

平成 26 年 6 月 20 日現在

機関番号：13101

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540442

研究課題名(和文) テンソル積状態の量子エンタングルメント制御と数値くりこみ群

研究課題名(英文) Quantum entanglement for tensor product states and numerical renormalization groups

研究代表者

奥西 巧一 (Okunishi, Kouichi)

新潟大学・自然科学系・准教授

研究者番号：30332646

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円、(間接経費) 1,050,000円

研究成果の概要(和文)：量子多体系の基底状態を研究する上で、テンソル積型の状態を用いた数値くりこみ群が注目を集めている。まず、Wilson型の数値くりこみ群の成功のメカニズムが、エネルギースケールのスケールフリー性を持つことが鍵であることを明らかにした。次に、テンソル積状態のエンタングルメント構造に注目し、高次特異値分解を用いたテンソルくりこみ群の固定点が、量子および古典に共通の構造を持ち、それが対応する角転送行列の倍化現象により説明されることを初めて明らかにした。また、応用として擬1次元量子磁性体BaCo₂V₂O₄の磁場誘起の微細秩序構造の決定なども行った。

研究成果の概要(英文)：Recently, the numerical renormalization group based on the tensor product state plays a fundamental role in analyzing the ground state of the quantum many body system. We firstly clarified that the key mechanism of the Wilson-type renormalization group is in the scale free property of the energy scale. We next found out that the fixed point structure of the higher order tensor renormalization group can be explained by doubling of the corner transfer matrix in the off critical region. We also clarified that this result is basically universal for both of the one-dimensional quantum system and two dimensional classical systems.

研究分野：数理物理・物性基礎

科研費の分科・細目：物性基礎論

キーワード：テンソル積 くりこみ群 エンタングルメント

1. 研究開始当初の背景

低次元量子多体系の研究において、基底状態の行列積分解は、重要な役割を占めてきた。とくに、VBS 状態とよばれる仮想的なスピニングレットのネットワークに対応する行列積型波動関数は $S=1$ 量子スピン系のハルデン問題での隠れた対称性と秩序の理解に重要な舞台回しを担ってきた。また、Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) 模型は、最も基本的な VBS 状態を基底状態に持つが、量子情報理論より流入した概念であるエンタングルメントスペクトルに非自明な縮退が現れることが行列積型波動関数に基づき証明するなど、現在においても研究の最前線で新たな発見を生み出し続けている。さらに、VBS 状態は 2 次元量子系にも拡張されており、行列積をテンソル積に一般化することで十分な拡張性が予想されてきた。しかし、高次元に対しては解析的な扱い難しく、数値計算も含めた新たなアイデアが必要となっていた。

一方、量子多体系の基底状態波動関数を局所的な行列やテンソルの積で表現しようとする試みはハミルトニアンや転送行列の数値計算に対しても極めて有効なアプローチである。とくに、密度行列繰り込み群は、1 次元量子多体系の計算に最も有効な数値計算法であるが、行列積型に表現された波動関数に対しエンタングルメントエントロピーを最大化する変分法として定式化できる。これまで、西野 奥西は行列積を高次元に拡張したテンソル積状態を提唱し、転送行列系に対する角転送行列くりこみ群法を経由することで、少ない変分パラメーターで精度のよい結果が得られることを実証した。その後、量子情報分野において我々と基本的に等価な計算手法が提唱され、有効性が理解されつつあった。

このような状況下、近年、単純なテンソルネットワーク状態に Disentangler というアイデアを組み込んだ、マルチスケールエンタングルメントくりこみ群 (MERA) が G. Vidal により提案された。この手法は高次元の量子系に対する数値繰り込み群の最有力候補とみられ、急速に広まりつつある。その鍵は、通常のくりこみ変換では情報を失う部分に対し、情報の消失を最低限に抑えるように、あらかじめテンソル積状態の構造を積極的に制御しようという点にある。Disentangler の有効性は数値計算により 1 次元だけではなく 2 次元量子系に対しても確かめられており、大変魅力的な可能性を秘めている。しかしながら、Disentangler の数学的、および物理的に波動関数がどのように変換されているのかなど、実態の理解が無く、対称性による分類や、隠れた秩序状態との関係、正当性や拡張性も実はよくわかっていなかった。その結果、計算の効率化に対するアプローチも足踏み状態であった。

2. 研究の目的

上記のような状況をうけ、本研究の主目的は、行列積状態やテンソル積状態のエンタングルメントを制御することで、量子多体系の波動関数のエンタングルメント数学的構造を理解し、数値くり込み群の計算手法の発展につなげることである。研究の大まかなねらいは、

(1) Disentangler という概念を AKLT 模型などの基本モデルにおいて数理的に確立し、量子多体系特有の隠れた秩序の抽出や量子臨界現象の本質的な理解に繋げること。

(2) その基礎のうえで、高次元系のテンソルネットワーク形式にエンタングルメント構造を明らかにし、高次元数値くりこみ群の効率を向上させること。

の二点となる。

具体的には、まず、Disentangler を AKLT 模型など VBS 状態を基底状態として持つ系において数学的に厳密に構成するために、Kennedy-田崎が導入した非局所ユニタリー変換に着目した。この変換は隠れたストリング秩序を強磁性的な古典的秩序に変換するため、量子的なエンタングルメントが完全に解ける。すなわち、Kennedy-田崎変換は VBS 状態に対する完全 Disentangler とみなせるのである。しかし、Kennedy-田崎変換は鎖の端のサイトから順に定義された非局所変換であるため解析的に扱いにくく、行列積型状態のエンタングルメントを変化させるメカニズムが不明であった。そこで、行列積型波動関数表示に対して、Kennedy-田崎変換がどのように作用するのかを示すことが第一目標とした。Disentangler の構成法が確立すれば、エンタングルメントの原因である隠れた対称性や秩序の系統的抽出が可能になり、エンタングルメントの理解を大きく前進させることができる。

つぎに、上記の数理的な基礎の上で、Disentangler の数値くりこみ群に対する応用をめざす。行列積状態では、局所変換は行列積間のゲージ変換に吸収可能であるため、グローバルなシステムに対するエンタングルメントエントロピーは基本的に変化しないが、MERA では、Disentangler と多段のくりこみ変換が組み合わさることで、非局所的エンタングルメントを制御しているのである。この違いを理解するため、2 次元の模型で最も基本的な模型に対し、エンタングルメントの構造を明らかにし、さらに、高次元の Disentangler の構成の指針を段階的に得ることが目標である。これは、MERA や一般のテンソルネットワークくりこみ群における最適化の効率化をめざす際の指標を得ることに相当し、変分パラメーターの数が大きく削減でき、計算の収束性に大きな寄与をすると考えられる。

3. 研究の方法

最も基本的な $S=1$ の AKLT 模型における Disentangler を Kennedy-田崎変換を基に構成し、行列積型 VBS 状態に対する作用を分析することで、VBS 状態のエンタングルメントの数学的構造と物理的解釈を明らかにする。それを任意 S の VBS 状態およびスピン梯子系へと拡張し、トポロジカル秩序や隠れた対称性と Disentangler との相互関係を解析的に解明する。また、解析解の導出が数学的に困難な系に対しては、密度行列くり込み群法などの堅実な数値計算手法を用いて、行列積型波動関数のエンタングルメント構造を数値的に明らかにする方針をとった。

次に、2次元系のテンソルくり込み群に対し、数値計算を行うことでエンタングルメントの構造を明らかにする。本研究中では、とくに2次元古典イジング模型から出発し、量子揺らぎを取り入れることによりエンタングルメント構造がどのように変化するかを追いかけることで、その制御法の基本的な理解を得る道筋を選択した。この際の数値計算は2次元古典系に対しては、角転送行列くり込み群法を、さらに2次元量子系のテンソル積型波動関数については、そのノルムや期待値を2次元古典格子系とみなして、やはり角転送行列くり込み群を適用して対応した。

また、これらの数値くりこみ群アルゴリズムの応用として、近年磁性実験の分野で注目を集めている、量子スピン系の基礎物性の同定も適宜行った。以上の数値計算手については、国際共同研究の下で推進し、近年の急速なテンソル形式の展開に即座に対応できる組織作りもおこなった。

4. 研究成果

具体的な研究成果は、主に以下の5点にまとめられる。

(1) AKLT 状態に対する Disentangler の構成により、その行列積状態の直接作用の数学的構造を明らかにした。また、 $S>1$ の VBS 状態に対する Disentangler の直接作用では、行列積状態の古典的状态への分解ができないことが示され、その原因が対称性に守られたトポロジカルな秩序が存在しないことと対応していることが明らかになった。 $S>1$ の Disentangler で培った構成法を $SU(2)$ 以外の他の対称性を持つ行列積状態へ拡張することは部分的に成功した。これらの結果は日本物理学会において発表した。

(2) エンタングルメントを制御する操作と行列積状態のもつエネルギースケールとの関係の解明を重点的に行った。密度行列くり込み群には行列積型波動関数にもとづいて、エンタングルメントエントロピーの振る舞いを計算できる。とくに、Wilson 数値くりこみ群におけるエネルギースケールとエンタングルメントの関係に着目し、低エネルギー領域で、不純物スピンが伝導電子スピンと

スピニングレットを組み、エンタングルメントエントロピーが $\log 2$ となることを初めて明らかにした。これらの結果は日本物理学会において報告した。

(3) テンソルネットワーク形式の数値くり込み群の新しい形として、高次特異値分解を用いたテンソルくりこみ群が提案された。本研究では、2次元古典格子系において、テンソルくり込み群の固定点のエンタングルメントの構造を、角転送行列くり込み群法を組み合わせて初めて世界で初めて明らかにした。具体的には2次元イジング模型などにおいて、くりこみ変換を繰り返すごとにシステムサイズが増えるが、そのシステムサイズが系の相関長を超える程度になると、急速に固定点に収束するとともに、行列のランク落ちが起こる。このランク落ちした行列が固定点を記述することになるが、固定点を記述する密度行列のスペクトルが、対応する角転送行列のスペクトルの倍化により説明できることが分かった。さらに、同様のテンソルくりこみ群を1次元量子系の XXZ 模型に対しても適用し、倍化現象が起こることを確認した。また、臨界点直上のスペクトルの振る舞いには、これまでに無い特異な指数で特徴づけられる分布が現れることが分かった。これらは、高次特異値分解型テンソルくりこみ群に特有の現象で、そのくりこみ群の背後にあるツリー型のテンソルネットワークに起因することが大きいと考えられることを論じた。この研究成果は、Physical Review B 誌に掲載されるとともに、日本物理学会等で発表した。

(4) 量子モンテカルロ法の負符号問題と呼ばれる本質的な困難が知られている。行列積状態のエンタングルメントの構造を調べていくにあたって、AKLT 模型のように基底状態のエンタングルメントの構造が厳密にわかっている基本モデルに対し、そのエンタングルメントを解く非局所変換が、実は量子モンテカルロ法の負符号を解消することを見出した。この結果は、今後の量子多体系のエンタングルメント研究に大きな発展をもたらす本研究の重要な結果であると考えられる。

(5) 行列積型の数値くりこみ群手法の応用として、 $BaCo_2V_2O_4$ のイジング異方性を持つ XXZ 量子スピン鎖に対し、量子化軸の傾きまで考慮にいれた磁場誘起秩序の計算を行った。これにより、 $BaCo_2V_2O_4$ の強磁場実験による弱い異常の原因を定量的に解明することができた。また、密度行列くり込み群法を量子スピン梯子系の磁化曲線の計算を行い、 $Cu(DEP)Br_2$ や有機鉄梯子系の基礎物性の特定も行った。これらの結果は日本物理学会欧文誌に発表済みである。

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 5 件)

Hironori Yamaguchi, Hirotugu Miyagai, Tokuro Shimokawa, Kenji Iwase, Toshio Ono, Yohei Kono, Naoki Kase, Koji Araki, Shunichiro Kittaka, Toshiro Sakakibara, Takashi Kawakami, Kouichi Okunishi, Yuko Hosokoshi, "Fine-Tuning of Magnetic Interactions in Organic Spin Ladders" J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 033707、査読有

DOI:

<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.033707>

Hiroshi Ueda, Kouichi Okunishi, Tomotoshi Nishino "Doubling of Entanglement Spectrum in Tensor Renormalization Group"、Phys. Rev. B 89, 075116 (2014)、査読有

DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.075116>

Shojiro Kimura, Koichi Okunishi, Masayuki Hagiwara, Koichi Kindo, Zhangzhen He, Tomoyasu Taniyama, Mitsuru Itoh, Keiichi Koyama, and Kazuo Watanabe "Collapse of Magnetic Order of the Quasi One-Dimensional Ising Like Antiferromagnet BaCo₂V₂O₈ in Transverse Fields"、J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013) 033706、査読有

DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.033706>

Zentaro Honda, Hiroko Aruga Katori, Masami Ikeda, Masayuki Hagiwara, Kouichi Okunishi, Masamichi Sakai, Takeshi Fukuda, and Norihiko Kamata "Magnetic Field-Induced Phase Transitions in the S=1/2 Two-Leg Spin-Ladder Material Cu(DEP)Br₂" J. Phys. Soc. Jpn. 81 (2012) 113710、査読有

DOI:<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.81.113710>

Kouichi Okunishi, Masahiro Sato, Toru Sakai, Kiyomi Okamoto, and Chigak Itoi "Spin-Chirality Separation and S_z-Symmetry Breakings in the Magnetization Plateau of the Quantum Spin Tube"、Phys. Rev. B 85, 054416 (2012)、査読有

DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.85.054416>

[学会発表](計 9 件)

奥西巧一、「数値くりこみ群の発展 DMRG から MERA まで(招待講演)」、日本物理学会年次大会、2014年3月27日、東海大学

奥西巧一 他、「bilinear-biquadratic スピン鎖の負符号問題 II」日本物理学会秋季大

会、2013年9月26日、徳島大学

奥西巧一、「bilinear-biquadratic 鎖の負符号問題」、日本物理学会年次大会、2013年3月26日、広島大学

奥西巧一、「Wilson 数値くりこみ群の場の理論化」日本物理学会秋季大会、2012年9月14日、横浜国立大学

奥西巧一、「数値くりこみ群アルゴリズムとエンタングルメント(招待講演)」日本物理学会秋季大会、2012年9月14日、横浜国立大学

奥西巧一、「Quantum phase transitions in 1/3 plateau of quantum spin tube」国際磁性学会議 2012年7月13日、プサン国際会議場

奥西巧一、「Wilson 数値くりこみ群とエンタングルメント」日本物理学会年次大会、2012年3月26日、関西学院大学

奥西巧一 他、「スピントラップのプラトー状態での内部対称性と新奇秩序の数値的研究」、日本物理学会秋季大会 2011年9月22日、富山大学

奥西巧一 他、「VBS 状態の Disentangler II」、日本物理学会秋季大会 2011年9月21日、富山大学

[図書](計 0 件)

[産業財産権]

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

[その他]

ホームページ等

6. 研究組織

(1)研究代表者

奥西 巧一 (Kouichi Okunishi)
新潟大学・自然科学系・准教授
研究者番号：30332646

(2)研究分担者

(3)連携研究者