较远, 而且每个峰值近似为凸函数(一些实际例子中, 初态在能量上是这样的多个离散峰值分布. 若系统能隙不简并, 则 ρ_{jk} 在 G_α 上也会是多个离散峰值分布. A_{kj} 在指定的 G_α 附近应该近乎不变, 因此 p_α 与 ρ_{jk} 相比, 只有峰的高度发生了变化, 还是多个离散峰值分布. 至于凸函数条件, 一般峰的半高以上部分常为凸函数, 而半高以下对 p_α 的贡献相对较小, 这使得我们的估计比较准确). 在这个条件下, 公式(9)中的求和可对各峰单独计算之后再求和

$$\sum_{\alpha\beta, G_\alpha \neq G_\beta} p_\alpha p_\beta \approx \sum_{\Pi} \sum_{\alpha, \beta \in \Pi; G_\alpha \neq G_\beta} p_\alpha p_\beta. \quad (10)$$

对于凸函数, 有 $p_\alpha p_{\alpha+\Delta} \leq p_{\alpha+\Delta/2}^2$, 于是

$$\sum_{\alpha, \beta \in \Pi, G_\alpha \neq G_\beta} p_\alpha p_\beta \leq \sum_{\alpha \in \Pi, \Delta \in [\Delta_{\min}, \infty]} p_{\alpha+\Delta/2}^2 e^{-\Delta T} \approx \sum_{\alpha \in \Pi} p_\alpha^2 \frac{e^{-\Delta_{\min} T}}{T}, \quad (11)$$

其中 $\Delta_{\min}$ 为系统的最小能隙. 而 $\sum_{\Pi} \sum_{\alpha \in \Pi} P_{\alpha}^2 = S_2(p)$, 对应 p 分布的二阶Rényi熵. 因此, 最终可得

$$\langle \mathcal{D}(A, H, \rho(t)) \rangle_T \leq \frac{5\pi}{16} e^{-S_2(w)} + \frac{5\pi}{16} S_2(p) Q^2 \frac{e^{-\Delta_{\min} T}}{T}. \quad (12)$$

公式的第一项与公式(3)的结果有大致的对应关系, 公式的第二项显然随时间的增长迅速减小. 有了这个公式, 可以根据需要来确定何时系统达到平衡, 注意这里给出的是系统的平衡时间的上界.

由于 Q 可以随格点数指数增大, 这里给出的平衡时间还是过长. 事实上, 对于大系统, 其整体的平衡本来就需要较长的时间. 因此, 一般都是研究系统的局域平衡. 这样 Q 就不会太大. 但这时前面的封闭系统演化的公式不太适用, 对此, 可以继续参照García-Pintos等人^[11]给出的对希尔伯特空间的截断的方法来改写相关结果. 这些改写不影响上述计算, 将García-Pintos等人^[11]给出的定义(8)不等式右边第一项改成

$$\frac{5\pi}{16} e^{-S_2(w)} + \frac{5\pi}{16} S_2(p) Q_2^2 \frac{e^{-\Delta_{\min} T}}{T}, \quad (13)$$

就可以得到改写后的结果.

García-Pintos等^[11]给出的对希尔伯特空间的截断的计算是基于局域观测以外的部分处于正则系综假设进行的, 事实上根据Huang和Guo^[20]及Iyoda等人^[21]的讨论, 对于足够大的系统, 局域观测往往无法分辨其他部分是否处于正则系综. 因此这个截断操作适用的范围可以非常广, 并不限于局域观测以外的部分处于正则系综的情况.

3 平衡时间下界

由判据二的具体表达(2)来看, 其变化形式非常复杂, 直接计算什么时候它能变得很小并不容易. 因此这里使用判据四来计算平衡时间的下界. 这里研究的是系统初态为纯态的情况, 因此初态的二阶Rényi熵 $S_2(\rho^0)$ 为零. 对于封闭系统, 若初态为纯态, 那么它的演化态还是纯态, 因此其演化态的二阶Rényi熵会一直为零, 导致我们无法计算平衡时间尺度. 因此, 基于判据四的计算也只能研究局域系统的平衡时间下界. 对于局域系统, Gong等人^[22]与Van等人^[23]计算了它的一阶Rényi熵的变化率. 参考他们的方法, 我们将计算二阶Rényi熵的变化率, 并以此得到平衡时间的下界.

假设一个封闭的量子格点系统, 我们感兴趣的部分为A, 其余部分为B, 那么A的Rényi熵为

$$\begin{aligned} S_{\alpha}^A(t) &= \frac{1}{1-\alpha} \log \left(\text{Tr}_{AB} \left(\rho_{AB}(t) (\rho_A(t) \otimes I_B^{\alpha-1}) \right) \right) \\ &= \frac{1}{1-\alpha} \log \left(\text{Tr}_{AB} \left(\rho_{AB}(0) (\rho_A(0) \otimes I_B^{\alpha-1}) \right) \right) \\ &\quad + \int_0^t dt' \frac{-i\alpha}{1-\alpha} \frac{\text{Tr}_{AB} \left([\rho_{AB}(t'), H] (\rho_A(t') \otimes I_B^{\alpha-1}) \right)}{\text{Tr}_A \left(\rho_A^{\alpha}(t') \right)}, \end{aligned} \quad (14)$$

其中 H 是指封闭系统总的哈密顿量, I 为单位矩阵. 此结果只对 $\alpha \neq 1$ 部分的Rényi熵成立. 此公式由Rényi熵对时间求导再积分得到. 不是所有的 H 都会对上面公式有贡献, 只有那些让A,B间有相互作用的部分, 才不为零. 例如A的局域算符 $O_A \otimes I_B$ 及B的局域算符 $I_A \otimes O_B$ 会有下面的结果

$$\begin{aligned} &\text{Tr}_{AB} \left([\rho_{AB}(t'), O_A \otimes I_B] (\rho_A(t') \otimes I_B^{\alpha-1}) \right) \\ &= \text{Tr}_A \left(O_A [\rho_A^{\alpha-1}(t'), \rho_A(t')] \right) = 0; \\ &\text{Tr}_{AB} \left([\rho_{AB}(t'), I_A \otimes O_B] (\rho_A(t') \otimes I_B^{\alpha-1}) \right) \\ &= \text{Tr}_{AB} \left(\rho_{AB}(t') [I_A \otimes O_B, (\rho_A(t') \otimes I_B^{\alpha-1})] \right) = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

设哈密顿量中A, B间有相互作用的部分为 H_I , $X \equiv \rho_{AB}(t)/d_B$, $Y \equiv \rho_A(t') \otimes I_B/d_B$, d_B 为B部分的希尔伯特空间维度. 它们显然满足 $\text{Tr}X = p^{1/2}$, $\text{Tr}Y = 1$, $\|XY^{-1}\|_{\infty} \equiv \|Z\|_{\infty} \leq 1$. 由这些, 再根据 X, Y 都是厄米正定矩阵, 会有下面的不等关系

$$\begin{aligned} &\frac{\text{Tr}_{AB} \left([\rho_{AB}(t'), H_I] (\rho_A(t') \otimes I_B^{\alpha-1}) \right)}{\text{Tr}_A \left(\rho_A^{\alpha}(t') \right)} \\ &= \frac{\text{Tr}_{AB} \left([X, H_I] Y^{\alpha-1} \right)}{\text{Tr} Y^{\alpha}} = 2 \frac{\text{Tr} \left([Z, Y^{\alpha}] H_I \right)}{\text{Tr} Y^{\alpha}} \leq 4 \|H_I\|_{\infty}. \end{aligned} \quad (16)$$

利用此关系及初始Rényi熵为零, 可得A的Rényi熵(14)的上界

$$S_{\alpha}^A(t) \leq \left| \frac{4\alpha}{1-\alpha} \right| \|H_I\|_{\infty} t. \quad (17)$$

由此公式, 我们只需计算A,B相互作用部分的哈密顿量的算子范数即可.

这里各种相互作用的定义如下: 对于短程相互作用系统, 格点只与它的最近邻相互作用, 作用算符 h_i 只对相互作用的两个格点的希尔伯特空间有作用, 且满足 $\|h_i\|_{\infty} \leq J$; 对于指数衰减相互作用系统, 格

点与其他所有的格点相互作用,作用算符 h_i 的强度与格点距离 $d(x,y)$ 相关

$$\|h_i\|_{\infty} \leq \lambda_0 \exp[-(\mu+\epsilon)d(x,y)]. \quad (18)$$

同样,对于任意一个 h_i ,它只对相互作用的两个格点的希尔伯特空间有作用;在长程相互作用系统中,格点同样与其他所有的格点相互作用,作用算符 h_i 的强度与格点距离有关系

$$\|h_i\|_{\infty} \leq \frac{\lambda_0}{d(x,y)^{\epsilon}}. \quad (19)$$

同样,对于任意一个 h_i ,它只对相互作用的两个格点的希尔伯特空间有作用.

对于短程相互作用,只有A,B接触面 ∂V 部分的连接有贡献,作用强度的上限为 J ,因此它的Rényi熵

$$S_{\alpha}^A(t) \leq \left| \frac{4\alpha}{1-\alpha} \right| J |\partial V| t. \quad (20)$$

对于指数衰减相互作用和长程相互作用系统,A中所有的点与B中所有的点都有相互作用,但其作用强度会随距离迅速减弱.假设A中离接触面距离 r 的格点数为 $S(r)$,则对于这些点,只有距离 $r' > r$ 的格点才可能属于B,设距A中点 r' 的属于B的格点不超过 $S'(r')$.那么,可得

$$\|H_I\|_{\infty} \leq \sum_{r=1}^{r_{\max}} S(r) \int_r^{\infty} dr' S'(r') h_r, \quad (21)$$

其中 $r_{\max}$ 代表A中格点离 ∂V 最远的距离.假设系统空间维度为 D ,

$$S(r) \leq |\partial V|; S'(r') \leq \frac{D\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2+1)} r'^{D-1}. \quad (22)$$

以公式(22)的情况为例(比如A是总系统内部一块区域,或者A,B是柱体切开的两边;总系统为正方格

点,距离 r 的格点对应超球面积),对于指数衰减相互作用系统,有

$$S_{\alpha}^A(t) \leq \left| \frac{4\alpha}{1-\alpha} \right| \lambda_0 |\partial V| \frac{D\pi^{D/2}(\mu+\epsilon)^D}{\Gamma(D/2+1)} \times \sum_{r=1}^{r_{\max}} \Gamma\left(D, \frac{r}{\mu+\epsilon}\right) t. \quad (23)$$

对于长程相互作用,有

$$S_{\alpha}^A(t) \leq \left| \frac{4\alpha}{1-\alpha} \right| \lambda_0 |\partial V| \times \frac{D\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2+1)(D-\epsilon)} \sum_{r=1}^{r_{\max}} r^{D-\epsilon} t. \quad (24)$$

从公式(23)和(24)可看出, $r_{\max}$ 很小时,增大它会使得Rényi熵变化率有较大的变化.当 $r_{\max}$ 比较大时,求和部分会趋于一个常数.此时,综合前面的表达式,会有

$$S_{\alpha}^A(t) \leq C(D, h, \alpha) |\partial V| t, \quad (25)$$

其中 $C(D, h, \alpha)$ 是与空间维度、相互作用、Rényi熵阶数相关的正的常数,具体形式由公式(20)、(23)和(24)给出.根据Rényi变化的形式,易得平衡时间的下界为

$$T = \frac{S_2(w_A)}{C(D, h, 2) |\partial V|}. \quad (26)$$

一般而言, $S_2(w_A)$ 可以正比于A的格点数,因此上面平衡时间的下界与Lieb-Robinson时间 $r_{\max}/v_{\text{LR}}$ 相关.

4 结论与展望

本文研究了封闭量子格点系统的局域平衡时间尺度.首先明确了平衡时间上下界的定义,并给出了判断平衡的一个新判据.对于平衡时间上界,给出了明确而且定义清晰的结果.对于平衡时间下界,我们通过计算局域Rényi熵变化率来给出明确的表达式.

本文所考虑系统的初态为纯态.近年来,初态之间存在纠缠或关联的体系受到了广泛关注^[24-26].这些体系中的平衡时间问题值得进一步研究.

致谢 感谢中国科学院武汉物理与数学研究所郭肖侃对本工作给予的有益讨论.

参考文献

- 1 Waldram J R. The Theory of Thermodynamics. Cambridge: Cambridge University Press, 1985
- 2 Bailyn M. A survey of thermodynamics. J Stat Phys, 1996, 83: 791-792
- 3 Kirkwood J G, Oppenheim I. Chemical Thermodynamics. York: McGraw Hill, 1961
- 4 Abrahams E. 50 Years of Anderson Localization. Los Angeles: World Scientific, 2010
- 5 Altshuler B L, Gefen Y. Quasiparticle lifetime in a finite system: Anon-perturbative approach. Phys Rev Lett, 1996, 78: 2803-2806
- 6 Basko D M, Aleiner I L, Altshuler B L. Metal-insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-

- particle states. *Ann Phys New York*, 2005, 321: 1126–1205
- 7 Jin F, Neuhaus T, Michielsen K, et al. Equilibration and thermalization of classical systems. *New J Phys*, 2012, 15: 33009
- 8 Andrei N. Beautiful Models: 70 years of exactly solved quantum many-body problems. *Phys Today*, 2004, 59: 58–60
- 9 D'Alessio L, Kafri Y, Polkovnikov A, et al. From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics. *Adv Phys*, 2015, 65: 239–362
- 10 Goldstein S, Hara T, Tasaki H. Time scales in the approach to equilibrium of macroscopic quantum systems. *Phys Rev Lett*, 2013, 111: 140401
- 11 García-Pintos L P, Linden N, Malabarba A S, et al. Equilibration time scales of physically relevant observables. *Phys Rev X*, 2015, 7: 031027
- 12 Wilming H, Gohl M, Krumnow C, et al. Towards local equilibration in closed interacting quantum many-body systems. 2017, arXiv: 1704.06291
- 13 Abanin D, Altman E, Bloch I, et al. Ergodicity, entanglement, and many-body localization. 2018, arXiv:1804.11065
- 14 Short A J. Equilibration of quantum systems and subsystems. *New J Phys*, 2010, 13: 228–236
- 15 Wilming H, Gohl M, Roth I, et al. Entanglement-ergodic quantum systems equilibrate exponentially well. 2018, arXiv: 1802.02052
- 16 Hamma A, Santra S, Zanardi P. Quantum entanglement in random physical states. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 040502
- 17 Cramer M, Dawson C M, Eisert J, et al. Exact relaxation in a class of non-equilibrium quantum lattice systems. *Phys Rev Lett*, 2007, 100: 030602
- 18 Bravyi S, Hastings M B, Verstraete F. Lieb-Robinson bounds and the generation of correlations and topological quantum order. *Phys Rev Lett*, 2006, 97: 050401
- 19 Eisert J, Osborne T J. General entanglement scaling laws from time evolution. *Phys Rev Lett*, 2006, 97: 150404
- 20 Huang Z Q, Guo X K. Lieb-Robinson bound at finite temperature. 2017, arXiv: 1711.06977
- 21 Iyoda E, Kaneko K, Sagawa T. Fluctuation theorem for many-body pure quantum States. *Phys Rev Lett*, 2017, 119: 100601
- 22 Gong Z X, Foss-Feig M, Brandão F G, et al. Entanglement area laws for long-range interacting systems. *Phys Rev Lett*, 2017, 119: 050501
- 23 Van A K, Mariën M, Verstraete F. Entanglement rates and area laws. *Phys Rev Lett*, 2013, 111: 170501
- 24 Sagawa T, Ueda M. Fluctuation theorem with information exchange: Role of correlations in stochastic thermodynamics. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 180602
- 25 Strasberg P, Schaller G, Brandes T, et al. Quantum and information thermodynamics: Unifying framework based on repeated interactions. *Phys Rev X*, 2017, 7: 021003
- 26 Bera M N, Riera A, Lewenstein M, et al. Generalized laws of thermodynamics in the presence of correlations. *Nat Commun*, 2017, 8: 2180–2185

Summary for “量子格点系统的平衡时间尺度”

The equilibration time scales of the quantum lattice model

Zhiqiang Huang^{1,2} & Qingyu Cai^{1*}¹ State Key Laboratory of Magnetic Resonances and Atomic and Molecular Physics, Wuhan Institute of Physics and Mathematics, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071, China;² University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

* Corresponding author, E-mail: qycail@wipm.ac.cn

Finding the equilibration time scale is an important open question in studying the equilibration of quantum systems. There are many kinds of systems that are unable to achieve equilibration, such as Anderson insulator, many-body localization systems and some integrable systems. For those systems that can reach equilibration, it was proved that there exists a general equilibration time scale. But these upper bounds are unrealistically long, and the lower bounds are also unrealistically short. How to get an accurate and general equilibration time scale is still unclear. In this paper, we study local equilibration time scales in quantum lattice systems. With the relation between equilibration and entanglement entropy, we define a new criterion for equilibration. This criterion is based on Rényi entropy, which is simpler for calculation. Moreover, the production of Rényi entropy is highly dependent on the spreading of information, and hence the tools developed in quantum information theory can help a lot. For the upper bound of equilibration time, we use the normal criterion of the time average of the fluctuation of the observation. This equilibration criterion is assessed with concrete observable operator, hence it is more accurate than the criterion of Rényi entropy. But this criterion is more complicated for calculation. With an appropriate assumption about the initial state, we present a new upper bound of equilibration time. Since the results are not constrained by the Hamiltonian of the system, this bound can be applied to various situations. If we are concerned with the local equilibration, we can limit the observation to a small region. If the whole system is big enough, the local observation would always find that the rest part is staying at the canonical ensemble, so that the local equilibration time will not increase with the size of whole system. When the local region is small enough, the upper bound of equilibration time can be much shorter. The local Rényi entropy has close relation to the propagation of information. The limitation of the speed of information propagation in a quantum lattice system can be given by the Lieb-Robinson bound, with which we evaluate the production rate of local 2-Rényi entropy. With these, we give a new lower bound of equilibration time for systems whose interactions are respectively short-range, exponentially-decaying and long-range. In earlier works, the lower bound of equilibration time is equal to the Lieb-Robinson time of the local system. In our rigorous proof, however, the lower bound is related to the strength of hopping, which also decides the Lieb-Robinson velocity. This means the equilibration time is related to the Lieb-Robinson time indeed. But the strictly equal relation may not hold. These new bounds are important to understanding the process of quantum equilibration.

quantum lattice system, local equilibration time scale, local Rényi entropy

doi: 10.1360/N972018-00361