様式Ｃ－１９

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成２４年５月３１日現在

機関番号：１４４０１
研究種目：若手研究（Ｂ）
研究期間：2008～2011
課題番号：20740214
研究課題名（和文）　量子絡み合いと幾何学的位相による密度行列繰り込み群の新展開

研究課題名（英文）　New Development of the Density Matrix Renormalization Group Method based on Quantum Entanglement and Geometrical Phases

研究代表者
丸山　勲（MARUYAMA ISAO）
大阪大学・基礎工学研究科・特任助教（常勤）
研究者番号：20422339

研究成果の概要（和文）：強力な数値計算手法である密度行列繰り込み群の基礎には行列積状態がある。その行列積状態について、数値計算及び解析計算（厳密解）からのアプローチが成功し、成果を論文として発表できた。双方のアプローチにおいて、一様系を扱ったにも関わらず境界（行列）が重要であった事は興味深い。さらに、格子系に限られてきた行列積状態の連続空間への拡張が厳密解から得られた。この拡張は、現実の連続空間での計算を行う上で、重要な発見である。

研究成果の概要（英文）：The matrix product state (MPS) is used as a variational state in the density matrix renormalization group (DMRG) method. We studied the MPS both numerically and analytically and published the papers that show the importance of the boundary matrix. In the exact solution, we obtained an extension of the MPS from the lattice toward the continuous space.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
２００８年度	800,000	240,000	1,040,000
２００９年度	500,000	150,000	650,000
２０１０年度	500,000	150,000	650,000
２０１１年度	500,000	150,000	650,000
年度			
総　計	2,300,000	690,000	2,990,000

研究分野：数理物理・物性基礎
科研費の分科・細目：計算物理学
キーワード：計算物理・物性物理・情報基礎・幾何学・密度行列繰り込み群

１．研究開始当初の背景

(1)従来の量子力学の理論では、半導体におけるバンドギャップや磁性体の磁化など物理量が系の性質を決定する際の主役となってきた。このような古典的対応物のある観測量を用いる方法以外に、近年、波動関数自体の性質が注目を浴びている。このような波動関数自身の性質の代表的なものとして、幾何学的位相と量子絡み合いが挙げられる。

(2)密度行列繰り込み群の方法は一次元強相関系に対する強力な数値計算手法の一つとして確立している。この手法の特色として、系全体の波動関数を限られた計算機資源の中で上手く表現しながら、他の数値計算手法では到達困難な大きなサイズの一次元系を高精度で計算できる事が挙げられる。系を逐次的に大きくする際、波動関数は左右の部分系に分けて表現されているが、この数値計算

手法が成功した背景にあるのは、左右の部分系の密度行列を最大限に保つように繰り込んでいく工夫である。実は、「部分系の密度行列」によってエンタングルメントエントロピーが定義されることから、当時、量子絡み合いや量子情報からの新しい概念を導入して、密度行列繰り込み群の手法を再定義、あるいは改善しようという試みが盛んに行われていた。特に不得手であった周期境界条件の取り扱いなどに大幅な改善が見られ、新たな発展が期待されていた。

２．研究の目的
本研究は、近年物性に応用されている「量子絡み合い」 と「幾何学的位相」という概念を用いて、数値計算手法の一つである「密度行列繰り込み群」 を発展させる事を目指すものである。

３．研究の方法
本理論研究は数値計算、及び解析計算によって行われている。数値計算では、適宜、京大基研、物性研のスーパーコンピューターなどを用いた。そこでは、密度行列繰り込み群法、厳密対角化法などの量子多体計算手法を使用する事で、量子多体問題を計算した。また、解析計算ではベーテ仮説法を用いている。

４．研究成果
密度行列繰り込み群、量子絡み合い（エンタングルメント）、幾何学的位相という三つのキーワードによる本研究は、物性理論における「境界」の重要性を見出したと言える。(1)密度行列繰り込み群で用いられる行列積状態、及び(2)量子状態分類の、それぞれにおける境界の重要性である。また、それに伴い、(3)ハミルトニアンの境界条件についての変形も研究した。さらに、数値計算の新たな発展を目指し、(4)高次元での新しい数値計算手法や(5)連続空間への拡張において成果が得られた。これら五つの成果をそれぞれ以下に列記する。

(1)行列積状態における境界行列：量子絡み合いの観点から二次元系などに発展させた手法である TTN、MERA などを超えた幾つかの新しいネットワークが提案されているが、この種の拡張で忘れられているのが境界を表現する行列（境界行列）の重要性である。この重要性を示すため、一次元量子多体系にターゲットを絞って研究し、幾つかの知見を成果として論文にまとめた。ターゲットを絞った理由は、一次元系においては、数値計算手法である密度行列繰り込み群だけでなく、厳密解を与えるベーテ仮説法が利用できるためである。それら二つに共通な事柄として、量子状態を行列積状態として表現可能である事が知られている事があげられる。以下、解析計算と、数値計算に分けて記述する。
①解析計算：２０１０度発表したスピン格子系の論文の中で、厳密解を与える行列積状態を具体的に書き下すことに成功した。周期境界条件下での空間的に一様な状態であるにも関わらず、粒子数(total Sz)保存則を満たすために境界行列は必要である事が明らかになった。この境界行列は二次元古典統計のモデルである６頂点模型において良く知られたドメイン・ウォール境界条件（DWBC）に対応する。しかし、最終的に得られた行列積状態は簡単化されており、５頂点模型になる事も分かった。
②数値計算：一方で、数値計算において境界行列は、波動関数の周期性と密接な関係を持っている。特に、波動関数の周期性は転送行列の縮退度に影響を与え、これは従来の計算法で見過ごされていた点であるため、今後の応用上の重要性は高い。

(2)波動関数の分類法における境界：分類の方法としてチャーン数とベリー位相を用いた研究を行った。これらは定義上積分量であるが、幾何学的位相の数値計算手法を用いることで、数値的に安定して値を計算する事が可能である。以下にそれぞれの研究成果について記す。
①チャーン数による分類：フラットバンド・ハバード模型の強磁性についての研究の中で、基底状態のトポロジカルな分類を行った。この分類は系に境界（エッジ）状態があるかないかを判別する事が可能になる。完全にフラットバンド強磁性が、境界状態を持ちうるトポロジカルな基底状態においても発現する事が確かめられた。これは近年注目を集めている「ほぼ」フラットなバンドを持つハミルトニアンにおける、トポロジカルな状態の強磁性の研究に先駆けるものとなった。しかも、我々の系では、ほぼフラットではなく、完全にフラットなバンドである点が違いとして挙げられる。
②ベリー位相による分類：ベリー位相の研究においては、それまで知られていた Z2 ベリー位相の拡張に成功した。このベリー位相はトポロジカルな値を持つ場合、系の端にやはり境界状態が現れる事が確かめられた。特に、ベリー位相は２スピンから作られるシングレットだけではなく、４スピンからなるプラケット・シングレットの分類も可能である事が分かった。さらに、それまで時間反転などの対称性により二値(Z2)で量子化されていたベリー位相を多値(Z3,Z4,...)で量子化させる条件を発見した。これにより時間反転対称性だけではなく、結晶の三回軸などの対称性による基底状態の分類が可能となり、基底状態の分類の幅は格段に広がる事になる。

(3)ハミルトニアンの境界条件：境界の物理とエンタングルメントについては進展があり、周期境界条件と開いた境界条件との両方において同じ（多体）基底状態を得ることが出来るサイン二乗変形（SSD）の原理について知見を得て、論文にまとめた。ちなみに、このSSDは開いた境界条件が得意である密度行列繰り込み群の周期境界条件への適用可能性を探る中で発見されてきた経緯を持つ。今後の展望として、このSSDを系の分断に応用する事が考えられ、これはエンタングルメントの実用という点で重要と期待される。

(4)高次元での新しい数値計算手法：一次元量子多体系の強力な数値計算法である密度行列繰り込み群法の新展開を目指し、量子絡み合いの観点から二次元系などに発展させた手法であるTTN、MERAなどを含む幾つかの新しいネットワークの可能性を模索して論文にまとめた。論文で行われた計算は少数サイト系ではあるものの、系の保存則を満たすために新たに導入された射影演算子が量子絡み合いを表現しうる事などが分かった。今後様々な射影演算子を量子絡み合いの観点から研究していく事で、数値計算手法の射影演算子による高精度化が期待できる。

(5)連続空間への拡張：密度行列繰り込み群法は一次元格子系、あるいは連続空間をメッシュ分割した系における数値計算手法である。この理由は行列積状態が格子系に適した状態であるからとも言える。その新展開をめざし、連続空間への拡張を模索して、論文にまとめた。これはベーテ仮説法を用いた解析計算から得られた結果であり、この論文出版の直前に出版された数値計算の論文の厳密解を与えるものとなっている。両者を比較すると、厳密解の方は粒子数保存則を満たすために境界行列が必要であった事が、決定的な違いとして表れている。この事実は、今後の連続空間での数値計算においても重要となるはずである。

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計12件）

① M. Orii, H. Ueda, I. Maruyama, Quantum Entanglement of Tensor Networks with Symmetry Projections, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 81, (2012), 043001-(1-4)
② I. Maruyama, H. Katsura, T. Hikihara, Sine-square deformation of free fermion systems in one and higher dimensions, Phys. Rev. B, 査読有, 84, (2011), 165132-(1-8)
③ Y. Hatsugai, I. Maruyama, *ZQ* Topological Invariants for Polyacetylene, Kagome and Pyrochlore lattices, Euro Phys Letter, 査読有, 95, (2011), 20003-(1-5)
④ H. Ueda, I. Maruyama, K. Okunishi, Uniform Matrix Product State in the Thermodynamic Limit, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 80, (2011), 023001-1-4
⑤ Hosho Katsura, Isao Maruyama, Akinori Tanaka, Hal Tasaki, Ferromagnetism in the Hubbard model with topological/non-topological flat bands, Europhys. Lett., 査読有, 91, (2010), 57007-1-6
⑥ Isao Maruyama, Hosho Katsura, Continuous Matrix Product Ansatz for the One-Dimensional Bose Gas with Point Interaction, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 79, (2010), 073002-1-4

〔学会発表〕（計25件）

① I. Maruyama, S. Tanaya, Y. Hatsugai, *ZQ* topological invariants for identification of short rangeentangled states, アメリカ物理学会, 2012年3月2日, Boston(USA)
② 丸山勲, 一様行列積状態における境界行列, 基研研究会「量子多体系のエンタングルメントとくりこみ群」, 2011年12月15日, 京都大学基礎物理学研究所（京都府）
③ 丸山勲, 一般スピン VBS 状態におけるエンタングルメントと Kennedy-Tasaki 変換, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 23aGU-5, 2011年9月23日, 富山大学(富山県)
④ I. Maruyama, Boundary in the Matrix Product States, International Workshop on Tensor Networks, 2011年2月20日, Bribie, (Australia)
⑤ I. Maruyama, Boundary Operator in the Matrix Product States, Density Matrix Renormalization Group to Tensor Network Formulations, 2010年10月28日, 京都

〔その他〕
ホームページ等
http://researchmap.jp/i.maruyama

６．研究組織
(1)研究代表者

丸山　勲 (MARUYAMA ISAO)
大阪大学・基礎工学研究科・特任助教 (常勤)
研究者番号：20422339