ギャップレスなフラストレーションフリー系の動的臨界指数

政岡凜太郎

August 27, 2024

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

目次

フラストレーションフリー系とは？

フラストレーションフリー系とは？

フラストレーションフリー (FF) 系は可解な模型の一種。

格子上で定義された量子スピン系 (qudit 系) の Hamiltonian$H$ が半正定値な局所 HamiltonianH_i の和として $H = \sum_i H_i$ と表されているとする。

定義: フラストレーションフリー (FF) 系

基底状態のエネルギーがゼロ。すなわち任意の基底状態 $|\Psi\rangle$ に対して $H_i|\Psi\rangle = 0.$

例

ギャップト:	Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) 模型、トーリックコードなど
ギャップレス:	Rokhsar-Kivelson (RK) 量子ダイマー模型、強磁性 Heisenberg 模型など

フラストレーションフリー系とは？

FF 系だと何が嬉しい？

- 基底状態が厳密に書き下せる。
- 絶対零度における物理量が厳密に計算可能。

FF 系はどのような量子相を記述できるか？

- ギャップトで局所的な Hamiltonian の基底状態は局所的[1]な FF 系の基底状態として表せる (Kitaev 2006)
- トポロジカル相や SPT 相の代表元として様々な FF 系が構成されている。
- 一方でギャップレスな FF 系は典型的な (共形場理論で表される) ギャップレス系とは異なる振る舞いを示すことが示唆されてきた。

FF 系はギャップレス系に対する表現能力が低い $\leftrightarrow$ ギャップレスな FF 系は特異で興味深い

[1] O_j を 1 サイトに作用する演算子として $\|[H_i, O_j]\|$ が $|i-j|$ に対して任意のべきより早く収束するという意味。

フラストレーションフリー系の動的臨界指数

フラストレーションフリー系の動的臨界指数

Hamiltonian のエネルギーギャップ ϵ は基底状態と第一励起状態のエネルギー差によって与えられる。ギャップレス系では系の幅 L を大きくしていくと ϵ が 0 に収束する。この速さが $\epsilon \sim 1/L^z$ となるとき、z を動的臨界指数と呼ぶ。

- 典型的なギャップレス系: $z = 1$
  共形対称性 (Lorentz 対称性) からの帰結
- ギャップレスな FF 系: $z \geq 2$
  完全な証明はまだない

我々の結果 (arxiv:2406.06415)

臨界的 ($\subset$ ギャップレス) な FF 系の動的臨界指数 z に対し、$z \geq 2$ を厳密に示した。
臨界的とは、基底状態に対してべき的な相関関数[2]が存在することを言う。

この結果は次元や格子、並進対称性の有無、境界条件に依らない。また $z = 2$ の模型 (Rokhsar–Kivelson 量子ダイマー模型, 強磁性 Heisenberg 模型など) が存在しているので、$z \geq 2$ は下限になっている。

[2] $|x-y| \sim L$ のとき $\langle\Psi|O_x(1-G)O_y|\Psi\rangle \sim L^{-\Delta}$ となることを指す。G は基底空間への射影。

具体例

Rokhsar–Kivelson Hamiltonian

臨界的な FF 系のクラスの一つとして、Rokhsar–Kivelson (RK) Hamiltonian がある。

RK Hamiltonians

d 次元格子上に定義された古典的スピン配位 $\{\mathcal{C}\}$ と、対応するヒルベルト空間 $\mathrm{Span}\{|\mathcal{C}\rangle\}$ を考える。Hamiltonian$H=\sum_i H_i,\ H_i \geq 0$ が以下の条件を満たすとき Rokhsar Kivelson (RK) Hamiltonian であると言う。

1. Frustration-free: 基底状態 $|\Psi\rangle$ に対して $H_i|\Psi\rangle = 0$
2. 基底状態が以下のように書かれる。

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_{\mathcal{C}} \sqrt{w_{\mathcal{C}}}\, |\mathcal{C}\rangle, \quad Z = \sum_{\mathcal{C}} w_{\mathcal{C}}. \tag{3.1}$$

   ここで $w_{\mathcal{C}}$ は配位 $\mathcal{C}$ に対する Boltzmann ウェイトである。

3. Stoquastic: Hamiltonian の古典的な基底 $\{|\mathcal{C}\rangle\}$ に対する行列要素の非対角成分が非正。

$\{|\mathcal{C}\rangle\}$ について対角的な演算子 O に対し、古典的な期待値と量子的な期待値は一致する:

$$\langle\Psi|O|\Psi\rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mathcal{C}} O(\mathcal{C}) w_{\mathcal{C}} = \langle O \rangle. \tag{3.2}$$

RK Hamiltonian は、詳細つり合いを満たす局所的な Markov 連鎖に対応することが知られている (Henley 2004)。具体的な対応関係は、Markov 連鎖の遷移率行列を $W = \sum_i W_i$ とすると、

$$H_i := -S^{-1} W_i S, \quad H := -S^{-1} W S, \quad \text{where} \quad S_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} = \sqrt{w_{\mathcal{C}}}\, \delta_{\mathcal{C}\mathcal{C}'}. \tag{3.3}$$

よってマスター方程式と虚時間の Schrödinger 方程式が対応する:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} p_{\mathcal{C}} = \sum_{\mathcal{C}'} W_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} p'_{\mathcal{C}} \Leftrightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\psi\rangle = -H |\psi\rangle, \tag{3.4}$$

$$p_{\mathcal{C}} = \sqrt{w_{\mathcal{C}}}\, \langle \mathcal{C} | \psi \rangle. \tag{3.5}$$

RK Hamiltonian に対応する Markov 連鎖は、Metropolis-Hastings アルゴリズムや、Gibbs サンプリングといった、標準的な Markov 連鎖モンテカルロ法を含む。

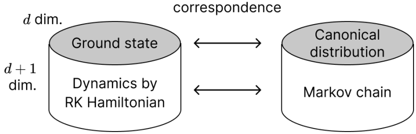

Figure 1: RK Hamiltonian と Markov 連鎖の対応

RK Hamiltonian	Markov 連鎖
基底状態 $\vert w\rangle$	定常状態 w_C
Hamiltonian	遷移率
FF 性	局所性 + 詳細つり合い条件
エネルギーギャップ $\epsilon \sim L^{-z}$	緩和時間 $\tau \sim L^{z}$

Table 1: RK Hamiltonian と Markov 連鎖の対応

Rokhsar–Kivelson Hamiltonian

臨界点に対応する RK Hamiltonian の場合、必ずべき的に減衰する相関関数が存在するため、我々の結果から $z \geq 2$ が言える。よって、詳細つり合いを満たす局所的な Markov 連鎖モンテカルロ法の動的臨界指数は $z \geq 2$ である。(次元や格子によらない結果)

$\rightarrow$ Markov 連鎖モンテカルロ法の分野における経験的な事実の証明

モデル	動的臨界指数 z
Ising (2D)	$2.1667(5)$
Ising (3D)	$2.0245(15)$
Heisenberg (3D)	$2.033(5)$
three-state Potts (2D)	$2.193(5)$
four-state Potts (2D)	$2.296(5)$

Table 2: 詳細つり合い条件を満たす局所的な Markov 連鎖モンテカルロ法に対する動的臨界指数

次のような No-go 定理としても言い換えられる。

No-go 定理

Markov 連鎖モンテカルロ法の動的臨界指数を $z < 2$ にするためには、局所性、あるいは詳細つり合い条件を破る必要がある。

平面波状態を基底状態にもつ FF 系

他のクラスとして平面波状態を基底状態にもつ FF 系がある。例として d 次元立方格子上のスピン S 強磁性 Heisenberg 模型

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} (-J \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j + \mathrm{const.}) \tag{3.6}$$

を考える。定数は局所項が半正定値になるようにとる。基底状態 $|\Psi_0\rangle := |S\rangle^{\otimes L^d}$ の存在から Hamiltonian は FF。さらに以下のマグノンの 1 粒子状態も基底状態となる。

$$|\Psi_1\rangle := \sum_i S_i^x |\Psi_0\rangle \tag{3.7}$$

このとき

$$|\psi(\boldsymbol{k})\rangle := \sum_i \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}_i} S_i^x |\Psi_0\rangle \tag{3.8}$$

はハミルトニアンの固有状態で $E_k \sim \boldsymbol{k}^2$. $|\boldsymbol{k}| \sim 1/L$ とすると $E_k \sim 1/L^2$ から $z \geq 2$ が分かる。

有効理論

Frustration-free field theory

FF 性は基底状態の性質なので、有効理論においても成り立ってほしい. 場の理論において FF 性をどう定義するべきか？

素朴な定義

基底状態 $|\Psi\rangle$ に対して $\forall x,\ \mathcal{H}(x)|\Psi\rangle = 0$ となるとき場の理論は FF であるという。

よって我々の予想は

- ギャップレスで FF な場の理論の動的臨界指数は $z \geq 2$.

場の理論の動的臨界指数の定義: くりこみ変換 $x \to \lambda x, t \to \lambda^z t$ に対して理論が不変。

RK Hamiltonian の場の理論的対応物 $=$ 確率過程量子化

まず d 次元の Euclidean な場の理論の作用 $S_{\mathrm{cl}}[\phi]$ を与える。スカラー場 ϕ と t を引数にとる確率密度 $P[\phi,t]$ に対し、以下のような Fokker-Planck 方程式に従う確率的ダイナミクスを考える。

$$\frac{\partial}{\partial t}P[\phi,t]=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d x\,\frac{\delta}{\delta\phi(x)}\left(\frac{\delta}{\delta\phi(x)}+\frac{\delta S_{\mathrm{cl}}}{\delta\phi(x)}\right)P[\phi,t] \tag{4.1}$$

この方程式は固定点 $P_0[\phi,t]=\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{cl}}[\phi]}/Z$ をもつ。次に $\psi[\phi,t]:=P[\phi,t]\mathrm{e}^{S_{\mathrm{cl}}[\phi]/2}$ によって波動関数を定義すると、以下の方程式が成り立つ。

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi[\phi,t]=-\int \mathrm{d}^d x\,\mathcal{H}(x)\psi[\phi,t], \tag{4.2}$$

$$\mathcal{H}(x)=\frac{1}{2}\left(-\frac{\delta}{\delta\phi(x)}+\frac{1}{2}\frac{\delta S_{\mathrm{cl}}}{\delta\phi(x)}\right)\left(\frac{\delta}{\delta\phi(x)}+\frac{1}{2}\frac{\delta S_{\mathrm{cl}}}{\delta\phi(x)}\right) \tag{4.3}$$

この $\mathcal{H}(x)$ によって定められる $d+1$ 次元場の量子論を $S_{\mathrm{cl}}[\phi]$ の確率過程量子化と呼ぶ。基底状態は $\psi_0[\phi]\propto\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{cl}}[\phi]/2}$ で与えられるので

$$\mathcal{H}(x)\psi_0[\phi]=\frac{1}{2}\left(-\frac{\delta}{\delta\phi(x)}+\frac{1}{2}\frac{\delta S_{\mathrm{cl}}}{\delta\phi(x)}\right)\left(\frac{\delta}{\delta\phi(x)}+\frac{1}{2}\frac{\delta S_{\mathrm{cl}}}{\delta\phi(x)}\right)\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{cl}}[\phi]/2}=0. \tag{4.4}$$

よってこの模型は FF。

ギャップレスな理論の確率過程量子化の例として Quantum Lifshitz model がある。古典的な作用として 2 次元の free-boson を採用する:

$$S_{\rm cl}[\phi] = \kappa \int \mathrm{d}^2x\, (\nabla\phi(x))^2. \tag{4.5}$$

Hamiltonian は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(x) &= \frac{1}{2}\left(-\frac{\delta}{\delta\phi(x)} + \frac{1}{2}\frac{\delta S_{\rm cl}}{\delta\phi(x)}\right)\left(\frac{\delta}{\delta\phi(x)} + \frac{1}{2}\frac{\delta S_{\rm cl}}{\delta\phi(x)}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(-\frac{\delta}{\delta\phi(x)} - \kappa\nabla^2\phi(x)\right)\left(\frac{\delta}{\delta\phi(x)} - \kappa\nabla^2\phi(x)\right) \\ &= -\frac{1}{2}\frac{\delta^2}{\delta\phi(x)^2} + \frac{\kappa^2}{2}(\nabla^2\phi(x))^2 + \mathrm{const.} \end{aligned} \tag{4.6}$$

対応する 3 次元の作用は

$$S[\phi] = \int \mathrm{d}^2x\,\mathrm{d}t \left(\frac{1}{2}(\partial_0\phi(x,t))^2 + \frac{\kappa^2}{2}(\nabla^2\phi(x,t))^2\right) \tag{4.7}$$

である。この作用はくりこみ変換 $x \to \lambda x,\ t \to \lambda^2 t$ に対して不変 $(z = 2)$。

Non-relativistic boson gas

スピン $S \to \infty$ の強磁性 Heisenberg 模型におけるマグノンの有効理論は

$$S = \int \mathrm{d}^d x \, \mathrm{d}t \, \psi^\dagger(x,t) \left(\mathrm{i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} \right) \psi(x,t) \tag{4.8}$$

である。Hamiltonian は

$$\mathcal{H}(x) = \frac{1}{2m} \nabla \psi^\dagger(x) \cdot \nabla \psi(x). \tag{4.9}$$

ただし $[\psi(x), \psi^\dagger(y)] = \delta(x-y)$ である。基底状態は Fock 真空 $|0\rangle$ で与えられる。

$$\mathcal{H}(x)|0\rangle = \frac{1}{2m} \nabla \psi^\dagger(x) \cdot \nabla \psi(x)|0\rangle = 0 \tag{4.10}$$

からこの模型は FF である。この作用はくりこみ変換 $x \to \lambda x,\ t \to \lambda^2 t$ に対して不変なので、$z = 2$ である。