

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 6 日現在

機関番号：13101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26400387

研究課題名(和文)非局所変換による量子多体系のエンタングルメント制御と負符号問題

研究課題名(英文)Entanglement control in quantum many-body systems by non-local transformation and negative sign problem

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) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：物理学で基本的な課題である量子多体系のエンタングルメントに関連し、本研究の主要な成果は以下の3点である。(1)SO(N)双1次双2次型の量子スピン鎖のエンタングルメントを解く一般化非局所 Jordan-Wigner変換を構成し、その基底で量子モンテカルロ法の負符号を消去できることを示した。(2)量子モンテカルロ法において、スナップショットの虚時間方向を縮約したスナップショット密度行列の概念を提案し、スペクトル分布のスケーリング性などの基本的性質を明らかにした。(3)サイン2乗型の相互作用変調のある系に対し、厳密に解けるモデルを構成し、また、共形場理論やエンタングルメントとの関係も明らかにした。

研究成果の概要(英文)：The main results of the study are summarized as the following three points. (1)We constructed a generalized Jordan-Wigner transformation disentangling SO(N) bilinear-biquadratic spin chains, which solves the negative sign problem in quantum Monte Carlo. Then, we actually performed quantum Monte Carlo simulations for the sign-free Bose gas model. (2) We proposed a new concept of snapshot density matrix and clarified basic properties of its spectrum, including the power-law scaling behavior. (3) We constructed an exactly solvable free fermion model with the sine-square deformation. We also clarified the relation between the sine-square deformation and Mobius quantization for conformal field theory.

研究分野：物性理論

キーワード：エンタングルメント 非局所変換 量子モンテカルロ 共形場理論

1. 研究開始当初の背景

研究開始当初、テンソルネットワーク形式の数値的くりこみ群の発展により、量子多体問題の波動関数とエンタングルメントの関係が注目されていた。とくに、エンタングルメントエントロピーの面積則が、数値計算精度を保つ上で必然的に必要となる基底数と関係しており、アルゴリズム設計上、非常に重要となることが知られていた。また、マルチスケールエンタングルメントくりこみ群の手法においては、Disentangler と呼ばれるエンタングルメントを制御するユニタリー演算子を導入することが、これまで困難であった量子臨界系の数値シミュレーションを行う上で鍵となる働きをしていることが知られていた。そのような中、近年のトポロジカル物質の文脈で非常に集中的に研究されている、対称性に守られたトポロジカル状態の典型である、Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki(AKLT) 模型の基底状態である Valence-Bond-Solid (VBS) 状態のエンタングルメント構造が、トポロジカルな Disentangler と呼ばれる非局所ユニタリー変換で解明されることが見出された。この非局所変換は、Kennedy-Tasaki により導入された KT 変換と等価であり、非自明にエンタングルメントした量子的な状態を古典的な状態に書き直すことができるため、系の隠れた秩序を理解するうえで本質的な役割を果たす。

一方で、量子モンテカルロ法は、テンソルネットワーク法と並ぶ代表的な量子系シミュレーション手法であり、これまでの量子多体系の定量解析に非常に重要な役割を果たしてきた。量子モンテカルロ法は、量子多体系の経路積分表示にもとづいて、統計重率を空間次元が一つ上の古典統計系の重みにマップして、その古典的な自由度に対するマルコフ連鎖モンテカルロシミュレーションを行う。一旦、古典的表現を経由するため、量子力学的位相も含んだ波動関数のエンタングルメントを直接扱うことが難しい。したがって、量子モンテカルロ法は有限温度のバルク物理量の計算には非常に強力であるが、特殊な例外を除いては、エンタングルメントの構造を解析にはあまり適していない手法と考えられてきた。

さらに、量子モンテカルロ法には負符号問題と呼ばれる本質的な困難があることが知られている。AKLT 模型のようなフラストレーションを含む量子系に於いては、マップした古典統計系の重率に負の重みが出現し、モンテカルロシミュレーションが事実上破綻してしまう。これは量子的な位相の非自明な重ね合わせに起因した本質的な困難であると考えられるが、現状では対処するための一般的な処方は知られておらず、個別の問題で負符号問題の解消・もしくは軽減手法が探索されている状況であった。

2. 研究の目的

研究状況の背景をうけ、本研究課題では、非局所変換の利用による対称性に守られたトポロジカル秩序状態のエンタングルメント構造の解明と、その結果を量子モンテカルロ法の負符号問題に応用することを目的とした。さらに、量子モンテカルロ法における世界線の配意に対してスペクトル分解を行い、量子論的なエンタングルメントエントロピーと類似のスナップショットエントロピーという概念を提案し、その基本的な性質の解明を行うことをもめざした。当初の具体的な研究の狙いは、以下の2点にまとめられる。

(1) 数学的に厳密な取り扱いの出来る対称性に守られたトポロジカル秩序を持つ1次元量子系において、非局所ユニタリー変換によるエンタングルメントの制御で、量子モンテカルロ法における負符号問題が解消できる場合があることを明らかにすること。とくに、これまで良く研究されてきた AKLT 模型を超えて、SO(N)の対称性をもつ bilinear-biquadratic スピン鎖におけるエンタングルメントの構造を完全に解明したうえで、量子モンテカルロ法の負符号問題がいかに解消されるのかを示し、量子モンテカルロ計算を実行して、これまで求められてこなかった有限温度における物理量を定量的に評価すること。

(2) 一般の量子スピン系に対する量子モンテカルロ法において、世界線の構造を直接的に解析することで、エンタングルメント構造の理解につなげること。とくに、世界線のスナップショットスペクトルという新しい概念により、量子モンテカルロ法における新しいエンタングルメントの表現法の探索を行い、既存とは異なる高次元化が容易なアプローチで量子多体系のエンタングルメントの理解に近づくこと。

さらに、上記の研究の過程で、1次元量子多体系における厳密に解けるエネルギースケール変調の一つであるサイン 2 乗変形 (SSD) とエンタングルメント制御の関係が明らかになってきたため、

(3) SSD の数学的構造を解明するとともに、SSD の考え方を共形場理論 (CFT) におけるメビウス変換型の座標変換へ一般化すること。

も目的の一つとして追加することとなった。これにより、研究の展開が新しい方向にも向かい、研究の厚みが増したと考えられる。

なお、このほかにもテンソルネットワーク法やモンテカルロ法のシミュレーション技法を、実験に対応するスピン模型に応用し、観測された実験結果を定量的に解析することも随時おこなっている。

3. 研究の方法

理論的な研究手法としては、研究目的のそれぞれの項目に対して適切な手法を設定した。

(1) 対称性に守られたトポロジカル秩序状態に関する非局所ユニタリー変換の数学的構成が重要になる。 $SO(N)$ の対称性に着目したスピンの定義表現と Jordan-Wigner 型の非局所変換を組み合わせて一般化された非局所変換を構成し、その変換をハミルトニアン作用させて負符号の消去された模型を直接求める。つぎに、その非局所変換を施された系に対して、世界線型の量子モンテカルロ法を実装し、負符号が消えた配位空間での量子モンテカルロシミュレーションを実行する。これにより、これまで負符号問題によりシミュレーションが不可能であった系に対しての定量計算が可能となる。

(2) スナップショットスペクトルについては、世界線型量子モンテカルロ法により、熱平衡状態における世界線のスナップショットを生成し、そのスナップショットの虚時間方向のラベルを縮約することにより、スナップショット密度行列を構成する。つぎに、そのスナップショット密度行列を対角化することでスナップショットスペクトルを計算し、その性質を解析する。ただし、スナップショットひとつだけでは大きな統計誤差が含まれているため、シミュレーションを長時間継続することでアンサンブル平均をとり、スナップショットのスペクトル分布を安定的に構成した。

(3) SSD 型の変形問題では、まず、自由フェルミ粒子からなる SSD 系に対し、超対称量子力学を逆問題的に用いて、解を波動関数レベルですべて具体的に書き下す手法をとった。さらに、一般の共形場理論における SSD の扱いでは、まず、背後の座標系をあぶり出し、その新しいメビウス座標系に対応した保存量を構成するという共形場理論の原点に戻ったアプローチを採用した。これにより、メビウス座標系に対応したピラソロ代数を直接構成し、SSD 問題と共形場理論の対応関係を直接的に議論することが可能になる。

なお、実験に対応するスピン模型に対して実験結果を定量的に解析する際には、イベント連鎖型のモンテカルロ法に、通常のモンテカルロ法、厳密対角化法、線形スピン波解析法などの標準的な数値計算手法を組み合わせで行った。

4. 研究成果

それぞれの課題に対する研究成果は以下の3点にまとめられる。

(1) $SO(N)$ スピン鎖に対してエンタングルメントを解く非局所ユニタリー変換を構成した。これまで知られている $SO(3)$ AKLT 鎖模型で導入された KT 変換流の構成法は一般化が難しいことがわかったので、その数学的な構造を精査することで、KT 変換がスピンの定義表現と一般化された Jordan-Wigner 変換という位相変換の組み合わせにより表現できることを見出した。さらに、 $SO(N)$ bilinear-biquadratic 鎖に対して、この一般化

Jordan-Wigner 変換を用いると、エンタングルメントが解けることを示し、その結果、得られるハミルトニアンがすべて負の非対角行列要素を持つこと、すなわち、負符号問題の出ない斥力型相互作用を持つ多成分ボース気体の問題に書き換えられていることも示すことができた。次に、その負符号の消えた成分ボース気体模型に対して、世界線型の量子モンテカルロ法を実装し、高温から低温までの温度変化を明らかにすることが出来た。なお、これは京都大学の原田助教との共同研究である。

通常の量子系で有効な数値的手法は、基底状態を対象にしたものが多く、有限温度の振る舞いを系統的に解析できた意義は大きいと考えられる。

(2) 前述のように、量子モンテカルロ法では量子エンタングルメントを直接扱うことが難しい。本研究では量子スピン系で最も基本的なモデルである横磁場イジング鎖模型や XXZ 鎖模型において、世界線量子モンテカルロのスナップショット密度行列の概念を提案しそのスペクトル分布の特徴を明らかにした。

具体的には世界線のアスペクト比を固定した上でスケール解析を行うことが、臨界点のみならず非秩序相での普遍的な分布を導くことに対して重要であることがわかった。さらに、この比を決定するものがハミルトニアン中の量子揺らぎ項と古典的秩序を生み出す項の競合で決まっており、モデルによって比の取り方を変える必要があることもわかった。また、世界線の表現をつくる基底依存性も解明することができた。具体的には、分布関数が臨界現象のべき依存性が見える基底とそうでない基底が存在し、相関関数の臨界指数が1を超えるか超えないかがその判定の指標であることが分かった。さらに、スナップショット密度行列と相関関数行列の一般的な関係の考察、とくにアンサンブル平均とバルク極限をとる順序についての考察も行った。現状では、元祖量子エンタングルメントとの対応関係としては未知の部分は残るが、量子モンテカルロ法のスナップショットスペクトルという、量子効果を評価する新しい手法を提案し、その性質を系統的に解明できた意義は大きいと考えられる。

(3) サイン 2 乗変形 (SSD) 問題は、エンタングルメントに対する境界条件の影響の厳密研究から派生的に生じた課題であるが、非常に重厚な数理物理的が明らかになった。まず、連続空間系における自由粒子レベルの SSD 系において、背後にある超対称性の構造を見抜くことで周期境界条件系との基底状態の対応関係が厳密に示すことができた。これは、超対称量子力学の問題を、逆問題を通じてエネルギースケールの変調問題に応用した初めての例である。次に、一般の 2 次元共形場理論において、SSD 型の変調を伴う時間推進演算子に対して、それに対応した時空

構造を分析することで、メビウス座標系に対する量子化に相当することを明らかにした。さらに、メビウス座標系に対するピラソク保存電荷を直接的に構成し、一様系と SSD 系の間を連続パラメーターで移り変われることを示した。これにより、SSD 系と基底状態波動関数の一致が $SL(2, R)$ の大域的な共変変換の対称性によるものであることが解明された。これは、個別の模型で発見されていたエネルギースケール変調の基底状態の対応問題が、一般的な枠組みで証明されたことを意味しており、数理物理的に大変に重要な結果であると考えられる。

このほか、実験に対応するスピン模型に対して実験結果の説明を目的とした研究では、モンテカルロ法を用い結合三角スピントラップ系における Cuboc 秩序とよばれる新奇立体スピン秩序の存在を定量的に明らかにするとともに、相転移現象を重点的に解析した。その結果、立体スピン秩序系の相転移ではスピンとカイラリティ自由度が同時に相転移を起こす弱い 1 次転移が示唆されることが定量的に初めて明らかになった。また、スピン波近似により低エネルギーの量子効果を取り入れたスピン波分散を計算し、実験結果へのフィードバックを可能にした。この結果は、今後の実験的解析において重要な役割を果たすと考えられる。

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 7 件)

"Critical behavior of the two dimensional icosahedron model" H. Ueda, K. Okunishi, R. Krčmar, A. Gendiar, S. Yunoki, T. Nishino, Phys. Rev. E 96, 062112 (2018), 6 頁 査読有
DOI:
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.96.062112>

"Spin-wave analysis for Kagome triangular spin system and coupled spin tubes: low-energy excitation for the cuboc order" M. Ochiai, K. and Kouichi Okunishi J. Phys. Soc. Jpn. 86, 114701 (2017) 8 頁 査読有
DOI:
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.96.062112>

"Sine-square deformation and Mobius quantization of two-dimensional conformal field theory" Kouichi Okunishi Prog. Theor. Exp. Phys. (2016) 063A02 14 頁 査読有
DOI:
<http://dx.doi.org/10.1093/ptep/ptw060>

"Sine-square deformation and supersymmetric quantum mechanics" Kouichi

Okunishi and Hosho Katsura, J. Phys. A: Math. Theor. 48 (2015) 445208 16 頁 査読有

DOI: [/10.1088/1751-8113/48/44/445208](https://doi.org/10.1088/1751-8113/48/44/445208)

"Magnetic phase diagram of the coupled triangular spin tubes for CsCrF₄" Kouichi Seki and Kouichi Okunishi, Phys. Rev. B 91224403 (2015) 9 頁 査読有

DOI:
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.91.224403>

"Snapshot spectrum and critical phenomenon for two-dimensional classical spin systems" Yukinari Imura, Tsuyoshi Okubo, Satoshi Morita, Kouichi Okunishi J. Phys. Soc. Jpn. 83, 114002 (2014) 8 頁 査読有

DOI:
<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.114002>

"Symmetry-protected topological order and negative-sign problem for $SO(N)$ bilinear-biquadratic chains" Kouichi Okunishi and Kenji Harada, Phys. Rev. B 89 134422 (2014) 11 頁 査読有

DOI:
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.134422>

[学会発表](計 6 件)

「サイン 2 乗変形とメビウス量子化」奥西巧一 日本物理学会 2017 年次大会 大阪大学

「Sine-square deformation and Mobius quantization of 2D CFTs」Kouichi Okunishi, 4 th workshop on tensor network states -algorithms and applications (国際学会) 2016 精華大学 台湾

「Sine-square deformation and Mobius quantization of CFT」(招待講演) Kouichi Okunishi, Quantum Information in String Theory and Many-Body systems(国際学会) 2016 京都大学基礎物理学研究所

「不純物問題の数値くりこみ群とエンタングルメント(招待講演)」奥西巧一 日本物理学会 2016 年次大会 東北学院大学

「1 次元量子スピン系のスナップショットスペクトルと相関関数」奥西巧一 日本物理学会 2015 年秋季大会 関西大学

「Symmetry-protected topological entanglement and negative sign problem for $SO(N)$ bilinear-biquadratic Chains」(招待講演) Kouichi Okunishi Tensor Network States: Algorithms and Applications(国際学会) (2014)12 月 中国科学院 北京

「一般化 Jordan-Wigner 変換と $Z_2 \times Z_2$ 対称性」奥西巧一 日本物理学会 2014 年秋季大会 中部大学

[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〕

△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