

修論 (執筆中)

2025 年 10 月 11 日



# 目次

<b>第 1 章</b>	<b>励起ギャップのある 1 次元量子多体系</b>	<b>5</b>
1.1	1 次元 gapped 系におけるクラスター性 . . . . .	5
1.2	1 次元系でのエンタングルメントエントロピーの面積則 . . . . .	10
<b>第 2 章</b>	<b>行列積状態</b>	<b>13</b>
2.1	Schmidt 分解 . . . . .	13
2.2	開放端条件下の行列積状態 . . . . .	20
2.3	周期境界条件下で並進対称性のある行列積状態 . . . . .	26
2.4	blocking とか injectivity とか . . . . .	26
2.5	密度行列繰り込み群法 (DMRG) . . . . .	26
<b>第 3 章</b>	<b>対称性に保護されたトポロジカル相</b>	<b>27</b>
3.1	自明相と SSB 相 - 横磁場強磁性 Ising 模型 . . . . .	27
3.2	対称性の自発的破れによる相の分類 . . . . .	31
3.3	AKLT 模型 . . . . .	31
3.4	クラスター模型 . . . . .	34
3.5	SPT 相の物理的定義 . . . . .	36
3.6	SPT 相の分類 . . . . .	36
3.7	Decorated domain wall 構成 . . . . .	38
<b>第 4 章</b>	<b>多極子対称性下のトポロジカル相</b>	<b>39</b>
4.1	多極子対称性 . . . . .	39
4.2	MPS を用いた多極子 SPT 相の分類 . . . . .	41
<b>付録 A</b>	<b>線型代数に関する命題と証明</b>	<b>47</b>
A.1	行列の分解と幾何学的解釈 . . . . .	47
A.2	ノルム . . . . .	48
<b>付録 B</b>	<b>対称性と表現論</b>	<b>53</b>
B.1	群 . . . . .	53
<b>付録 C</b>	<b>群の表現</b>	<b>55</b>
C.1	線形表現 . . . . .	55
C.2	射影表現 . . . . .	62

付録 D	量子情報理論	65
D.1	純粋状態・混合状態 . . . . .	65
D.2	状態の純粋化 . . . . .	65
D.3	エンタングルメント . . . . .	65
D.4	忠実度 . . . . .	66
付録 E	本文で省略した証明	69
E.1	Thm. 1 (Lieb-Robinson 限界) の証明 . . . . .	69
E.2	Thm. 2 (1D SPT は相関関数が指数減衰) の証明 . . . . .	71
E.3	整数論に関する命題の証明 . . . . .	75
E.4	(4.2.3) の転送行列を用いた議論による証明 . . . . .	76
E.5	Prop. 2 の証明 . . . . .	78
参考文献		81
索引		84

## 序論

相図の分類は物性物理学における中心的な問題である。

## 第 1 章

# 励起ギャップのある 1 次元量子多体系

本章では 1 次元量子多体系が励起ギャップをもつときに現れる性質を整理する。熱力学極限を念頭に Hamiltonian の固有値の分布を調べると、基底状態と第一励起状態の間に有限のエネルギー差がある場合とない場合に大別できる。絶対零度極限において前者は絶縁体、後者は導体に対応する。

因果の流れとしては、

$$\begin{array}{ccc} \text{gapped Hamiltonian} & \xRightarrow{\text{Lieb-Robinson bound}} & \text{exponential decay of correlation} \\ & \xRightarrow{\text{quantum info. theory}} & \text{area law of entanglement entropy} \end{array}$$

が成り立つらしい。

### 1.1 1 次元 gapped 系におけるクラスター性

相対論的量子場理論では、質量を持つ粒子が媒介する相互作用は距離の指数関数的減衰を示す。相対論を要求しない物性理論でも、質量に対応して励起ギャップがあるならば基底状態の相関関数が

$$\langle \phi_0 | A_x B_y | \phi_0 \rangle - \langle \phi_0 | A_x | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | B_y | \phi_0 \rangle = \mathcal{O}(e^{-\text{const.} \times |x-y|})$$

のように指数関数的に減衰すること (クラスター性) が、数々の具体例を通じて期待されていた。 $A_x, B_y$  はそれぞれ格子点  $x, y$  上の局所演算子、 $|\phi_0\rangle$  は基底状態を表す。実際、この事実は [17] にて示された。<sup>\*1</sup> その背景に、非相対論的量子力学でも Lieb-Robinson 限界と呼ばれる実質的な因果律がある [21] ことは示唆的である。本章では命題を単純化して、[10] の Lecture 7, 8 を参考に定理を概観する。

まず問題設定を整理する。任意次元の格子  $\Lambda$  上の点  $x \in \Lambda$  ごとに局所 Hilbert 空間  $\mathcal{H}_x$  を定義する。全 Hilbert 空間は  $\mathcal{H} = \bigotimes_{x \in \Lambda} \mathcal{H}_x$  で与えられる。 $S \subset 2^\Lambda$  すなわち  $\Lambda$  の部分系の集合をとることで全系の Hamiltonian が

$$H = \sum_{X \in S} h_X$$

<sup>\*1</sup> 極限の取り方によっては [15] もこの事実を示しているが、結果の主眼はクラスター性でない。

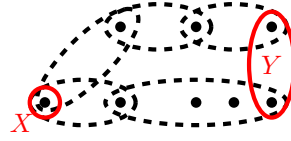


図 1.1: 格子系と相互作用の例。破線は局所 Hamiltonian が非自明に作用する範囲を表す。この図では  $d(X, Y) = 2$  である。

と書けるとする。ここで局所 Hamiltonian  $h_X$  は  $X \subset \Lambda$  に台 (非自明な作用) を持つ演算子である。 $X, Y \in S$  が同じサイト数であっても、 $X \neq Y$  であれば  $h_X$  と  $h_Y$  は異なる相互作用を表して良い。 $\sup_{X \in S} |X| = k < \infty$  のとき、つまり Hamiltonian の各項が最大でも  $k$  サイトにしか非自明に作用しないとき、 $H$  は  $k$ -local Hamiltonian であるという。この局所 Hamiltonian が作用する  $k$  サイトはどんなに離れていてもいいわけではなく、ある有限距離  $r$  以内のサイトにしか作用しないとする。すなわち、 $\forall X \in S, \forall x, y \in X, d(x, y) \leq r$  を要請する。<sup>\*2</sup>加えて、格子が適切な次元性を持っていることを

$$\exists \mu, s > 0 \quad \text{s.t.} \quad \forall x \in \Lambda, \sum_{X \in S, X \ni x} \|h_X\| \leq s e^{-\mu} \quad (1.1.1)$$

で課す。これは、1 点に相互作用が無限に集中するような系を除外するための条件である。右辺は定数であればよく、この形にしているのは後の議論を簡単にするためである。このとき明らかに局所 Hamiltonian は有界 ( $\sup_{X \in S} \|h_X\| < \infty$ ) である。

### 1.1.1 Lieb-Robinson bound

相対論的量子力学では空間的に十分離れた 2 点間の演算子は交換し、さらに時間発展しても光円錐が交わるまでは可換である。一方、凝縮系理論では相対論的效果を無視することが多く、一見このような因果律は要請されないように思える。しかし、[21] にて、局所的な相互作用を持つ量子多体系においても、情報伝搬速度の実質的な上限が存在することが示された。この結果は Lieb-Robinson 限界と呼ばれ、非相対論的量子力学における実質的な因果律を与える。

光円錐の直感を与えるために、以下の距離を定義する。

#### Def. 1: 相互作用距離

上で与えた  $S$  を用いて格子  $\Lambda$  の有界部分集合  $X, Y$  の間の距離を

$$d(X, Y) := \min |\{Z_i \in S \mid X \cap Z_1 \neq \emptyset, Z_i \cap Z_{i+1} \neq \emptyset, Z_n \cap Y \neq \emptyset\}_i|$$

とする。<sup>a</sup>

<sup>a</sup>  $X, Y$  は  $S$  の元である必要はない。

例えば Fig. 1.1 では  $d(X, Y) = 2$  である。時間発展を離散ステップで見ると、点  $x \in \Lambda$  が次の時刻で相互作用しうるのは、 $x$  に非自明な作用を与える  $h_X$  の台  $X(\ni x)$  に含まれ

<sup>\*2</sup> 現時点では距離  $d$  の選び方は特に問わない。

る点だけである。すなわち相互作用距離は Hamiltonian の各項を辿っていくことで二つの有界部分集合をつなぐ最短時間を表す。

上記の状況設定に対して、次の定理が成り立つ。

**Thm. 1: Lieb-Robinson 限界**

$k$ -local Hamiltonian  $H$  が (1.1.1) を満たすとする。この系の有界部分集合  $X, Y \subset \Lambda$  に台を持つ演算子  $A_X, B_Y$  があるとき、 $A_X$  の時間発展を  $A(t) := e^{iHt} A_X e^{-iHt}$  と表すと、

$$\|[A_X(t), B_Y]\| \leq 2\|A_X\| \|B_Y\| \min(|X|, |Y|) e^{-\mu d(X,Y)} (e^{2ks|t|} - 1) \quad (1.1.2)$$

が成り立つ。<sup>a</sup>

<sup>a</sup> 演算子に対するノルムは全て誘導ノルムである。Def. 4 を参照。

格子の次元や形状によらず成立することに注意。証明は技術的なので appendix E.1 に回す。

さらに、(1.1.2) で  $2ks/\mu = v_{LR}$  とおくと、直ちに以下が得られる。

**Cor. 1**

$k$ -local Hamiltonian  $H$  が Thm. 1 の条件を満たすとする。このとき、 $\mu, s, k$  のみに依存する定数  $v_{LR}$  が存在して、

$$\|[A_X(t), B_Y]\| \leq \|A_X\| \|B_Y\| \min(|X|, |Y|) e^{-\mu(d(X,Y) - v_{LR}t)}$$

が成り立つ。

各命題での左辺と因果律の関係がより明白になるように量子測定の例を紹介する。全体系を  $\Lambda$  とし、Alice は部分系  $X \subset \Lambda$ 、Bob は部分系  $Y \subset \Lambda$  にのみアクセスできるとする。初期状態は  $\hat{\rho}$  である。Alice が古典ビットの乱数を持っているとして以下のプロトコルを考察する。

1. Alice がビット 0 を得たとき、何もしない。ビット 1 を得たら、 $X$  に台を持つ Hamiltonian  $H' = \hat{O}_X$  によって微小時間  $\varepsilon$  だけ時間発展させて、状態を  $\hat{\rho}' = \hat{\rho} + i\varepsilon[\hat{O}_X, \hat{\rho}]$  に変化させる。
2. 全体系を時間  $t$  だけ時間発展させる。
3. Bob が  $Y$  に台を持つ観測量  $\hat{M}_Y$  を測定する。

Bob の測定結果の期待値の差は

$$\begin{aligned} \Delta O_Y &:= \left| \text{Tr}[\hat{\rho}' \hat{M}_Y(t)] - \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{M}_Y(t)] \right| \\ &= \varepsilon \left| \text{Tr}[\hat{O}_X, \hat{\rho}] \hat{M}_Y(t) \right| = \varepsilon \left| \text{Tr}[\hat{\rho} [\hat{M}_Y(t), \hat{O}_X]] \right| \\ &\leq \varepsilon \|\hat{O}_X, \hat{M}_Y(t)\| \end{aligned}$$

となる。最後の不等式では  $|\text{Tr} AB| \leq \|A\|_F \|B\|$  から導いている (cf. appendix A.2)。

Cor. 1 は Bob の測定結果の差が“光円錐”  $d = v_{LR}t$  からの距離に対して指数関数的に抑

図 1.2: Lieb-Robinson 限界における  $X, Y$  のサイズの影響

えられることを示しており、因果律を実質的に保証している。

(1.1.2) 右辺に  $X, Y$  のサイズが入っているのは、以下の例で大雑把に解釈できる。Fig. 1.2 のように  $Y$  として半無限領域をとる。Hamiltonian 各項が (1.1.1) で制限されているため、素朴な Hamiltonian を考えれば、Alice が微小時間でできる操作は  $X$  のサイズに比例する。Alice による変更が Bob の測定に影響を与えるので、 $\Delta O_Y$  は  $X$  のサイズに概ね比例する。appendix E.1 の証明を詳しく見ると、この直感がより明確になるだろう。

### 1.1.2 主張と証明の概略

#### Thm. 2: 1D SPT は相関関数が指数減衰

$k$ -local Hamiltonian  $H$  が

- 励起ギャップ  $\Delta > 0$  を持つ
- 基底状態が  $|\phi_0\rangle$  で一意<sup>a</sup>
- (1.1.1)

を満たすとする。部分集合  $X, Y \subset \Lambda$  に台を持つ演算子  $A_X, B_Y$  があるとき、

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle - \langle \phi_0 | A_X | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | B_Y | \phi_0 \rangle \\ \leq \mathcal{O}(\|A_X\| \|B_Y\| \min(|X|, |Y|) e^{-\tilde{\mu} d(X, Y)}) \end{aligned}$$

が成り立つ。ただし、 $\tilde{\mu} := \mu / (1 + 4ks/\Delta)$ 。

<sup>a</sup> 熱力学極限において基底状態が有限に縮退している場合は、基底状態空間への射影を常に入れ続けられ同様の定理が証明可能らしい。

「励起ギャップがあるなら相関関数は指数減衰」という定性的な主張には系の動的な情報が一切入っていないが、情報伝搬速度の上限を与える Lieb-Robinson bound が本質的に関わっていることには注目すべきである。

証明自体はテクニカルなので appendix E.2 に回すが、以下では証明の方針を概観する。

$\langle \phi_0 | A_X | \phi_0 \rangle = \alpha$ ,  $\langle \phi_0 | B_Y | \phi_0 \rangle = \beta$  のとき、 $A' = A - \alpha 1$ ,  $B' = B - \beta 1$  とおくと

$$\langle \phi_0 | A' B' | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | AB | \phi_0 \rangle - \alpha \beta$$

となるので、 $\alpha = \beta = 0$  と仮定しても一般性を失わない。

まず相関関数を Green 関数として書き直す。結論を先取りすると、最終的には適切な関数  $\hat{\Theta}$  を用いて

$$\langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle = \int dt \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \hat{\Theta}(-t) \quad (1.1.3)$$



のように書ける。演算子  $A$  をエネルギー固有状態で見たとときに行列要素を  $A_{ij} = \langle i | A | j \rangle$  で表す。ただし  $H |i\rangle = E_i |i\rangle$  であり、基底状態は  $|0\rangle = |\phi_0\rangle$  である。この行列要素の時間発展は

$$A_{ij}(t) = \langle i | e^{iHt} A e^{-iHt} | j \rangle = e^{i(E_i - E_j)t} A_{ij}$$

と表せ、 $E_i - E_j = \omega_{ij}$  とすると  $A$  の行列表示は

$$A(t) = \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & \ddots & & \omega < 0 & \\ & & \omega = 0 & & \\ & \omega > 0 & & \ddots & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

のように、対角成分が  $\omega = 0$ 、上三角成分が  $\omega < 0$ 、下三角成分が  $\omega > 0$  に対応する。

$A_{00} = \langle \phi_0 | A_X | \phi_0 \rangle = 0$  に注意して、相関関数は

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | A_X(t) B_Y | \phi_0 \rangle &= (1 \ 0 \ \cdots) A_X(t) B_Y \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \\ &= (1 \ 0 \ \cdots) \begin{pmatrix} 0 & * & * & \cdots \\ 0 & 0 & * & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \vdots \\ & & & \ddots \end{pmatrix} B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.1.4)$$

と書けるので、基底状態期待値に影響するのは  $A_X$  の  $\omega < 0$  の部分だけである。そこで、最右辺の上三角行列を構成する。  $\omega < 0$  の部分だけを取り出すには、 $A(t)$  の Fourier 変換に  $\omega < 0$  の部分だけを通すフィルター関数をかけて逆 Fourier 変換すれば良い。階段関数

$$\Theta(\omega) = \begin{cases} 1 & (\omega < 0) \\ 0 & (\omega \geq 0) \end{cases}$$

を導入して  $A$  の Fourier 変換にかけ、さらに Fourier 逆変換すると、 $\Theta$  の逆変換  $\hat{\Theta}$  を用いた畳み込み積分

$$A(t) * \hat{\Theta}(t) = \int dt' A(t') \hat{\Theta}(t - t')$$

を得るので、 $t = 0$  で評価して

$$A_{\omega < 0} := \int dt A_X(t) \hat{\Theta}(-t).$$

また、

$$\langle \phi_0 | B_Y A_{\omega < 0} | \phi_0 \rangle = (1 \ 0 \ \cdots) B_Y \begin{pmatrix} 0 & * & * & \cdots \\ & * & * & \cdots \\ 0 & \ddots & \vdots & \\ & & & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0$$

であるから、(1.1.3) が得られる。

(1.1.3) 右辺被積分関数の交換子では Lieb-Robinson 限界が使える。 $t$  が十分小さいときは Lieb-Robinson 限界が効いて  $[A_X(t), B_Y]$  が小さくなるが、積分は  $t$  が大きい部分

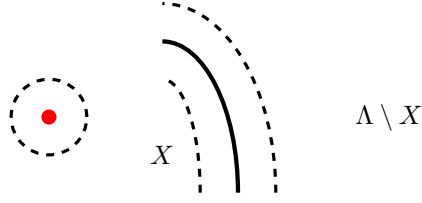


図 1.3: エンタングルメントの面積則。赤点とエンタングルする点は周囲の破線の円を超えないと期待すると、 $X$  と  $\Lambda \setminus X$  の境界 (太線) を跨ぐエンタングルメントの最大値は境界近傍 (破線内側) にある点の数に比例すると考えられる。

が支配的になる。そこで  $t$  が大きい部分の寄与を抑えるために Gaussian のフィルター関数を導入する。

$$\tilde{A}_X := \int dt \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} \quad (1.1.5)$$

しかし、新たに入れたフィルター関数のために、Fourier 空間でのフィルター  $\Theta$  がぼやけてしまう。具体的には、被積分関数の Fourier 変換が

$$\mathcal{F} \left( \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} \right) \simeq \langle \phi_0 | \tilde{A}_X(\omega) B_Y | \phi_0 \rangle \left( \Theta(-\omega) * e^{-\omega^2/4\alpha} \right)$$

となり、 $\alpha$  が大きいと基底状態期待値 (1.1.4) に  $\omega \geq 0$  の寄与が混入する。この

- (1.1.3) で  $t$  が大きい部分の寄与を抑えるには  $t$  が大きい方が望ましい
- (1.1.4) に  $\omega \geq 0$  の寄与を混入させないためには  $\alpha$  が小さい方が望ましい

のトレードオフを考慮して  $\alpha$  を適切に選ぶと、相関関数の最適な上界を得られる。

## 1.2 1次元系でのエンタングルメントエントロピーの面積則

前節で見たように、1次元 gapped 系ではクラスター性が満たされる。相関関数は古典相関に限らず量子相関も検出できるので、エンタングルメントも同様の振る舞いを示すことが期待される。より一般に、以下の直感から任意次元の gapped な格子系でエンタングルメントエントロピーが面積則を満たすことが期待されている。相関関数が指数的に減衰する系では、ある点上の状態とエンタングルするのはその点から有限距離以内にある点に限られると期待される。Fig. 1.3 のように全体系を部分系  $X \subset \Lambda$  とそれ以外に分割したとき、境界を跨ぐようなエンタングルメントは境界近傍の点に限られる。エンタングルメントエントロピーは  $X$  とそれ以外の間のエンタングルメントの量を測る指標なので (cf. appendix D.3)、上限は境界の面積に比例すると考えられる。特に1次元系では領域の境界が点になるので、どのような連結領域  $X$  を取ってもエンタングルメントエントロピーは定数で抑えられると期待される。

実際、gapped 系ではエンタングルメントエントロピーが定数で抑えられることが [16] にて示されており、[3] で改善された。[4] にて、1次元系ではクラスター性がこの十分条件であることが示されている。Thm. 3 と合わせると、1次元 gapped 系ではエンタングルメントエントロピーが面積則を満たす。

長さ  $L$  の周期境界条件の格子系  $\Lambda$  において、 $X, Y \subset \Lambda$  を連結部分集合とする。また  $B(X)$  を  $X$  に台を持つ全有界演算子の集合とする。状態  $\rho_{XY}, \rho_X, \rho_Y$  が与えられたとき、

$X, Y$  の相関を

$$\text{Cor}(X : Y) := \max_{\substack{A_X \subset \mathcal{B}(X), \|A_X\| \leq 1, \\ B_Y \subset \mathcal{B}(Y), \|B_Y\| \leq 1}} |\text{Tr}[(\rho_{XY} - \rho_X \otimes \rho_Y)(A_X \otimes B_Y)]|$$

で与える。

**Def. 2: 相関の  $(\xi, l_0)$ -指数減衰**

状態  $\rho$  が  $(\xi, l_0)$ -指数減衰するとは、任意の連結部分集合  $X, Y \subset \Lambda$  に対して、 $d(X, Y) \geq l_0$  ならば

$$\text{Cor}(X : Y) \leq 2^{-l/\xi}$$

が成り立つことをいう。 $\xi$  を  $\rho$  の相関長という。

**Thm. 3: 1D でクラスター性があるならエンタングルメントエントロピーは面積則**

$L$  サイトの周期境界条件下の格子系  $\Lambda$  で定義された純粋状態  $|\psi\rangle$  が  $L \geq Cl_0/\xi$  なる定数により  $(\xi, l_0)$ -指数減衰を満たすとする。このとき、 $\Lambda$  の任意の連結部分集合  $X$  の von Neumann エントロピー  $S(X)$  は

$$S(X) \leq cl_0 \exp(c \ln(\xi)\xi)$$

と評価できる。ただし、 $C, c, c' > 0$  は状態に依存しない定数。

証明の概略を示す。系を  $ABC$  の3つの連結部分集合に分割し、 $A$  は  $B$  とほぼ decouple していて、さらに  $A$  は最大混合状態に近いとする。Uhlman の定理 (appendix に書きそう) から  $A$  は  $C$  との相関が強いことが示せる。したがって  $AB$  間のエントロピーが大きいとき、 $A$  と  $C$  の相関は下限に近づく。一般に  $AB$  のエントロピーが最大に近くなっても、 $AB$  を decouple するような測定をすることでなんとかするらしい。 $A$  の混合を保ちながら  $B$  と decouple させるという問題はエンタングルメント蒸留として知られている。



## 第 2 章

# 行列積状態

本章では 1 次元 gapped 量子スピン系の基底状態を効率的に表現する行列積状態 (matrix product state; MPS) について扱う。数学的な定式化は [11] ですすでに与えられており、重要な結果の多くはここで証明されている。

本章では状態は専らスピン系を念頭に置く。

本章は主に [9, 29] を参考にした。

## 2.1 Schmidt 分解

### 2.1.1 行列の低ランク近似と特異値分解

$L$  サイトの Hilbert 空間  $\mathcal{H} = \bigotimes_{k=1}^L \mathcal{H}_k$  上の量子多体系の純粋状態

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} M_{i_1, \dots, i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle \quad (M_{i_1, \dots, i_L} \in \mathbb{C}, 1 \leq i_k \leq d_k = \dim \mathcal{H}_k) \quad (2.1.1)$$

を効率的に近似する方法を考察する。ここで  $i_k$  はサイト  $k$  における Hilbert 空間  $\mathcal{H}_k$  の基底を表し、 $M_{i_1, \dots, i_L} \in \mathbb{C}$  である。簡単のため、全系の Hilbert 空間の次元は有限であるとする。

一旦問題を簡単にして  $L = 2$  とする。 $i_1 \in \{1, \dots, m\}, i_2 \in \{1, \dots, n\}$  を走るとすれば、 $M_{i_1, i_2}$  は  $m \times n$  行列  $M$  の成分とみなせる。この行列を適切に近似することで状態  $|\psi\rangle$  を近似する。 $M$  は一般に正方行列ではないので、 $M$  の情報は  $\text{rank } M$  でおおよそ評価せざるを得ないだろう。<sup>\*1</sup>そこで近似行列  $\tilde{M}$  として、ランクが小さくかつ  $M$  に近い行列を探す。 $M$  との近さを評価するにはノルム  $\|M - \tilde{M}\|$  が必要だが、計算が比較的容易な行列のノルムとして Frobenius ノルム

$$\|M\|_F := \sqrt{\text{Tr } M^\dagger M} = \sqrt{\sum_{i,j} |M_{ij}|^2}$$

がある。これにより状態の近似は一旦以下の問題に書き換えられる。

---

<sup>\*1</sup> ここでの情報とは情報理論における情報量を意味せず、基底を適切に変えたときに非ゼロになる成分としている。

**Problem 1: 行列の低ランク近似問題**

与えられた  $m \times n$  行列  $M$  と  $\tilde{r} \in \mathbb{N}$  に対して

$$\min_{\tilde{M}} \|M - \tilde{M}\|_F^2 \quad \text{s.t.} \quad \text{rank } \tilde{M} \leq \tilde{r}$$

を実現する  $\tilde{M}$  を求めよ。

$\tilde{r} \geq \text{rank } M$  ならば自明に  $\tilde{M} = M$  が解なので、以下  $\tilde{r} \leq \text{rank } M$  を仮定する。

Problem 1 を解くに当たって、最適化問題の解法として頻用される Lagrange の未定乗数法を用いる。またランクが問題設定に大きく影響しているので、階数分解<sup>??</sup>を用いる。最適近似を与える行列を階数分解により  $\tilde{M} = \tilde{B}\tilde{C}$  として、さらに  $\tilde{B}$  が  $\tilde{r}$  個の正規直交行列を並べて構成されることを踏まえ制約条件に  $\tilde{B}^\dagger \tilde{B} = 1_{\tilde{r}}$  を課す。<sup>\*2</sup>Lagrange の未定乗数  $\lambda_{ij} \in \mathbb{R}$  を成分とする行列  $\tilde{\Lambda}$  により

$$\begin{aligned} L &= \|M - \tilde{B}\tilde{C}\|_F^2 + \sum_{i,j=1}^{\tilde{r}} \lambda_{ij} (\tilde{\mathbf{b}}_i \cdot \tilde{\mathbf{b}}_j - \delta_{ij}) \\ &= \text{Tr} \left[ (M - \tilde{B}\tilde{C})^\dagger (M - \tilde{B}\tilde{C}) \right] + \sum_{i,j=1}^{\tilde{r}} \tilde{\Lambda}_{ij} (\tilde{\mathbf{b}}_i \cdot \tilde{\mathbf{b}}_j - \delta_{ij}) \\ &= \text{Tr} \left[ M^\dagger M - M^\dagger \tilde{B}\tilde{C} - (\tilde{B}\tilde{C})^\dagger M + \tilde{C}^\dagger \tilde{B}^\dagger \tilde{B}\tilde{C} \right] + \text{Tr} (\tilde{\Lambda} \tilde{B}^\dagger \tilde{B} - \tilde{\Lambda}) \\ &= \text{Tr} \left[ M^\dagger M - M^\dagger (\tilde{B}\tilde{C}) - (\tilde{B}\tilde{C})^\dagger M + \tilde{C}^\dagger \tilde{B}^\dagger \tilde{B}\tilde{C} \right] + \text{Tr} (\tilde{\Lambda} \tilde{B}^\dagger \tilde{B} - \tilde{\Lambda}) \end{aligned}$$

とする。制約条件は  $i, j$  の入れ替えで対称になるので、 $\tilde{\Lambda}$  も対称行列にできる。 $\tilde{B}$  の成分で微分して停留点を求めると

$$0 = \frac{\partial L}{\partial \tilde{b}_{ij}} = (-\tilde{C}M^\dagger + \tilde{\Lambda}\tilde{B}^\dagger)_{ji}$$

$\tilde{C}$  の成分で微分して停留点を求めると

$$0 = \frac{\partial L}{\partial \tilde{c}_{ij}} = (-M^\dagger \tilde{B} + \tilde{C}^\dagger)_{ji}$$

であるから、 $\tilde{\Lambda}^\dagger = \tilde{\Lambda}$  に注意して

$$M\tilde{C}^\dagger = \tilde{B}\tilde{\Lambda}, \quad \tilde{C} = \tilde{B}^\dagger M$$

なる  $\tilde{\Lambda}, \tilde{B}, \tilde{C}$  が停留点を与える。さらに  $\tilde{\Lambda}$  は実対称行列 (i.e. エルミート行列) であるから、 $\tilde{r} \times \tilde{r}$  ユニタリ行列  $\tilde{D}$  と実対角行列  $\tilde{\Delta}$  により  $\tilde{\Lambda} = \tilde{D}\tilde{\Delta}\tilde{D}^\dagger$  と対角化できる。よって近似行列  $\tilde{M}$  は条件式

$$M(\tilde{D}^\dagger \tilde{C})^\dagger = \tilde{B}\tilde{D}\tilde{\Delta}, \quad \tilde{D}^\dagger \tilde{C} = (\tilde{B}\tilde{D})^\dagger M \quad (2.1.2)$$

を満たす行列の積  $\tilde{B}\tilde{C}$  として与えられる。

$\tilde{B}, \tilde{C}$  の意味合いがより明確になるように条件式を変形する。(2.1.2) 第2式を第1式に代入したものと、第1式左から  $M^\dagger$  を作用させて第2式を代入したものを使うと

$$\begin{cases} MM^\dagger(\tilde{B}\tilde{D}) = (\tilde{B}\tilde{D})\tilde{\Delta} \\ M^\dagger M(\tilde{D}^\dagger \tilde{C})^\dagger = (\tilde{D}^\dagger \tilde{C})^\dagger \tilde{\Delta} \end{cases} \quad (2.1.3)$$

<sup>\*2</sup> 以下、 $\tilde{r}$  に依存する最適解を与える量は  $\tilde{\cdot}$  を付けて区別する。

と書き換えられる。 $\tilde{U} := \tilde{B}\tilde{D}$  の  $\tilde{r}$  本の列ベクトルは  $MM^\dagger$  の固有ベクトル、 $\tilde{D}^\dagger\tilde{C}$  の  $\tilde{r}$  本の行ベクトルは  $M^\dagger M$  の固有ベクトルであり、固有値は  $\tilde{\Delta}$  の対角成分であることがわかる。ともに半正定値エルミート行列  $MM^\dagger, M^\dagger M$  の固有方程式なので、固有値を与える対角行列  $\tilde{\Delta}$  は非負の実数を対角成分に持つ。また  $\tilde{U}^\dagger\tilde{U} = 1_{\tilde{r}}$  なので、 $\tilde{U}$  の列ベクトルは正規直交基底を組む。一方

$$\tilde{D}^\dagger\tilde{C}\tilde{C}^\dagger\tilde{D} \stackrel{(2.1.2)}{=} \tilde{U}^\dagger MM^\dagger \tilde{U} \stackrel{(2.1.3)}{=} \tilde{U}^\dagger \tilde{U} \tilde{\Delta} = \tilde{\Delta}$$

より、 $\tilde{D}^\dagger\tilde{C}$  の行ベクトルのノルムは  $\tilde{\Delta}$  の対角成分の平方根で与えられる。 $\tilde{\Sigma} := \sqrt{\tilde{\Delta}}$  により  $\tilde{V} := \tilde{C}^\dagger\tilde{D}\tilde{\Sigma}^{-1}$  とおくと  $\tilde{V}^\dagger\tilde{V} = 1_{\tilde{r}}$  となるので、 $\tilde{V}$  は  $\tilde{r}$  個の  $n$  次元正規直交列ベクトルを持つ。以上をまとめると、(2.1.2) と (2.1.3) はそれぞれ

$$\begin{cases} M\tilde{V}\tilde{\Sigma} = \tilde{U}\tilde{\Sigma}^2, \\ \tilde{\Sigma}\tilde{V}^\dagger = \tilde{U}^\dagger M, \end{cases} \quad \begin{cases} MM^\dagger\tilde{U} = \tilde{U}\tilde{\Sigma}^2, \\ M^\dagger M\tilde{V}\tilde{\Sigma}^{-1} = \tilde{V}\tilde{\Sigma} \end{cases}$$

である。

最適化問題 Problem 1 に戻る。停留点における目的関数の値は

$$\|M - \tilde{M}\|_F^2 = \text{Tr} \left[ M^\dagger M - M^\dagger \tilde{U} \tilde{\Sigma} \tilde{V} - (\tilde{U} \tilde{\Sigma} \tilde{V})^\dagger M + \tilde{\Sigma} \tilde{V}^\dagger \tilde{V} \tilde{\Sigma} \right] = \text{Tr} \left[ M^\dagger M - \tilde{\Sigma}^2 \right]$$

である。 $\tilde{\Sigma}^2 = \tilde{\Delta}$  は  $M^\dagger M$  の固有値のうち  $\tilde{r}$  個を選んで並べた対角行列なので、目的関数を最小にするには  $\tilde{\Sigma}$  として可能な限り大きな値の対角行列を選ばばよい。よって最適な  $\tilde{\Sigma}$  は固有値の並べ方の順番を除いて一意に定まる。

特に  $\text{rank } \tilde{\Sigma} = \tilde{r} = \text{rank } M$  の場合、 $U^\dagger U = V^\dagger V = 1_{\text{rank } M}$  を満たす  $M = U\Sigma V^\dagger$  がこの条件を満たす ( $\text{rank } \tilde{\Sigma} < \text{rank } M$  では  $M$  と  $\tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V}^\dagger$  の間でランクが異なるため、この形は解にならない)。ここまでの事実は以下のようにまとめられる。

#### Thm. 4: 特異値分解

任意の  $m \times n$  行列  $M$  のランクを  $r$  とする。 $m \times r$  行列  $U$ ,  $n \times r$  行列  $V$  と  $r \times r$  対角行列  $\Sigma$  を用いて

$$M = U\Sigma V^\dagger$$

と分解できる。ここで  $U^\dagger U = V^\dagger V = 1_r$  を満たす。<sup>a</sup> また  $\Sigma$  の対角成分 (特異値) は正であり、並び替えを除いて一意に定まる。

<sup>a</sup> 本稿ではこの条件をユニタリ性、 $U, V$  をユニタリと呼ぶ。 $U, V$  は一般に正方行列ではないので、 $UU^\dagger = 1_m, VV^\dagger = 1_n$  とは限らない。

#### Thm. 5: Eckart-Young の定理

$m \times n$  行列  $M$  の特異値分解を

$$M = \sum_{k=1}^{\text{rank } M} \sigma_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_k^\dagger$$

として、 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{\text{rank } M} > 0$  とする。

$$M_{\tilde{r}} := \sum_{k=1}^{\tilde{r}} \sigma_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_k^\dagger$$

はランク  $\tilde{r}$  の行列で  $M$  を最もよく近似する。すなわち任意のランク  $\tilde{r}$  以下の行列  $M'$  に対して

$$\|M - M'\|_F^2 \geq \|M - M_{\tilde{r}}\|_F^2 = \sum_{k=\tilde{r}+1}^{\text{rank } M} \sigma_k^2.$$

特異値分解は図式で表すことができる。まず行列  $(M_{ij})_{i,j}$  には  $i \in \{1, \dots, m\}, j \in \{1, \dots, n\}$  を走る 2 本の脚がある。これを

$$M = \text{---} \boxed{M} \text{---}$$

と表す。特に明示しない限り右側が  $j$  の脚、左側が  $i$  の脚と約束する。また対角行列を黒丸で表し

$$\text{---} \overset{\Sigma}{\bullet} \text{---}$$

のようにする。この記法を用いると特異値分解は

$$\text{---} \boxed{M} \text{---} = \text{---} \boxed{U} \text{---} \overset{\Sigma}{\bullet} \text{---} \boxed{V^\dagger} \text{---}$$

と対応する。つながっている脚は、添え字がとり得る値全てにわたって同じ添え字どうしの積を足しあげることを意味する。例えば

$$\left( \text{---} \boxed{M} \text{---} \boxed{B} \text{---} \right)_{i,j} = \sum_k M_{ik} B_{kj}$$

である。次節以降では行列に限らず高階テンソルにもこの記法を用いるが、脚が増えるだけで縮約のルールは変わらない。本稿を通してこの記法がたびたび登場する。

次節に移る前に、特異値分解の直感的解釈を与える。特異値分解の式から直ちに  $Mv_k = \sigma_k u_k$  が得られるが、これは線形変換  $M: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^m$  が  $v_k$  を長さ  $\sigma_k$  倍して方向  $u_k$  に移すことを表している。appendix A.1 も参照。また Thm. 5 により特異値  $\sigma_k$  が大きいほど  $M$  の情報を多く持っていると解釈できる。

この解釈を視覚的に理解できる画像圧縮の例を紹介する。<sup>\*3</sup>グレースケールの画像は各ピクセルの明るさを 0 から 255 までの整数で表した行列で表現される。Fig. 2.1 は  $3024 \times 4032$  画素の画像を特異値分解し、特異値の大きい順に残して近似したものである。合計 3024 個の特異値のうちごくわずかで画像を復元できることがわかる。実際 Fig. 2.2 に示すように、この画像では少数の特異値が大きな寄与を有し、大部分の特異値は非常に小さい。

### 2.1.2 2 粒子系の Schmidt 分解

我々がはじめ取り組んでいた問題は  $L$  サイトの純粋状態の近似であった。今、簡単のために  $L = 2$  として、それぞれのサイトを  $A, B$  とする。合成系の Hilbert 空間は各サイ

<sup>\*3</sup> <https://github.com/lowtonevoice/masterthesis/tree/main/demonstration/SVD> にここで用いた画像圧縮の Python コードと画像を公開している。



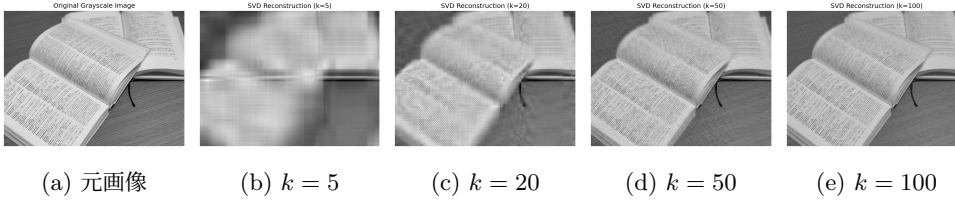


図 2.1: 元画像 (左端) と、特異値によるランク  $k$  の低ランク近似で得られる画像 (右 4 枚)。

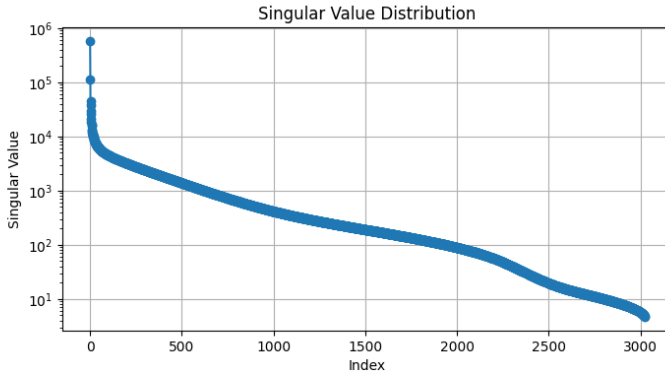


図 2.2: Fig. 2.1 の元画像の特異値分布。

トの Hilbert 空間の直積  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  で与えている。各サイトの Hilbert 空間の正規直交基底により 2 サイトの規格化された純粋状態は

$$|\Phi\rangle_{AB} = \sum_{i=1}^{\dim \mathcal{H}_A} \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_B} M_{ij} |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B \quad \left( M_{ij} \in \mathbb{C}, \sum_{i,j} |M_{ij}|^2 = 1 \right)$$

と書ける。行列  $(M_{ij})_{i,j}$  を特異値分解して

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle_{AB} &= \sum_{i,j} \sum_{k=1}^{\text{rank } M} u_{ik} \sigma_k (v^\dagger)_{kj} |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B \\ &= \sum_{k=1}^{\text{rank } M} \sigma_k \left( \sum_i |i\rangle_A u_{ik} \right) \left( \sum_j (v^\dagger)_{kj} |j\rangle_B \right) \end{aligned}$$

とできる。

$$\left( \sum_{i_1} u_{ki_1}^* \langle i_1 |_A \right) \left( \sum_{i_2} u_{i_2 l} |i_2\rangle_A \right) = \sum_i u_{ki}^* u_{il} = \delta_{kl}$$

より  $\sum |i\rangle_A u_{ik}$  は正規直交基底を組む。 $\sum (v^\dagger)_{kj} |j\rangle_B$  も同様。規格化条件から  $\sum_k \sigma_k^2 = 1$  である。以上は次の定理にまとめられる。

**Thm. 6: Schmidt 分解**

有限次元 Hilbert 空間上の 2 サイト純粋状態は各サイトの Hilbert 空間の正規直交基底  $\{|\phi_k\rangle_A\}, \{|\psi_k\rangle_B\}$  により

$$|\Phi\rangle_{AB} = \sum_{k=1}^d \sigma_k |\phi_k\rangle_A \otimes |\psi_k\rangle_B \quad (2.1.4)$$

と分解できる。ここに、

$$\sum_{k=1}^d \sigma_k^2 = 1$$

を満たす。\$d\$ を \$|\Phi\rangle\_{AB}\$ の Schmidt ランクという。

??の系として以下が示される。

**Cor. 2: Schmidt 分解は純粋状態の最適近似**

2 サイト純粋状態 \$|\Phi\rangle\_{AB}\$ の Schmidt 分解を (2.1.4) で与える。ただし \$\sigma\_1 \ge \sigma\_2 \ge \dots > 0\$ とする。Schmidt ランク \$\tilde{d}\$ 以下の状態で \$|\Phi\rangle\_{AB}\$ を最もよく近似する状態は

$$|\Phi_{\tilde{d}}\rangle_{AB} := \sum_{k=1}^{\tilde{d}} \sigma_k |\phi_k\rangle_A \otimes |\psi_k\rangle_B$$

である。より厳密には、Schmidt ランク \$\tilde{d}\$ 以下の任意の状態 \$|\Psi\rangle\_{AB}\$ は

$$||\Phi\rangle_{AB} - |\Psi\rangle_{AB}|^2 \geq ||\Phi\rangle_{AB} - |\Phi_{\tilde{d}}\rangle_{AB}|^2 = \sum_{k>\tilde{d}+1} \sigma_k^2$$

となる。

最後の誤差評価は

$$||\Phi\rangle_{AB} - |\Phi_{\tilde{d}}\rangle_{AB}|^2 = \left| \sum_{k>\tilde{d}} \sigma_k |\phi_k\rangle_A \otimes |\psi_k\rangle_B \right|^2 = \sum_{k>\tilde{d}} \sigma_k^2$$

から得られる。

Schmidt 分解によりエンタングルメントエントロピーが簡単に評価できる。まず \$B\$ 系をトレースアウトして

$$\rho_A := \text{Tr}_B[|\Phi\rangle_{AB} \langle \Phi|_{AB}] = \sum_{k \in \mathbb{N}} \sigma_k^2 |\phi_k\rangle_A \langle \phi_k|_A$$

であり、\$A\$ のエンタングルメントエントロピーは

$$S_A := -\text{Tr}[\rho_A \ln \rho_A] = -\sum_{k \in \mathbb{N}} \sigma_k^2 \ln \sigma_k^2$$

となる。右辺は \$A, B\$ に依存しない値なので、\$S\_A = S\_B\$ が成り立つことがわかる。 $\sum_k \sigma_k^2 = 1$  とエンタングルメントエントロピーが凹関数であることから、Schmidt ランクで上限が決まる。

$$S\left(\sum_{k=1}^d \sigma_k^2 |\phi_k\rangle\langle \phi_k|\right) \leq \sum_{k=1}^d \sigma_k^2 S(|\phi_k\rangle\langle \phi_k|)$$

### 2.1.3 3 粒子以上での Schmidt 分解の不可能性

$L = 2$  では Schmidt 分解によって状態を近似した。同様の近似方法が  $L > 2$  でも期待される。しかし結論を先に述べると、3 サイト以上の量子系では常に Schmidt 分解の対応物が存在するとは限らない。以下、この事実を確認する。

#### Schmidt 分解の部分トレース

$L = 3$  の各サイトを  $A, B, C$  とする。3 サイト状態  $|\psi\rangle$  が

$$|\psi\rangle = \sum_{k \in \mathbb{N}} \sigma_k |a_k\rangle_A |b_k\rangle_B |c_k\rangle_C$$

のような Schmidt 分解が可能であるとする。右辺のケットベクトルは全て正規直交基底を組むことに注意すると、例えば部分系  $A$  に関する部分トレースをとることで

$$\rho_{BC} = \text{Tr}_A[|\psi\rangle\langle\psi|] = \sum_{k \in \mathbb{N}} \sigma_k^2 |b_k\rangle_B |c_k\rangle_C \langle b_k|_B \langle c_k|_C$$

の separable 状態となる。一般にサイト数に関わらず、Schmidt 分解の部分トレースは separable 状態である。逆に、部分トレースが separable でない、すなわち部分系の状態が古典混合で表せない場合は Schmidt 分解で表すことができない。

以下、具体的にこのような状態の存在を確認する。議論を簡単にするために、qubit 系を考察する。 $L = 3$  の純粋状態は

$$|000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle, |100\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |111\rangle$$

の 8 つの基底で張られる。計算の利便性を考慮し、類似した基底を等重率で重ね合わせたエンタングルメントのある状態を構成すると、最も簡単なものは

$$|GHZ\rangle = (|000\rangle + |111\rangle)/\sqrt{2}$$

とできるだろう (GHZ 状態)。しかし部分トレースをとると

$$\text{Tr}_A[|GHZ\rangle\langle GHZ|] = \frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|)$$

となり、separable 状態である。次に簡単なエンタングル状態として、

$$|W\rangle = (|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle)/\sqrt{3}$$

の  $W$  状態を考える。この状態の部分トレースは

$$\rho_{BC} = \frac{1}{3}[|00\rangle\langle 00| + (|01\rangle + |10\rangle)(\langle 01| + \langle 10|)] = \frac{2}{3}|\phi^+\rangle\langle\phi^+| + \frac{1}{3}|00\rangle\langle 00| \quad (2.1.5)$$

と表せ、 $|\phi^+\rangle = (|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}$  の最大エンタングル状態を含んでいる。このことから  $W$  状態は Schmidt 分解できないことがわかる。

### 混合状態のエンタングルメント解析

より定量的に議論するために、混合状態のエンタングルメント解析を行う。混合状態のエンタングルメントの定量化には何種類かの方法があるが、ここでは着目している状態が最大エンタングル状態 (Bell 状態) とどれだけ類似しているかを測る指標となる忠実度を用いる (忠実度については appendix D.4 を参照)。この手法の利点として、Hilbert 空間の次元に依存しない評価ができることが挙げられる。

まずは separable 状態  $\rho_{BC}$  と Bell 状態の忠実度を評価する。 $\rho_{BC}$  が純粋状態のとき、 $\rho_{BC} = |\psi\rangle_B |\phi\rangle_C \langle\psi|_B \langle\phi|_C$  と書ける。

$$|\langle\Phi|\psi_B\phi_C\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \sum_{i=0,1} \langle i|\psi\rangle \langle i|\phi\rangle \right| = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \sum_{i=0,1} (\langle i|\psi\rangle^* |i\rangle)^\dagger |\phi\rangle \right|$$

である。

$$|\psi^*\rangle := \sum_{i=0,1} |i\rangle \langle i|\psi\rangle^* = \sum_{i=0,1} \langle\psi|i\rangle |i\rangle$$

で定義すると、

$$|\langle\Phi|\psi_A\phi_B\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} |\langle\psi^*|\phi\rangle| \leq \frac{1}{\sqrt{2}}$$

となる。ゆえに  $\mathcal{F}(\rho_{BC}, |\phi^+\rangle \langle\phi^+|) \leq 1/\sqrt{2}$ . separable 状態  $\rho_{BC}$  が混合状態のとき状態は  $\rho_{BC} = \sum_k p_k |\psi_k\rangle_B |\phi_k\rangle_C \langle\psi_k|_B \langle\phi_k|_C$  の形で書けるが、忠実度の凸性??から

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\rho_{BC}, |\phi^+\rangle \langle\phi^+|) &\leq \sum_k p_k \mathcal{F}(|\psi_k\rangle_B |\phi_k\rangle_C \langle\psi_k|_B \langle\phi_k|_C, |\phi^+\rangle \langle\phi^+|) \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k p_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

を満たす。

一方で W 状態の部分トレース (2.1.5) と Bell 状態の間の忠実度を評価すると、

$$\mathcal{F}(W_{BC}, |\phi^+\rangle \langle\phi^+|) = \sqrt{\frac{2}{3}} > \frac{1}{\sqrt{2}}$$

となる。

したがって W 状態は Schmidt 分解できないことが定量的にも示された。

## 2.2 開放端条件下の行列積状態

前節で見たように、 $L > 2$  では全系を一度に近似する Schmidt 分解の対応物は存在しない。しかし全系の Hilbert 空間を大きく 2 分割して 2 サイト系と思えば部分的に特異値分解が可能である。開放端条件を具体例にとると、端から順に特異値分解を繰り返すことで、行列積状態 (matrix product state; MPS) と呼ばれる状態の表現を得られる。

### 2.2.1 標準形 MPS

(2.1.1) に現れる  $M_{i_1, \dots, i_L}$  の脚を  $i_L$  とそれ以外に分けて  $(d_1 \cdots d_{L-1}) \times d_L$  行列とみなす。物理的には 1 番目から  $(L-1)$  番目のサイトをまとめて一つのサイトとみなすこと

に対応する。特異値分解により

$$M_{i_1, \dots, i_L} = \begin{array}{c} \dots \\ \hline \boxed{M_{i_1, \dots, i_L}} \end{array} = \begin{array}{c} \dots \\ \hline \boxed{U_{L-1}} \end{array} \xrightarrow{\Sigma_{L-1}} \boxed{V_L^\dagger}$$

とできる。Schmidt ランク  $r_{L-1} = \text{rank } \Sigma_{L-1}$  は  $\min(d_1 + \dots + d_{L-1}, d_L) \leq (d_1 + \dots + d_L)/2$  である。 $M$  から上に伸びる細線で表した Hilbert 空間の脚を一般に physical な脚、特異値分解で新たに生じた横向きの太線で表す脚を virtual な脚と呼ぶ。Thm. 5 のユニタリ性は

$$\begin{aligned} 1_{r_{L-1}} &= V_L^\dagger V_L = \begin{array}{c} \hline \boxed{V_L^\dagger} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{V_L} \hline \end{array} \\ &= U_{L-1}^\dagger U_{L-1} = \begin{array}{c} \dots \\ \hline \boxed{U_{L-1}^\dagger} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{U_{L-1}} \hline \end{array} \end{aligned}$$

と記述される。 $\dagger$  は virtual と physical を合わせた脚全体に関する転置と複素共役を表す。(2.1.1) の  $|\psi\rangle$  の規格化条件は

$$1 = \begin{array}{c} \boxed{M_{i_1, \dots, i_L}} \\ \dots \\ \boxed{M_{i_1, \dots, i_L}} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{U_{L-1}} \\ \dots \\ \boxed{U_{L-1}} \end{array} \xrightarrow{\Sigma_{L-1}} \boxed{V_L^\dagger} \xrightarrow{\Sigma_{L-1}} \boxed{V_L^\dagger} = \text{Tr}[\Sigma_{L-1}^2]$$

と表される。ただし上段にある行列要素は全て複素共役を取るものとする。

1 番目から  $L-2$  番目の physical な脚を 1 本とみなし、 $L-1$  番目の physical な脚と  $V_L^\dagger$  へ伸びる virtual な脚と合わせて 1 本とすると再度特異値分解を適用できて、

$$\begin{aligned} \begin{array}{c} \dots \\ \hline \boxed{U_{L-1}} \end{array} \xrightarrow{\Sigma_{L-1}} \boxed{V_L^\dagger} &= \begin{array}{c} \dots \\ \hline \boxed{U_{L-2}} \end{array} \xrightarrow{\Sigma_{L-2}} \boxed{V_{L-1}^\dagger} \boxed{V_L^\dagger} \\ 1_{r_{L-2}} &= \begin{array}{c} \hline \boxed{V_{L-1}^\dagger} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{V_{L-1}} \hline \end{array} = \begin{array}{c} \dots \\ \hline \boxed{U_{L-2}^\dagger} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{U_{L-2}} \hline \end{array} \end{aligned}$$

が成り立つ。特に  $U_{L-1}^\dagger U_{L-1} = 1$  の条件式と合わせて

$$\begin{array}{c} \hline \boxed{V_{L-1}} \end{array} \xrightarrow{\Sigma_{L-2}^2} \boxed{V_{L-1}^\dagger} \hline = \Sigma_{L-1}^2$$

も成立する。Schmidt ランクは  $r_{L-2} = \min(d_1 + \dots + d_{L-2}, d_{L-1} + r_{L-1}) \leq (d_1 + \dots + d_L)/2$  である。規格化条件から  $\text{Tr}[\Sigma_{L-2}^2] = 1$  である。

これを繰り返すことで、

$$\begin{array}{c} \dots \\ \hline \boxed{M_{i_1, \dots, i_L}} \end{array} = \boxed{U_1} \xrightarrow{\Sigma_1} \boxed{A_2} \xrightarrow{\quad} \boxed{A_3} \xrightarrow{\quad} \dots \xrightarrow{\quad} \boxed{A_L},$$

の形を得る。ここで  $A_k = V_k^\dagger$  とした。 $U_1$  の virtual な脚は右向きしかないが、左向きにランク 1 の脚がある virtual  $1 \times (\text{virtual } r_1 + \text{physical } d_1)$  行列とみなせば

$$\begin{array}{c} \dots \\ \hline \boxed{M_{i_1, \dots, i_L}} \end{array} = \Sigma_0 \boxed{A_1} \xrightarrow{\quad} \boxed{A_2} \xrightarrow{\quad} \boxed{A_3} \xrightarrow{\quad} \dots \xrightarrow{\quad} \boxed{A_L}$$

と書ける。by construction でこの表示は特異値分解の自由度を除いて一意に定まる。規格化条件により任意の  $1 \leq k \leq L$  にて

$$\begin{aligned} \text{---} \boxed{A_k} \text{---} \boxed{A_k^\dagger} \text{---} &= 1_{r_{k-1}}, & \text{---} \boxed{A_k^\dagger} \text{---} \Sigma_{k-1}^2 \text{---} \boxed{A_k} \text{---} &= \text{---} \bullet \text{---} \Sigma_k^2, \\ \text{Tr}[\Sigma_k^2] &= 1, & r_k &\leq \frac{d_1 + \cdots + d_L}{2} \end{aligned}$$

が成り立つ。ただし  $\Sigma_0 = 1$  はスカラーである。

ここまでの事実は以下の定理にまとめられる。

**Prop. 1: 開放端条件の純粋状態の右標準形の MPS**

有限次元 Hilbert 空間のテンソル積で表される  $L$  サイト系の純粋状態は右標準形 (right canonical form) の行列積状態 (matrix product state; MPS)

$$\sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \cdots A_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle = \text{---} \boxed{A_1} \text{---} \boxed{A_2} \text{---} \boxed{A_3} \text{---} \cdots \text{---} \boxed{A_L}$$

の表示を有し、特異値分解の自由度を除いて一意に定まる。ここに、

$$\sum_{i_m} A_m^{i_m} (A_m^{i_m})^\dagger = \text{---} \boxed{A_k} \text{---} \boxed{A_k^\dagger} \text{---} = 1_{r_{k-1}} \quad (2.2.1)$$

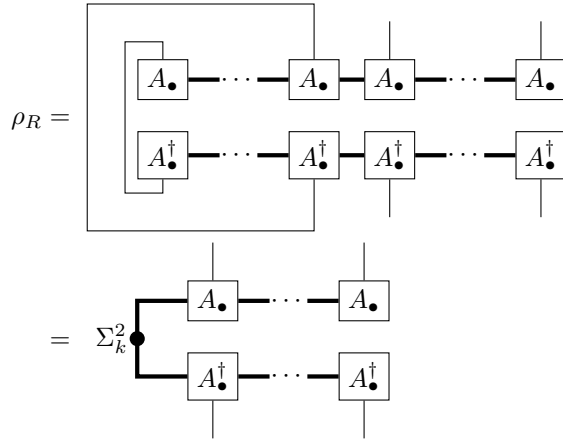
$$\sum_{i_k} (A_k^{i_k})^\dagger \Sigma_{k-1}^2 A_k^{i_k} = \text{---} \boxed{A_k^\dagger} \text{---} \Sigma_{k-1}^2 \text{---} \boxed{A_k} \text{---} = \text{---} \bullet \text{---} \Sigma_k^2 \quad (2.2.2)$$

を満たし、 $\Sigma_k$  は正の実数が並び  $\text{Tr} \Sigma_k^2 = 1$  となるランク  $r_k \leq (d_1 + \cdots + d_L)/2$  の対角行列である。

Schmidt 分解の順番を左からにすることで、(2.2.1), (2.2.2) の  $A$  と  $A^\dagger$  の位置が入れ替わった左標準形 (left canonical form) の MPS 表示も得られる。Schmidt ランクの上限  $\max(r_1, \dots, r_{L-1})$  をボンド次元と呼ぶ。

2 粒子系では特異値からエンタングルメントエントロピーを簡単に計算できた。MPS は全体系を大きく 2 つに分割して特異値分解を繰り返して構成しているので、やはりエンタングルメントエントロピーを簡単に計算できると期待できる。左側  $k$  サイトと右側  $L - k$  サイトに分割したときのエンタングルメントエントロピーを考える。左規格化条件

(2.2.2) から、左側の自由度をトレースアウトした状態が



となる。 $\rho_R$  の積はこれを上下に積層することで表されるので、右規格化条件 (2.2.1) によって MPS テンソルが消えていき、最終的に

$$S = -\text{Tr}[\rho_R \ln \rho_R] = -\text{Tr}[\Sigma_k^2 \ln \Sigma_k^2]$$

となる。

エントロピーの劣加法性を踏まえると、ボンド次元によってエントロピーの上限が決まる **気がする**。

## 2.2.2 開放端条件での MPS の自由度

特異値分解は一意ではないので、MPS 表示も一意ではない。標準形 MPS は必要最小限のランクに合わせた、ある種の最適化のもとでの表示だが、ボンド次元に冗長性を持たせた MPS 表示も可能である。また特異値分解におけるユニタリの取り方も自由度がある。この事実は一見理論の記述を冗長にしているだけのように見えるが、後の章でみるように MPS の表示の変形に対応する現象が物理的に重要な意味を持つ場合がある。

上記の自由度はともに virtual な脚に恒等演算子を挿し込む形で実現できる。例えば二つのテンソルの間に

$$\text{---} \boxed{A_1} \text{---} \boxed{A_2} \text{---} = \text{---} \boxed{A_1} \text{---} \boxed{Z} \text{---} \boxed{Y} \text{---} \boxed{A_2} \text{---}$$

となるような  $ZY = 1$  を挿入することができる。この操作は全てのボンドに対して可能である。全てのボンドに  $ZY$  を挿入すると、MPS テンソルは  $\cdots A_{k-1} A_k A_{k+1} \cdots$  の形から  $\cdots Y_{k-2} A_{k-1} Z_{k-1} Y_{k-1} A_k Z_k Y_k A_{k+1} Z_{k+1} \cdots$  の形に変形され、 $Y_{k-1} A_k Z_k =: B_k$  が新たな MPS テンソルになる。逆操作を行えば、任意の MPS 表示を標準形 MPS に変形できる。Sec. 2.2.1 で与えたように、端から順に特異値分解を繰り返せばよい。

ここまでの議論を命題の形で明示すると以下のようなになる。

**Thm. 7: OBC-MPS の行列の選び方に関する自由度**

$L$  サイト系の開放端条件における任意の MPS

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} B_1^{i_1} B_2^{i_2} \cdots B_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle$$

に対して、 $Y_i Z_i = 1$  なる行列  $Y_i, Z_i$  が存在し、

$$A_1^i = B_1^i Z_1, \quad A_L^i = Y_{L-1} B_L^i, \quad A_k^i = Y_{k-1} B_k^i Z_k \quad (2 \leq k \leq L-1) \quad (2.2.3)$$

とすることで標準形 MPS

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \cdots A_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle \quad (2.2.4)$$

を得られる。すなわち、任意の OBC-MPS は標準形 MPS に  $Y_i Z_i = 1$  なる行列  $Y_i, Z_i$  を挿入することで実現できる。

前述の通り Sec. 2.2.1 の構成を繰り返すだけなので、証明は容易である。

**Prf.**

■標準形 MPS の構成 (左規格化条件以外) (2.2.3) を念頭に、 $\sum_i A_k^i (A_k^i)^\dagger = 1$  を満たすような MPS テンソル  $A_k^i$  を構成する。MPS の一番右のテンソルを特異値分解して

$$\boxed{B_L} = \boxed{U_{L-1}} \Delta_{L-1} \boxed{A_L}$$

とする。ここで  $U_{L-1}, A$  は Thm. 4 のユニタリ性条件を満たすようにとり、 $\Delta_{L-1}$  は正の実数が並ぶ対角行列である。すなわち  $\sum_i A_L^i (A_L^i)^\dagger = 1$  とでき、 $Z_{L-1} = U_{L-1} \Delta_{L-1}$  は left inverse  $\Delta_{L-1}^{-1} U_{L-1}^\dagger$  を有する。続いて特異値分解

$$\boxed{B_{L-1}} \boxed{Z_{L-1}} = \boxed{U_{L-2}} \Delta_{L-2} \boxed{A_{L-1}}$$

を行い、同様に  $Z_{L-2} = U_{L-2} \Delta_{L-2}$  とすると、 $\sum_i A_{L-1}^i (A_{L-1}^i)^\dagger = 1$  とでき、 $Z_{L-2}$  は left inverse を有する。これを続けて、最終的に  $A_1^i = B_1^i Z_1$  まで到達すると (2.2.4) を得て、 $\sum_i A_j^i (A_j^i)^\dagger = 1$  を  $1 < j \leq L$  にて満たす。規格化条件

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} \cdots A_L^{i_L} (A_1^{i_1})^\dagger \cdots (A_L^{i_L})^\dagger = \sum_{i_1} A_1^{i_1} (A_1^{i_1})^\dagger$$

も合わせて考慮すると、 $j = 1$  を含め全ての  $j$  で MPS テンソルの右規格化条件を得る。

■左規格化条件 続いて  $\sum_i (A_1^i)^\dagger A_1^i$  は半正定値エルミート行列なのでユニタリ  $V_1$  と対角行列  $\Lambda_1$  を用いて

$$\sum_i (A_1^i)^\dagger A_1^i = V_1 \Lambda_1 V_1^\dagger$$



と対角化できる。 $A_1'^i = A_1^i V_1$  とすると  $\sum_i (A_1'^i)^\dagger A_1'^i = V_1^\dagger V_1 \Lambda_1 V_1^\dagger V_1 = \Lambda_1$  となって左規格化条件を得る。続いて  $\sum_i (V_1^\dagger A_2^i)^\dagger \Lambda_1 (V_1^\dagger A_2^i)$  も半正定値エルミート行列なのでユニタリ  $V_2$  と対角行列  $\Lambda_2$  を用いて

$$\sum_i (V_1^\dagger A_2^i)^\dagger \Lambda_1 (V_1^\dagger A_2^i) = V_2 \Lambda_2 V_2^\dagger$$

と対角化すると、 $A_2'^i = V_1^\dagger A_2^i V_2$  は左規格化条件  $\sum_i (A_2'^i)^\dagger A_2'^i = \Lambda_2$  を満たす。以下、同様に続けていくと、

$$A_k'^i = V_{k-1}^\dagger A_k^i V_k = V_{k-1}^\dagger Z_{k-1}^{-1} B_k^i Z_k V_k$$

が  $2 \leq k \leq L-1$  にて左規格化条件を満たす。右規格化条件も同時に満たすことに注意。この書き換えで MPS の右端には  $V_{L-1}^\dagger Z_{L-1}^{-1} B_L^i = V_{L-1}^\dagger A_L^i$  が残っているが、左規格化条件は

$$\sum_i (V_{L-1}^\dagger A_L^i)^\dagger (V_{L-1}^\dagger A_L^i) = \begin{array}{c} \boxed{A_L^\dagger} \text{---} \boxed{V_{L-1}^\dagger} \text{---} \boxed{V_{L-1}} \text{---} \boxed{A_L} \end{array} \in \mathbb{C}$$

により自動的に満たす。

### 2.2.3 ボンド次元の削減による近似

Prop. 1 は Hilbert 空間の次元の増大に伴いボンド次元が上限なく増大しうること示唆している。特に熱力学極限をとると一般にボンド次元は無限大へ発散してしまう。特に数値計算など具体的な計算を念頭に置くと、ボンド次元を有限に抑えた近似が必要になる。Thm. 5 を踏まえると、特異値分解を繰り返して得られた MPS はボンド次元を制限してある程度適切な近似を与えていると期待されるが、本節ではその妥当性を具体的に評価する。

基準となる PBC-MPS  $A_1^{i_1} \cdots A_L^{i_L}$  のボンド次元を  $D$  に制限した状態を

$$|\psi_D\rangle := \sum_{a_1, \dots, a_{L-1}=1}^D (A_1^{i_1})_{a_1} (A_2^{i_2})_{a_1, a_2} \cdots (A_L^{i_L})_{a_{L-1}} |i_1, \dots, i_L\rangle$$

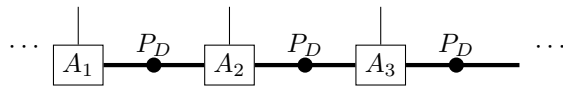
とする。ボンド次元  $D$  の空間への射影

$$P_D := \begin{pmatrix} 1_D & \\ & 0 \end{pmatrix}$$

を用いて

$$|\psi_D\rangle := A_1^{i_1} P_D A_2^{i_2} P_D \cdots A_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle$$

とも書けるので、図式では



のように表すことにする。Thm. 5 (Eckart-Young の定理) で見たように、行列間の誤差

は削減された特異値の二乗和で評価できるので、ここでも

$$\epsilon_k(D) := \sum_{i=D+1}^{r_k} \sigma_k(i)^2$$

として導入する。ここで  $r_k$  は  $k$  番目のボンド次元、 $\sigma_k(i)$  はその  $i$  番目に大きな特異値であり、Prop. 1 で導入した  $\Sigma_k = \text{diag}(\sigma_k(1), \dots, \sigma_k(r_k))$  に対応する。

誤差  $\|\psi\rangle - |\psi_D\rangle$  の評価は本質的に

$$\langle\psi|\psi_D\rangle = \begin{array}{c} \text{---} T_1 \text{---} P_D \text{---} T_2 \text{---} P_D \text{---} T_3 \text{---} P_D \text{---} \dots \text{---} T_L \text{---} \\ \text{---} \end{array}$$

の評価に帰着される。ここに、

$$T_k := \begin{array}{c} \text{---} A_k^\dagger \text{---} \\ \text{---} A_k \text{---} \end{array}$$

は転送行列と呼ばれ、 $T_1$  は左へ、 $T_L$  は右へ伸びる virtual な脚がない形で定義される。間に挟まっているのが  $P_D$  ではなく恒等演算子のときは、左端から順に左規格化条件 (2.2.2) を適用することで計算できて、値は 1 になる。<sup>\*4</sup> 左から右へと計算を進めていくことを踏まえると、

$$Y_1 = \begin{array}{c} \text{---} \Sigma_0^2 \text{---} P_D \text{---} \\ \text{---} \end{array}, \quad Y_k = \begin{array}{c} \text{---} Y_{k-1} \text{---} P_D \text{---} T_k \text{---} \\ \text{---} \end{array}$$

を定義すると、 $\langle\psi|\psi_D\rangle = Y_L$  となる ( $Y_L$  は右端に virtual な脚が伸びないスカラーであることに注意)。また右規格化条件 (2.2.1) があるので、 $T_k$  の縮約は CPTP 写像になっている。この性質を利用して、トレースノルム

$$\|A\|_{\text{tr}} := \text{Tr} \sqrt{A^\dagger A}$$

で  $\langle\psi|\psi_D\rangle$  を評価する。

## 2.3 周期境界条件下で並進対称性のある行列積状態

凝縮系物理学においては熱力学極限でバルクが並進対称性を有することを期待している。特に MPS で並進対称性を課すと、MPS テンソルが位置に依存しないことが期待される。サイトが少数でも並進対称性を課すため、本節では周期境界条件を考察する。

## 2.4 blocking とか injectivity とか

## 2.5 密度行列繰り込み群法 (DMRG)

密度行列繰り込み群 (density matrix renormalization group; DMRG) 法は、量子多体系の基底状態を行列積状態により近似して求める数値計算手法である [27]。DMRG に関するレビューは [23, 13, 24] などがあるほか、教科書として [31, 32] などがある。

<sup>\*4</sup>  $\epsilon_k$  の定義式に  $\sigma^2$  が入っているので、右規格化条件 (2.2.1) よりも左規格化条件を使うのが好ましい。

## 第 3 章

# 対称性に保護されたトポロジカル相

本章は主に [26] を参考にした。

### 3.1 自明相と SSB 相 - 横磁場強磁性 Ising 模型

SPT 相と比較のため、まずは自明相と SSB 相を理解する。この両方を実現する最も簡単な例として、1 次元横磁場強磁性 Ising 模型を考える。1 次元格子  $\Lambda$  各サイトに Hilbert 空間  $\mathbb{C}^2$  を配置し、全系の Hilbert 空間はテンソル積で与える。Hamiltonian は

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^x \quad (J \geq 0)$$

とする。スピン  $1/2$  演算子  $\mathbf{s}_i$  に対して  $\sigma_i = 2\mathbf{s}_i$  に注意。Hamiltonian には  $\sigma_i^z \mapsto -\sigma_i^z$ ,  $\sigma_i^x \mapsto \sigma_i^x$  で与えられる  $\mathbb{Z}_2$  スピン反転対称性がある。

$J = 0$  のとき、基底状態は  $\sigma_i^x$  の  $+1$  固有状態のテンソル積  $\bigotimes_i |\uparrow\rangle$  で unique になる。第 1 励起状態は一つのサイトのスピンを  $\sigma_i^x$  固有値  $-1$  に反転させた状態で、エネルギーギャップは  $\Delta = 2|h|$  である。 $\mathbb{Z}_2$  スピン反転対称性の秩序変数  $M_z = \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^z / N$  の基底状態期待値は 0 となり、基底状態は対称性を破らない。秩序変数として全磁化ではなく、局所的な  $O_i = \sigma_i^z$  や  $O_{i,j} = \sigma_i^z \sigma_j^z$  をとっても同様に、基底状態における期待値は 0 である。

一方  $h = 0$  のとき古典強磁性 Ising 模型である。基底状態は全てのサイトで共通して  $\sigma_i^z$  の  $+1$  固有値をとる固有状態  $\bigotimes_i |\uparrow\rangle$  と、全てのサイトで共通して  $\sigma_i^z$  の  $-1$  固有値をとる固有状態  $\bigotimes_i |\downarrow\rangle$  の 2 つで縮退する。 $\mathbb{Z}_2$  スピン反転対称性の秩序変数はそれぞれ

$$\begin{cases} \langle M_z \rangle_{\bigotimes_i |\uparrow\rangle} = +1 \\ \langle M_z \rangle_{\bigotimes_i |\downarrow\rangle} = -1 \end{cases} \quad \begin{cases} \langle O_i \rangle_{\bigotimes_i |\uparrow\rangle} = +1 \\ \langle O_i \rangle_{\bigotimes_i |\downarrow\rangle} = -1 \end{cases} \quad \langle O_{i,j} \rangle_{\bigotimes_i |\uparrow\rangle} = \langle O_{i,j} \rangle_{\bigotimes_i |\downarrow\rangle} = +1$$

となり、基底状態は  $\mathbb{Z}_2$  対称性を自発的に破ることがわかる。

#### 3.1.1 Kitaev の $p$ 波超伝導模型による厳密対角化

#### 3.1.2 Jordan-Wigner 変換による解析解

$|h/J| = 0$  で常磁性、 $|h/J| = \infty$  で強磁性となっているので、間に相転移点が存在すると予想される。[33] に従って、この様子を解析的に検証する。後の便益のため、サイト数  $L$  は偶数とする。

Jordan-Wigner 変換の比較的良好に知られた形で対角化ができるように、スピンを回転させて

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^z$$

と書き直す。<sup>\*1</sup>  $\sigma = 2s$  に注意して、Jordan-Wigner 変換は

$$\begin{aligned}\sigma_j^+ &= 2 \exp \left( i\pi \sum_{k=1}^{j-1} c_k^\dagger c_k \right) c_j^\dagger = 2(-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{j-1}} c_j^\dagger \\ \sigma_j^- &= 2c_j \exp \left( -i\pi \sum_{k=1}^{j-1} c_k^\dagger c_k \right) = 2c_j(-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{j-1}} \\ \sigma_j^z &= 2c_j^\dagger c_j - 1\end{aligned}$$

によりスピン  $1/2$  をフェルミオンへ移す変換である。ここに  $n_k = c_k^\dagger c_k$  はサイト  $k$  のフェルミオン数演算子で、固有値は  $0, 1$  のいずれか。最右辺の記法を用いると  $s_j^x = s_j^+ + s_j^- = (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{j-1}}(c_j^\dagger + c_j)/2$  の形で書けるので、Hamiltonian は

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{j \in \Lambda} \left( c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + c_{j+1} c_j \right) - 2h \sum_{j \in \Lambda} \left( c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} \right)$$

の2次形式になる。

$j$  サイトと  $j+1$  サイトの演算子が入り混じっているので、周期境界条件のもとで Fourier 変換する。Fock 空間への作用を考慮すると、 $n = n_1 + n_2 + \dots + n_L$  を全粒子数として、

$$\begin{aligned}\sigma_L^x \sigma_1^x &= (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{L-1}} (c_L^\dagger + c_L)(c_1^\dagger + c_1) = (-1)^n (-c_L^\dagger + c_L)(c_1^\dagger + c_1) \\ \sigma_L^x \sigma_{L+1}^x &= (-1)^{n-n_L} (c_L^\dagger + c_L)(-1)^n (c_{L+1}^\dagger + c_{L+1}) = (c_L^\dagger - c_L)(c_{L+1}^\dagger + c_{L+1})\end{aligned}$$

と書けるので、スピンの周期境界条件  $\sigma_j = \sigma_{j+L}$  を課すと、フェルミオンの周期境界条件は  $n$  の偶奇に応じて  $c_{L+1} = (-1)^{n+1} c_L$  としなければならない。従って Fourier 変換

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k c_k e^{ikj}, \quad c_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j c_j e^{-ikj}$$

により生じる波数  $k$  は、

$$k = \begin{cases} \frac{2\pi m - \pi}{L} & (n = 0 \pmod{2}) \\ \frac{2\pi m}{L} & (n = 1 \pmod{2}) \end{cases} \quad (m = 0, 1, \dots, L-1)$$

<sup>\*1</sup> 具体的にはユニタリ  $\bigotimes_i (\sigma_i^x + \sigma_i^z)/\sqrt{2}$  で Hamiltonian を挟む。

に値をとる。Hamiltonian の Fourier 空間での表現は

$$\begin{aligned}
H_{\text{Ising}} &= -J \sum_k \left( (e^{ik} + e^{-ik}) c_k^\dagger c_k + (e^{ik} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + e^{-ik} c_{-k} c_k) \right) - 2h \sum_k \left( c_k^\dagger c_k - \frac{1}{2} \right) \\
&= -\frac{J}{2} \sum_{k \neq 0, \pi} \left[ 2 \cos k (c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k}) + (e^{ik} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + e^{-ik} c_{-k}^\dagger c_k^\dagger) \right. \\
&\quad \left. + (e^{-ik} c_{-k} c_k + e^{ik} c_k c_{-k}) \right] - h \sum_{k \neq 0, \pi} (c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k} - 1) + H_0 + H_\pi \\
&= -J \sum_{k \neq 0, \pi} \left[ \cos k (c_k^\dagger c_k - c_{-k}^\dagger c_{-k} + 1 + 1) + i \sin k (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_{-k} c_k) \right] \\
&\quad - h \sum_{k \neq 0, \pi} (c_k^\dagger c_k - c_{-k}^\dagger c_{-k}) + H_0 + H_\pi \\
&= - \sum_{k \neq 0, \pi} \left[ \begin{pmatrix} c_k^\dagger & c_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J \cos k + h & iJ \sin k \\ -iJ \sin k & -J \cos k - h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{pmatrix} + 2 \cos k \right] \\
&\quad + H_0 + H_\pi.
\end{aligned}$$

第 2 行では  $k$  の昇順の総和と降順の総和を組み合わせている。ここに、

$$H_0 = -2(J + h)c_0^\dagger c_0 + h, \quad H_\pi = 2(J - h)c_\pi^\dagger c_\pi + h$$

とした。行列部分の固有値は

$$\pm \epsilon(k) := \pm \sqrt{(J \cos k + h)^2 + (J \sin k)^2} = \pm \sqrt{J^2 + h^2 + 2Jh \cos k}$$

なので、熱力学極限では  $|h/J| \neq 1$  のとき gapped,  $|h/J| = 1$  のとき gapless がわかる。Bogoliubov 変換により適切な新しいフェルミオン演算子  $\tilde{\eta}_k$  を導入すると、 $k \neq 0, \pi$  について

$$\begin{aligned}
&- \sum_{k \neq 0, \pi} \left[ \epsilon(k) \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k - \epsilon(k) \tilde{\eta}_{-k} \tilde{\eta}_{-k}^\dagger - J \cos k \right] \\
&= - \sum_{k \neq 0, \pi} \left[ \epsilon(k) (\tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k + \tilde{\eta}_{-k}^\dagger \tilde{\eta}_{-k}) - \epsilon(k) - J \cos k \right]
\end{aligned}$$

である。<sup>\*2</sup> この形状では粒子の生成によりエネルギーが減少するので、 $k \neq 0, \pi$  モードで粒子正孔変換  $\eta_k^\dagger = \tilde{\eta}_k$  を行うと<sup>\*3</sup>

$$\begin{aligned}
H_{\text{Ising}} &= - \sum_{k \neq 0, \pi} \left[ \epsilon(k) (\eta_k \eta_k^\dagger + \eta_{-k} \eta_{-k}^\dagger) - \epsilon(k) - J \cos k \right] + H_0 + H_\pi \\
&= \sum_{k \neq 0, \pi} \left[ \epsilon(k) (\eta_k^\dagger \eta_k + \eta_{-k}^\dagger \eta_{-k}) - \epsilon(k) + J \cos k \right] + H_0 + H_\pi
\end{aligned}$$

を得る。

$n$  が偶数のとき基底状態は  $\eta_k |0\rangle = \eta_{-k} |0\rangle = c_0 |0\rangle = c_\pi |0\rangle = 0$  を満たす状態で、エネルギーは  $\sum_k (-\epsilon(k) + J \cos k)$  である。 $n$  が奇数のとき粒子を最低 1 つ生成しなければならず、基底状態は  $\tilde{\eta}_0^\dagger |0\rangle$  で、基底エネルギーは  $\sum_{k \neq 0, \pi} (-\epsilon(k) + J \cos k) - 2J$  である。 $c_0^\dagger = 1/\sqrt{L} \sum_j c_j^\dagger$  は Jordan-Wigner 変換前では  $\sum_j \sigma_j^+$  に比例していたので、新たに得られた状態は全てのスピンの反転したものと解釈できる。

<sup>\*2</sup> 具体的には、

<sup>\*3</sup>  $k = 0, \pi$  モードは後述する基底状態の物理的解釈が整合するように粒子正孔変換を行わない。

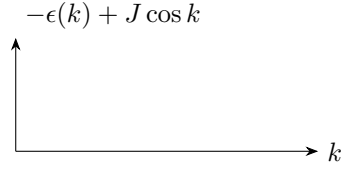
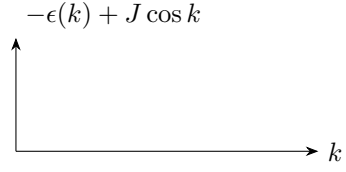
図 3.1:  $E_1$  から生じる総和の範囲図 3.2:  $E_2$  から生じる総和の範囲

図 3.3: (3.1.1) の計算で生じる総和が表す面積領域

図 3.4: 横磁場強磁性 Ising 模型の基底状態における 2 点相関関数

$n$  の偶奇ごとに基底状態が現れるが、熱力学極限でそのエネルギー差を求めてみる。一見エネルギーギャップ  $2J$  があるように見えるが、総和の  $k$  が走る範囲が異なるためギャップの有無は非自明である。もしエネルギー差が 0 なら、gapped となる  $|h/J| \neq 1$  でも熱力学極限で基底状態が二重縮退する。

$$E_1 - E_0 = \sum_{k=2\pi m/L \neq 0, 2\pi} (-\epsilon(k) + J \cos k) - 2J - \sum_{k=(2\pi m - \pi)/L} (-\epsilon(k) + J \cos k). \quad (3.1.1)$$

$k$  の範囲に注意すると、総和はそれぞれ Fig. 3.3 に示す通りである。よって  $L \rightarrow \infty$  の極限で

$$E_1 - E_2 =$$

すなわち  $|h/J| < 1$  で基底状態は単一、 $|h/J| > 1$  で二重縮退する。境界値  $|h/J| = 1$  では先に考察した通りギャップレスになっていた。

以上の結果は Landau パラダイムに基づく相転移の存在を示している。まず  $|h/J| < 1$  で基底状態は  $|0\rangle$  で一意だった。実際、スピン反転の対称性変換  $U = \bigotimes_i \sigma_i^x$  を基底状態に作用させると、

$$H_{\text{Ising}} U |0\rangle = U H_{\text{Ising}} |0\rangle = E_0 U |0\rangle$$

となるため、 $U |0\rangle$  も基底状態になる。基底状態が一意であることから  $U(1)$  位相の自由度を除いて  $U |0\rangle = |0\rangle$  が成り立つ。一方で  $|h/J| > 1$  で現れた基底状態は  $|0\rangle$  と  $\tilde{\eta}_0^\dagger |0\rangle$  の 2 つで、後者は前者のスピン反転で表されている。熱力学極限を取る前はエネルギーが異なっていたことからわかるとおり、この二つは線形独立で自発的に対称性を破っている。したがって  $M_z$  期待値が非零になる基底の貼り方が存在する。

有限サイズ系の基底状態は対称性を破らないことが多いので、磁化を数値計算の指標とするのは好ましくない。そこで 2 点相関関数  $\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle$  の収束を調べると、Fig. 3.4 に示すように  $h$  による微分が  $|h/J| = 1$  で発散することが示唆されている。<sup>\*4 \*5</sup>

$J$  を固定して  $h$  の値ごとに基底状態を調べると、 $|h/J| < 1$  で自発的に対称性が破れることが見て取れる。数値計算は DMRG を用いて行なった。

<sup>\*4</sup> に DMRG のコードを置いてある。

<sup>\*5</sup> Jordan-Wigner 変換した後の模型を Majorana 表示して得られる Kitaev の  $p$  波超伝導模型を解析すれば、相転移の存在を厳密に示すことができる。しかしその結果を物理的に解釈しようとするとトポロジカル相転移の議論に立ち入らざるを得ず、本節の大筋から外れるのでここでは扱わない。

## 3.2 対称性の自発的破れによる相の分類

物性物理学においては、対象物が取り得る相を全て列挙する相の分類問題が一つの重要な課題である。

相を列挙する研究には大きく分けて二つの流儀がある。第一に、物質を固定し温度や圧力といったパラメーターを変化させ平衡状態になったときに該当物質がどの相に属するかを調べる、物質科学的な興味に基づくもの。どのような温度帯で固体、液体、気体が相転移するか、超伝導、磁性が発現するかといった問題を調べる。第二に、物質を問わずある種の対称性を持つ系が取り得る相を全て列挙する、理論的な興味に基づくもの。Landau により対称性と相転移の関係が整理されて以来、この世に存在する物質が実現し得る相を網羅することが大きな目標になっている。研究の数で言えば物質の数だけ調査対象がある前者が圧倒的に多い。が、理論物理学において相の分類問題といったときは通常後者を指し、本稿でも後者を考察する。

対称性の破れによる相の分類は Landau 理論により整理されており、標語的には「相 = 対称性の線形既約表現」と言える。線形既約表現については appendix C を参照。

## 3.3 AKLT 模型

物理的に理解が容易な SPT 相の例として、AKLT 模型 [1, 2] を紹介する。1 次元格子  $\Lambda$  の各点にスピン 1 の Hilbert 空間  $\mathbb{C}^3$  を配置し、全系の Hilbert 空間はテンソル積で与える。Hamiltonian は

$$H_{\text{AKLT}} = \sum_{i \in \Lambda} \left( \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{3} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2 \right)$$

で与える。この模型の特徴として、

- 周期境界条件のもと、熱力学極限で励起ギャップがある
- 基底状態における期待値  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$  は  $|i - j|$  について指数関数的に減衰する
- 周期境界条件で基底状態は縮退していない
- 開放端条件の基底状態では端にスピン 1/2 の自由度が現れ、端ごとに 2 重縮退する

がある。周期境界条件は全てのサイトがバルクになるため、上 3 つはバルクの性質を表している。バルクの振る舞いだけ見ると AKLT 模型の基底状態は横磁場が強い Ising 模型の基底状態に似ている。しかし系に境界を作った途端に振る舞いが大きく変わる。開放端条件で端から分数スピンの現れることは、

### 基底状態の具体的構成

AKLT 模型では基底状態を具体的に記述できる。各サイトにスピン 1 が住んでいるので 2 サイトの合成スピンの値が 0, 1, 2 のいずれかになることに注意すると、

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} &= \frac{1}{2} [(\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1})^2 - \mathbf{S}_i^2 - \mathbf{S}_{i+1}^2] \\ &= \frac{1}{2} [2(2+1)P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] + 1(1+1)P_1[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - 1(1+1) - 1(1+1)] \\ &= 3P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] + P_1[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - 2 \end{aligned}$$

となる。ここに、 $P_J[\mathbf{K}]$  は合成スピン  $\mathbf{K}$  を大きさ  $J$  の空間に射影する演算子である ( $\mathbf{K}^2 P_J[\mathbf{K}] = J(J+1)P_J[\mathbf{K}]$ )。従って Hamiltonian は

$$\begin{aligned} H_{\text{AKLT}} &= \sum_{i \in \Lambda} \left[ 3P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] + P_1[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - 2 + \frac{-3P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - 3P_1[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] + 4}{3} \right] \\ &= \sum_{i \in \Lambda} \left( 2P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - \frac{2}{3} \right) \end{aligned}$$

となる。すなわち隣接サイトの合成スピンの値が全て 1 または 0 であれば基底状態になる。

トップダウンではあるが、具体的に基底状態を構成する。

- スピン 1 は 2 つのスピン 1/2 を対称に合成させて作れる
- 4 つのスピン 1/2 を合成するとき、一つでもシングレット (2 つのスピン 1/2 の合成スピン 0 状態) があると合成スピンの値が 1 または 0 になる

という事実に着目し、以下のような状態を与える。

$$|\text{AKLT}\rangle = \cdots \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \cdots$$

ここに、実線で繋がれた 2 つの点はシングレットを表し、円で囲まれた 2 つの点は対称に合成されてスピン 1 を表す。円で囲まれた部分が 1 サイトを構成する。演算子を用いて明示的に記述するには、まずサイト  $i$  のスピン 1 を構成する 2 つの 1/2 スピンを対称化する演算子  $\mathcal{S}_i$  を

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_i |\psi_{i,L}^\uparrow\rangle |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle &= |\psi_{i,L}^\uparrow\rangle |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle \\ \mathcal{S}_i |\psi_{i,L}^\uparrow\rangle |\psi_{i,R}^\downarrow\rangle &= \mathcal{S}_i |\psi_{i,L}^\downarrow\rangle |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle = \frac{1}{2} (|\psi_{i,L}^\uparrow\rangle |\psi_{i,R}^\downarrow\rangle + |\psi_{i,L}^\downarrow\rangle |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle) \\ \mathcal{S}_i |\psi_{i,L}^\downarrow\rangle |\psi_{i,R}^\downarrow\rangle &= |\psi_{i,L}^\downarrow\rangle |\psi_{i,R}^\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (3.3.1)$$

により定義し、これにより

$$|\text{AKLT}\rangle = \left( \bigotimes_{i \in \Lambda} \mathcal{S}_i \right) \bigotimes_{i \in \Lambda} \frac{|\psi_{i,R}^\downarrow\rangle |\psi_{i+1,L}^\uparrow\rangle - |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle |\psi_{i+1,L}^\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

と書ける。隣接 2 サイトの合成スピンは、シングレット (スピン 0) が 1 つ含まれるので 1 または 0 になる。よってこの状態は AKLT 模型の基底状態になる。

AKLT 模型の基底状態はこのほかにないことが証明できる。方針は [18, 26] に従う。



**Lem. 1: AKLT 相互作用の基底状態は AKLT 状態に限られる**

周期境界条件下で  $S = 1$  スピン鎖の状態  $|\psi\rangle$  が  $P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}]|\psi\rangle = 0$  を満たすことと、任意の状態  $|\Xi\rangle$  によって

$$|\psi\rangle = (\mathcal{S}_i \otimes \mathcal{S}_{i+1}) \left[ \left( |\psi_{i,R}^\downarrow\rangle |\psi_{i+1,L}^\uparrow\rangle - |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle |\psi_{i+1,L}^\downarrow\rangle \right) \otimes |\Xi\rangle \right]$$

と書けることは等価。ここに  $\mathcal{S}_i$  は (3.3.1) で定義する。

この補題により全ての隣接サイトで  $P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}]|\psi\rangle = 0$  を満たす AKLT 状態は AKLT 模型の unique な基底状態であることが従う。

*Proof.* 必要性は AKLT 状態を構成した直後の議論から従うので十分性を示す。全系サイト数を  $L$  とする。2 サイトにおけるスピン 1 の状態が張る Hilbert 空間は、合成スピン 0, 1, 2 の部分空間それぞれで次元 1, 3, 5 なので、 $P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}]|\psi\rangle = 0$  なる  $|\psi\rangle$  が張る Hilbert 空間の次元は  $(1+3) \times 3^{L-2} = 4 \times 3^{L-2}$  である。一方  $|\Xi\rangle$  の一般的な形は

$$|\Xi\rangle = |\psi_{i,L}^\sigma\rangle |\psi_{i+1,R}^{\sigma'}\rangle \left( \bigoplus_{j \in \Lambda \setminus \{i, i+1\}} |\psi_j^{\Sigma_j}\rangle \right) \quad (\sigma, \sigma' \in \{\uparrow, \downarrow\}, \Sigma_j \in \{0, 1, 2\})$$

と書いて、これが入る Hilbert 空間の次元は  $2 \times 2 \times 3^{L-2} = 4 \times 3^{L-2}$  となり、 $|\psi\rangle$  が張る Hilbert 空間の次元と一致するため、上述の形に限られる。  $\square$

### 励起ギャップの存在

基底状態と第 1 励起状態の間のエネルギーギャップが熱力学極限をとっても有限になることを示す。方針は [19] による。定数シフトによって最低エネルギーを厳密に 0 とした Hamiltonian  $H$  がある  $\varepsilon > 0$  により任意の状態期待値で  $\langle H^2 \rangle \geq \langle \varepsilon H \rangle$  とできる場合、第 1 励起状態のエネルギーは  $\varepsilon$  以上である。逆にギャップレスなら任意の  $\varepsilon > 0$  に対して熱力学極限で  $\langle H^2 \rangle < \langle \varepsilon H \rangle$  となる状態が存在する。

本節では  $P_{i,i+1} := P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}]$  と略記する。定数シフトにより基底エネルギーを 0 にした Hamiltonian を記号の濫用で  $H_{\text{AKLT}} = \sum_{i \in \Lambda} P_{i,i+1}$  とする。サイト数  $L$  が偶数の周期境界条件を仮定するが、奇数の場合も同様に議論できる。まず  $P_{i,j}^2 = P_{i,j}$  を踏まえ

$$H_{\text{AKLT}}^2 = H_{\text{AKLT}} + \sum_{r=1}^{L/2} C_r \quad (3.3.2)$$

ここに

$$\begin{aligned} C_1 &= \sum_{i=1}^L (P_{i,i+1} P_{i+1,i+2} + P_{i+1,i+2} P_{i,i+1}), \\ C_r &= 2 \sum_{i=1}^L (P_{i,i+1} P_{i+r,i+r+1} \quad (r = 2, 3, \dots, L/2 - 1), \\ C_{L/2} &= \sum_{i=1}^{L/2} P_{i,i+1} P_{i+L/2,i+L/2+1} \end{aligned}$$

とした。(3.3.2) の右辺第 2 項では  $C_{L/2}$  の中の同じ項が 2 回ずつ現れることに注意する。また距離が 2 以上離れた射影演算子は可換なので  $C_r \geq 0$  である。

### 基底状態における秩序変数と string order parameter

#### 端状態

ここまでの議論は全て周期境界条件のもとで行った。周期境界条件における AKLT 模型の特性は、理論的には整理されているが、string order parameter をはじめとして実験的検証に不向きなものが多い。SPT 相を特徴として物理的に最も重要な性質は端状態の存在だろう。周期境界条件では全てのサイトがバルクになるが、開放端条件を課すと両端のサイトが境界になり、バルクとは異なる振る舞いを示す。

開放端条件の Hamiltonian は

$$H_{\text{AKLT}}^{\text{open}} = - \sum_{i=1}^{L-1} \left( 2P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - \frac{2}{3} \right)$$

で記述できる。Lem. 1 により基底状態は

$$|\text{AKLT}\rangle^{\text{OBC}} = \begin{array}{c} \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \cdots \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \\ \bullet \bullet \quad \bullet \bullet \quad \quad \quad \bullet \bullet \quad \bullet \bullet \end{array}$$

と書ける。両端にはシングレットを組んでいないスピン 1/2 が 1 つずつ残っている。両端のスピン 1/2 は互いに独立に振る舞うので、基底状態は 4 重縮退する。スピン 1/2 を合成して組んだ模型でエンタングルメントを切断しているの、端にスピン 1/2 の自由度が現れることは自然に見える。しかし AKLT 模型はスピン 1 の系に定義されていた。スピン 1 の鎖を切断したことで端に「分数スピン」1/2 の自由度が現れるのは非自明な現象だろう。

このように境界条件の取り方によって縮退度が変わることは、自明相や SSB 相では発生しない特筆すべき現象である。またこのような縮退度の変更がシステムサイズに依存せず、格子が埋め込まれている空間の形状 (周期境界条件なら  $S^1$ , 開放端条件なら線分) のみに依存する点は特に注目に値する。物理現象が局所的性質だけでなく、系の大域的な位相的性質に依存することはトポロジカル相を特徴づける重要な要素である。

#### AKLT 状態の MPS 表現

AKLT 模型は MPS で基底状態を表現できる。

### 3.4 クラスター模型

AKLT 模型は物理的直感が働きやすい一方、計算を行う上ではやや複雑である。そこで SPT 相を考察する上で計算が最も簡単であり、以降たびたび応用するクラスター模型を導入する。<sup>\*6</sup>

1 次元格子  $\Lambda$  の各点にスピン 1/2 の Hilbert 空間  $\mathbb{C}^2$  を配置し、全系の Hilbert 空間はテンソル積で与える。  $X_i, Z_i$  は  $i \in \Lambda$  の上ではそれぞれ Pauli  $X$ , Pauli  $Z$  として作用し、その他の格子点には恒等演算子として作用する演算子とする。  $Z_i X_j = (-1)^{\delta_{i,j}} X_j Z_i$ ,  $Z_i^2 = X_i^2 = 1$  である。

<sup>\*6</sup> クラスター状態については [6, 7] で導入されているらしい。模型としての初出は不明。

クラスター模型を

$$H_{\text{cluster}} := - \sum_{i \in \Lambda} Z_{i-1} X_i Z_{i+1}$$

で定義する。クラスター模型の各項は 2 乗すると 1 となるので、各項の固有値は  $\pm 1$ 。また各項は互いに交換する。

$$[Z_{i-1} X_i Z_{i+1}, Z_{j-1} X_j Z_{j+1}] = 0 \quad (\forall i, j \in \Lambda).$$

従って各項の同時固有状態が取れて、基底状態は全ての項の +1 固有状態、第 1 励起状態はいずれか 1 つの項だけが -1 固有値を取る状態である。

特に周期境界条件、すなわち  $Z_i = Z_{i+L}$ ,  $X_i = X_{i+L}$  の同一視のもとでは、全系の Hilbert 空間の次元が  $2^{|\Lambda|}$  であるのに対し、各項  $\pm 1$  固有状態が張る空間の次元も  $2^{|\Lambda|}$  なので、全ての固有値を指定して得られるエネルギー基底状態に縮退はない。またエネルギーギャップは  $\Delta = 2$  となり、系の大きさに依存しない定数である。

開放端条件を課して  $\Lambda = \{1, 2, \dots, L\}$  とする。Hamiltonian は各項が 3 サイトに非自明に作用するので、

$$H_{\text{open}} = - \sum_{i=2}^{L-1} Z_{i-1} X_i Z_{i+1}$$

と修正される。Hamiltonian の中に項は  $L-2$  個しかないので、全ての項の固有値を指定しても  $2^2$  次元が余分に現れ、基底状態は 4 重縮退する。

縮退の起源を探るために、微小磁場を両端のスピンに加えて

$$H_{\text{open}}(h) := H_{\text{open}} - h(Z_1 + Z_L)$$

とする。磁場項は  $H_{\text{open}}$  各項と交換するため、やはり同時固有状態が取れる。 $h > 0$  の場合、両端の  $Z_1, Z_L$  固有値を +1 とすることで基底状態になり、ギャップ  $2h$  が開いて縮退が解ける。

磁場の導入により縮退が解けるこの状況は SSB に似ている。クラスター模型にはスピン反転対称性  $X_i \mapsto X_i$ ,  $Z_i \mapsto -Z_i$  がある。さらに、スピン反転対称性は偶数サイトのみ作用させるものと奇数サイトのみ作用させるものに分割して

$$U_{\text{odd}} = \prod_{i \in \Lambda: \text{odd}} X_i, \quad U_{\text{even}} = \prod_{i \in \Lambda: \text{even}} X_i$$

としても良い。<sup>\*7</sup> スピン反転は  $\mathbb{Z}_2$  で表せるので、クラスター模型は対称性として  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$  を有する。開放端条件における両端のスピン縮退は、この  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$  の自発的破れとして解釈できる。一方、バルクのスピン状態は周期境界条件の場合と完全に同じであるため、対称性を破ることはない。

このように、周期境界条件では基底状態が縮退せずギャップが開いていた模型が、開放端条件では端の自由度が対称性を自発的に破り縮退するという挙動は Ising 模型で現れなかった。しかも以上の議論は系の大きさには依存せず、純粋に形状のみに依存している。系の挙動が局所的な情報だけでなく格子系全体の形状に依存するため、クラスター模型は何かしらトポロジカルな性質を有していることが期待される。

<sup>\*7</sup> 奇数サイトの周期境界条件では  $U_{\text{odd}} = U_{\text{even}}$  となり、全スピン反転を分割できない。以下議論を簡単にするためこの場合は除外する。

クラスター模型が Ising 模型と明白に異なることを示すために、秩序変数を考察する。

$$O_{i,j}^{\text{loc}} := Z_i Z_j$$

$$O_{i,j}^{\text{str}} := \begin{cases} Z_i \left( \prod_{k=i+1}^{j-1} X_k \right) Z_j & (i \neq j \pmod{2}) \\ Z_i Z_{i+1} \left( \prod_{k=i+1}^{j-1} X_k \right) Z_{j-1} Z_j & (i = j \pmod{2}) \end{cases}$$

$i$  が十分バルクにあれば、 $O_{i,j}^{\text{loc}}$  の期待値は

$$\begin{aligned} \langle O_{i,j}^{\text{loc}} \rangle_{\text{cluster}} &= \langle (Z_{i-1} X_i Z_{i+1}) O_{i,j}^{\text{loc}} \rangle_{\text{cluster}} \\ &= - \langle O_{i,j}^{\text{loc}} (Z_{i-1} X_i Z_{i+1}) \rangle_{\text{cluster}} \end{aligned}$$

を満たすので 0 となる。一方で string order parameter の期待値は

$$\langle O_{i,j}^{\text{str}} \rangle_{\text{cluster}} = \left\langle \prod_{k=i+1}^{j-1} Z_{k-1} X_k Z_{k+1} \right\rangle_{\text{cluster}} = 1$$

と、 $i, j$  の距離に依存しない。

Ising 模型とクラスター模型の離散的な区別は、二つの模型を連続的につなぐことでより明白に理解できる。 $\lambda \in [0, 1]$  をパラメーターとして

$$H(\lambda) = \lambda H_{\text{Ising}} + (1 - \lambda) H_{\text{cluster}}$$

を与える。 $\lambda = 0$  で Ising 模型、 $\lambda = 1$  でクラスター模型になるため、ある種の摂動によって二つの模型が繋がれていると理解される。 $O_{i,j}^{\text{loc}}$  などの離散不変量が  $\lambda = 0, 1$  で異なるため、途中で離散不変量が不連続に変わる相転移点があることが期待される。実際、 $H(\lambda)$  のギャップをプロットすると図のようになる。

### 3.5 SPT 相の物理的定義

### 3.6 SPT 相の分類

SPT 相はその名の通り物質の相である。

本節の議論は [12] に従う。

はじめに基底状態を与える並進対称な MPS を定義する。上述のように境界条件によって物理が変わることを踏まえ、 $L$  サイトの MPS テンソルに加えて境界条件を制御する virtual なテンソル  $X$  を加えて

$$|\psi_{A,X}^L\rangle = \sum_{i_k} \text{Tr}[X A^{i_1} A^{i_2} \cdots A^{i_L}] |i_1, i_2, \dots, i_L\rangle$$

とする。 $A = \sum_i A^i \otimes |i\rangle$  は MPS テンソルで、 $A^i$  はボンド次元  $D$  次元の行列である。 $X$  として任意の  $D \times D$  行列を与えることで、様々な境界条件を表現できる。 $X = 1_D$  のときは周期境界条件に対応する。 $X$  を任意にとって得られる集合を

$$\mathcal{S}_A^L := \{|\psi_{A,X}^L\rangle \mid X \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})\}$$

とする。任意の MPS テンソルは連結することで injective になり、また熱力学極限で異なる MPS は比例するか直交するので、 $A$  として injective なものを考え、異なる MPS は直交するとしても一般性を失わない (cf. ??)。

MPO も同様に

$$O_{T,B}^L := \sum_{i_k, j_k} \text{Tr}[B T^{i_1, j_1} T^{i_2, j_2} \dots T^{i_L, j_L}] |i_1, i_2, \dots, i_L\rangle \langle j_1, j_2, \dots, j_L|$$

とする。  $T = \sum_{i,j} T^{i,j} \otimes |i\rangle \langle j|$  は MPO テンソル。MPS の場合と同様に  $T$  は injective としてもよい。異なる MPO テンソルをラベル  $\{a, b, \dots\}$  で区別して  $T_a$  などと表し、ボンド次元を  $\chi_a$  などと表す。MPO についても

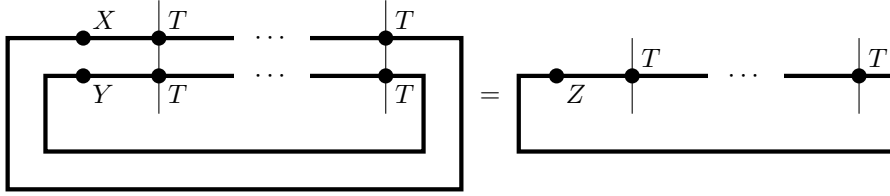
$$\mathcal{A}_T^L := \{O_{T,B}^L \mid B \in \text{Mat}_{\chi \times \chi}(\mathbb{C})\}$$

とする。

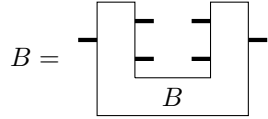
MPO が対称性を表すように、任意の  $X, Y \in \text{Mat}_{\chi \times \chi}(\mathbb{C})$ , 任意の  $L$  に対して

$$O_{T,X}^L O_{T,Y}^L = O_{T,Z}^L$$

なる  $Z$  が存在することを要請する。図式で書くと



と表せる。この式は二つのテンソル  $X, Y$  を  $Z$  に移す線形変換とみなせるので、 $B(X \otimes Y) = Z$  と書く。図式で表すと



のように、内側に  $X \otimes Y$  を入れると  $Z$  になる。U 字型の  $B$  の右側から生えている 3 本を 1 本に、左側の 3 本を 1 本にまとめて行列とみなせば、ランク分解??により  $B = \sum_{\mu} W^{\mu} \otimes V^{\mu}$  と書ける。

$$B = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} = \sum_{\mu} \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array}$$

$\mu$  が新たに挿入したボンド変数である。左右の 3 脚テンソルをそれぞれフュージョンテンソルと呼ぶ。後の議論を簡単にするため、 $\mu$  に対応する新たなボンドだけでなく、フュージョンテンソルの全てのボンドで成分を指定する。具体的には、射影演算子  $P_a, P_b, P_c$  を用いて

$$W_{ab}^{c,\mu} = P_c W^{\mu} (P_a \otimes P_b) = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array}$$

のように表す。 $a, b, c$  を指定して  $\mu$  を走らせたとき、全ての  $W_{ab}^{c,\mu}$  が線型独立になるとは限らず、いくつか 0 になるものがある。線型独立な  $W_{ab}^{c,\mu}$  を与える  $\mu$  の最大値を  $N_{ab}^c$  とする。任意の  $Z \in \text{Mat}_{\chi \times \chi}(\mathbb{C})$  に対して  $Z_c = P_c Z P_c$  とすると、

$$Z_c = \sum_{a,b} \sum_{\mu=1}^{N_{ab}^c} W_{ab}^{c,\mu} (X_a \otimes Y_b) V_{ab}^{c,\mu}$$

と書ける。 $X, Y$  として任意の行列をとって良いので、 $X$  の代わりに  $X_a = P_a X P_a$  を、 $Y$  の代わりに  $Y_b = P_b Y P_b$  を入れても良い。このとき、 $O_{T, X_a}^L O_{T, Y_b}^L = \sum_c O_{T, Z_c}^L$  は

$$\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } \begin{array}{c} \text{Top wire: } \bullet \xrightarrow{X} \bullet \xrightarrow{T} \dots \xrightarrow{T} \bullet \\ \text{Bottom wire: } \bullet \xrightarrow{Y} \bullet \xrightarrow{T} \dots \xrightarrow{T} \bullet \end{array} \\ \text{Diagram 2: } \sum_c \sum_{\mu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} \text{Top wire: } \bullet \xrightarrow{\mu} \bullet \xrightarrow{X_a} \bullet \xrightarrow{\mu} \bullet \xrightarrow{T} \dots \\ \text{Bottom wire: } \bullet \xrightarrow{\mu} \bullet \xrightarrow{Y_b} \bullet \xrightarrow{\mu} \bullet \end{array} \end{array}$$

とかけて、これが任意の  $X, Y$  で成り立つので、任意の長さの MPO で

$$\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } \begin{array}{c} \text{Top wire: } \bullet \xrightarrow{a} \bullet \xrightarrow{a} \bullet \xrightarrow{a} \bullet \xrightarrow{a} \bullet \\ \text{Bottom wire: } \bullet \xrightarrow{b} \bullet \xrightarrow{b} \bullet \xrightarrow{b} \bullet \xrightarrow{b} \bullet \end{array} \\ \text{Diagram 2: } = \sum_{\mu} \begin{array}{c} \text{Top wire: } \bullet \xrightarrow{a} \mu \xrightarrow{c} \dots \xrightarrow{c} \mu \xrightarrow{a} \bullet \\ \text{Bottom wire: } \bullet \xrightarrow{b} \mu \xrightarrow{c} \dots \xrightarrow{c} \mu \xrightarrow{b} \bullet \end{array} \end{array} \quad (3.6.1)$$

とできる。特に  $L = 1$  では

$$\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } \begin{array}{c} \text{Top wire: } \bullet \xrightarrow{a} \bullet \\ \text{Bottom wire: } \bullet \xrightarrow{b} \bullet \end{array} \\ \text{Diagram 2: } = \sum_c \sum_{\mu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} \text{Top wire: } \bullet \xrightarrow{a} \mu \xrightarrow{c} \bullet \xrightarrow{c} \mu \xrightarrow{a} \bullet \\ \text{Bottom wire: } \bullet \xrightarrow{b} \mu \xrightarrow{c} \bullet \xrightarrow{c} \mu \xrightarrow{b} \bullet \end{array} \end{array}$$

なので、 $L = 2$  の (3.6.1) 左辺にこれを用いると

$$\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } \begin{array}{c} \text{Top wire: } \bullet \xrightarrow{a} \bullet \xrightarrow{a} \bullet \xrightarrow{a} \bullet \xrightarrow{a} \bullet \\ \text{Bottom wire: } \bullet \xrightarrow{b} \bullet \xrightarrow{b} \bullet \xrightarrow{b} \bullet \xrightarrow{b} \bullet \end{array} \\ \text{Diagram 2: } = \sum_{c,d} \sum_{\mu, \nu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} \text{Top wire: } \bullet \xrightarrow{a} \mu \xrightarrow{c} \bullet \xrightarrow{c} \mu \xrightarrow{a} \nu \xrightarrow{d} \bullet \xrightarrow{d} \nu \xrightarrow{a} \bullet \\ \text{Bottom wire: } \bullet \xrightarrow{b} \mu \xrightarrow{c} \bullet \xrightarrow{c} \mu \xrightarrow{b} \nu \xrightarrow{d} \bullet \xrightarrow{d} \nu \xrightarrow{b} \bullet \end{array} \end{array}$$

とできる。MPO テンソルが全て injective であると仮定しているので、

$$\begin{aligned} & \delta_{c,d} \sum_{\mu, \nu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} \text{Top wire: } \bullet \xrightarrow{a} \mu \xrightarrow{c} \dots \xrightarrow{c} \mu \xrightarrow{a} \bullet \\ \text{Bottom wire: } \bullet \xrightarrow{b} \mu \xrightarrow{c} \dots \xrightarrow{c} \mu \xrightarrow{b} \bullet \end{array} \\ &= \sum_{\mu, \nu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} \text{Top wire: } \bullet \xrightarrow{a} \mu \xrightarrow{c} \dots \xrightarrow{c} \mu \xrightarrow{a} \nu \xrightarrow{d} \bullet \xrightarrow{d} \nu \xrightarrow{a} \bullet \\ \text{Bottom wire: } \bullet \xrightarrow{b} \mu \xrightarrow{c} \dots \xrightarrow{c} \mu \xrightarrow{b} \nu \xrightarrow{d} \bullet \xrightarrow{d} \nu \xrightarrow{b} \bullet \end{array} \end{aligned}$$

である。残っている左右のテンソルは線型独立としていたので、

$$\begin{array}{c} \text{Top wire: } \bullet \xrightarrow{a} \mu \xrightarrow{a} \nu \xrightarrow{a} \bullet \\ \text{Bottom wire: } \bullet \xrightarrow{b} \mu \xrightarrow{b} \nu \xrightarrow{b} \bullet \end{array} = \text{---} \delta_{c,d} \delta_{\mu, \nu}$$

を得る。

3本のボンドについて、上から順に潰すのと下から順に潰すのとで結果が変わらないことを要請すると

### 3.7 Decorated domain wall 構成

SPT 相を系統的に構成する方法として decorated domain wall construction [8] が知られている。

## 第 4 章

# 多極子対称性下のトポロジカル相

本章では空間位置に依存する対称性のもとでのトポロジカル相分類の最も簡単な例として、 $1+1$  次元多極子対称性下の SPT 相の分類を取り上げる。多極子対称性 (multipole symmetry) とは通常の電荷だけでなく、双極子や四重極子などの高次多極子を保存する対称性である。電荷の運動に制限を与えるため、フラク톤を生じる例が多い。本章の内容は主に [20, 22] に基づく。

### 4.1 多極子対称性

電磁気学において、静電ポテンシャル  $\phi$  の多重極展開は

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}} \frac{1}{x^{n+1}} \int d^3r \rho(\mathbf{r}) r^n P_n(\cos \theta)$$

と記述される。ここに  $\epsilon$  は真空の誘電率、 $x = |\mathbf{x}|$  と  $r = |\mathbf{r}|$  はベクトルの大きさ、 $P_n$  は  $n$  次の Legendre 多項式、 $\theta$  は  $\mathbf{x}$  と  $\mathbf{r}$  の間の角度である。簡単のため、電荷が直線上にのみ存在するとして直線上の静電ポテンシャルに着目すると、 $n$  次の多極子として

$$Q_n = \int dr \rho(r) r^n$$

を定義することで、Coulomb の法則を拡張した

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}} \frac{Q_n}{r^{n+1}}$$

を得る。

後の議論のため 1 次元格子  $\Lambda \subset \mathbb{Z}$  に議論を移す。多極子電荷は

$$Q_n = \sum_{x \in \Lambda} \rho(x) x^n$$

で表される。例えば  $U(1)$  の  $n$  次多極子を保存する対称性 (degree  $n$  multipole symmetry) を有するボゾン系の Hamiltonian は、decorated domain wall の構成法 [8] を用いて minimal に

$$\hat{H}_n = \sum_{x \in \Lambda} \prod_{y=0}^n \hat{b}_{x+y}^{(-1)^y \binom{n}{y}} + \text{h.c.}$$



図 4.1: dipole symmetry を有する 1 次元格子ボゾン系の理論  $H_1$  でのダイナミクス。

と書ける。[28] 実際、ボゾン系にて  $\rho(x) = \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x$  なので

$$[\hat{H}_n, \hat{Q}_m] = \sum_{x,y \in \Lambda} \prod_{z=0}^n \left[ \hat{b}_{y+z}^{(-1)^z \binom{n}{z}}, x^m \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x \right] + \text{h.c.}$$

$$=$$

となる。 $n = 1$  の dipole symmetry では

$$\hat{H}_1 = \sum_{x \in \Lambda} \hat{b}_{x-1}^\dagger \hat{b}_x^2 \hat{b}_{x+1}^\dagger + \text{h.c.}$$

となるが、これにより生成されるダイナミクス  $e^{i\hat{H}_1 t}$  では Fig. 4.1 に示すように四重極子の生成と消失しか生じないことがわかる。特に、粒子が運動するときは必ず複数の粒子がペアを組んで逆向きに移動し、孤立粒子の運動が許されない。これはまさしくフラクトン系に度々現れる現象である。

以下、対称性  $G$  を有限可換群とする。ボゾン系やスピン系といった模型の具体形に依存しない議論を行うために、 $G$  の忠実な表現を用いる。有限可換群の基本定理から、 $G$  は  $\mathbb{Z}_N$  の直積で表せる。 $\mathbb{Z}_N$  の忠実な表現として Hilbert 空間を  $\mathbb{C}^N$  とする  $\mathbb{Z}_N$  qudit

$$X|n\rangle = |(n+1) \bmod N\rangle, \quad Z|n\rangle = \omega^n |n\rangle \quad (n \in \mathbb{Z}_N, \omega = e^{2\pi i/N})$$

を取る。以下は簡単のため  $G = \mathbb{Z}_N$  とするが、直積群の場合は qudit のフレーバーを増やせば同じ議論が可能である。

空間 1 次元の格子  $\Lambda \subset \mathbb{Z}$  の各点に  $\mathbb{Z}_N$  qudit を配置する。全系の Hilbert 空間は  $\prod_{x \in \Lambda} \mathbb{C}^N$  である。 $x \in \Lambda$  の qudit の演算子は  $X_x, Z_x$  で表し、 $Z_x X_y = \omega^{\delta_{x,y}} X_y Z_x$  である。

計算の利便性を考慮し、 $G$  から構成される  $n$  次の多極子対称性 (multipole symmetry) を

$$U_g^{(n)} := \prod_{x \in \Lambda} X_x^{x(x+1)\cdots(x+n-1)/n!}$$

で定義する。第一の注意として、右辺の指数  $x(x+1)\cdots(x+n-1)/n! = \binom{x+n-1}{n}$  は整数値関数である。また、任意の  $G$  作用は  $U_g^{(n)}$  の組み合わせで表せる。これは、一般に  $n$  次までの整数値関数が  $\binom{x+m-1}{m}$  ( $m = 0, 1, \dots, n$ ) の整数係数の線型結合で一意に展開できる (Prop. 5) ことから示される。第三に、 $U_g^{(n)}$  は  $n$  次の多極子を保存し、 $n+1$  次の多極子を生成、消滅させる操作である。実際、 $n$  次多極子対称性を有する系の minimal な Hamiltonian をボゾン系で構成したのと同様に、qudit 系でも decorated domain wall を用いて

$$H_n = \sum_{x \in \Lambda} \prod_{y=0}^n Z_{x+y}^{(-1)^y \binom{n}{y}} + \text{h.c.}$$

とする。各項は  $X$  の固有空間における  $n+1$  次多極子の生成及び消滅を表している。 $m \leq n$  にて  $[H_n, U_g^{(m)}] = 0$  となるが、一般に  $m > n$  では交換しない。実際、



## 4.2 MPS を用いた多極子 SPT 相の分類

(1+1) 次元 SPT 相は MPS を用いて分類できる。本節では

### 4.2.1 多極子 SPT 相の MPS のゲージ

有限可換群の基本定理から、 $G$  は  $\mathbb{Z}_N$  の直積で表せることを念頭に、以下簡単のため  $G = \mathbb{Z}_N$  とする。直積因子が複数ある場合も議論は同様である。 $G$  の忠実な表現として Hilbert 空間を  $\mathbb{C}^N$  とする  $\mathbb{Z}_N$  スピン系を 1 次元格子  $\Lambda$  の各点に配置する。

$$X|n\rangle = |(n+1) \bmod N\rangle, \quad Z|n\rangle = e^{2\pi i n/N}|n\rangle$$

とし、 $ZX = e^{2\pi i/N}XZ$  である。

SPT 基底状態として MPS

$$|\psi\rangle = \sum_{\{i_x\}} \text{Tr}[\dots A^{i_{x-1}} A^{i_x} A^{i_{x+1}} \dots] |\dots, i_{x-1}, i_x, i_{x+1}, \dots\rangle$$

$$= \dots \text{---} \boxed{A} \text{---} \boxed{A} \text{---} \boxed{A} \text{---} \dots$$

をとり、次数  $r$  の多極子対称性

$$U_g^{(r)} = \prod_{x \in \Lambda} (g_x)^{x(x+1)\dots(x+r-1)/r!}$$

と並進対称性を要請する。並進対称性と次数  $r$  の多極子対称性から低次の多極子対称性も自動的に満たされる：

$$U_g^{(r)} T (U_g^{(r)})^{-1} T^{-1} = \prod_{x \in \Lambda} g_x^{\binom{x+r-1}{r} - \binom{x+r-2}{r}} = \prod_{x \in \Lambda} g_x^{\binom{x+r-2}{r-1}} = U_g^{(r-1)}$$

帰納的に、次数 0 すなわち群作用が位置に依存しない一様な対称性も有する。MPS の基本定理によって、あるユニタリ  $X_g^{(0)}$  が存在して

$$\text{---} \boxed{g} \text{---} \boxed{A^{(i)}} \text{---} \doteq \text{---} \boxed{X_g^{(0)\dagger}} \boxed{A^{(i)}} \boxed{X_g^{(0)}} \text{---}$$

が成り立つ。 $\doteq$  は両辺が  $U(1)$  位相因子を除いて等しいことを表し、 $A$  の肩についている  $(i)$  はサイト番号を表す。並進対称性を仮定しているので全ての MPS テンソルを同一に  $A^{(i)} = A^{(0)}$  とできることに注意。 $r = 1$  の dipole symmetry  $U_g^{(1)}$  による作用は

$$\begin{aligned} & \dots \text{---} \boxed{g^i} \text{---} \boxed{A^{(i)}} \text{---} \boxed{g^{i+1}} \text{---} \boxed{A^{(i+1)}} \text{---} \dots \\ &= \dots \text{---} \boxed{(X_g^{(0)\dagger})^i} \text{---} \boxed{A^{(i)}} \text{---} \boxed{(X_g^{(0)})^i} \text{---} \boxed{(X_g^{(0)\dagger})^{i+1}} \text{---} \boxed{A^{(i+1)}} \text{---} \boxed{(X_g^{(0)})^{i+1}} \text{---} \dots \\ &= \dots \text{---} \boxed{A^{(i)}} \text{---} \boxed{X_g^{(0)\dagger}} \text{---} \boxed{A^{(i+1)}} \text{---} \boxed{X_g^{(0)\dagger}} \text{---} \dots \end{aligned}$$

のように、MPS テンソルの間に  $(X_g^{(0)})^\dagger$  が混じる。SPT 相では定義から基底状態が縮退しないので、

$$\text{---} \boxed{X_g^{(0)\dagger}} \boxed{A^{(i)}} \text{---} = \text{---} \boxed{X_g^{(1)\dagger}} \boxed{A^{(x)}} \boxed{X_g^{(1)}} \text{---} \quad (4.2.1)$$

が成り立つ。転送行列を用いた厳密な証明は appendix E.4 を参照。

同様にして帰納的にランク  $r$  のゲージが導出される。ランク  $r-1$  までのゲージ  $\{X_g^{(k)} \mid g \in G\}_{k=0,1,\dots,r-1}$  が存在すると仮定する。 $r$  次多極子対称性の作用により

$$U_g^{(r)} \sum \text{Tr}[\cdots A \cdots] |\cdots\rangle \doteq \sum \text{Tr} \left[ \prod_{i=1}^L (X_g^{(0)\dagger})^{B_r(i)} A (X_g^{(0)})^{B_r(i)} \right] |\cdots\rangle$$

となるが、係数の  $\text{Tr}$  の中身は  $B_r(i) := \binom{i+r-1}{r}$  を用いて

$$\begin{aligned} \prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{B_r(i)} A (X_g^{(0)})^{B_r(i)} &= \prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{-B_r(i-1)+B_r(i)} A \\ &= \prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{B_{r-1}(i)} A \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

と書ける。<sup>\*1</sup> 最後の等号では Pascal の等式

$$B_r(i+1) - B_r(i) = \binom{i+r}{r} - \binom{i+r-1}{r} = \binom{i+r}{r-1} = B_{r-1}(i+1)$$

を用いた。(4.2.1) を用いて

$$\prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{B_{r-1}(i)} A \doteq \prod_i (X_g^{(1)\dagger})^{B_{r-1}(i)} A (X_g^{(1)})^{B_{r-1}(i)}$$

となり、(4.2.2) 左辺にてゲージのランクを 1 つ上げ、多項式  $B_r(i)$  の次数を 1 つ下げた形になる。帰納的に

$$\prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{B_r(i)} A (X_g^{(0)})^{B_r(i)} \doteq \prod_i (X_g^{(r-1)\dagger})^{B_1(i)} A$$

を得る。基底状態が縮退を許さないことから

$$\text{---} \boxed{X_g^{(r-1)\dagger}} \boxed{A^{(i)}} \text{---} = \text{---} \boxed{X_g^{(r)\dagger}} \boxed{A^{(x)}} \boxed{X_g^{(r)}} \text{---} \quad (4.2.3)$$

によりランク  $r$  のゲージが定義できる。転送行列を用いた議論による厳密な証明は appendix E.4 を参照。

#### 4.2.2 開放端条件への作用とゲージ自由度

SPT 相はバルクでは自明だが、境界に非自明な自由度を持つ。多極子 SPT でも非自明な自由度が現れる。

<sup>\*1</sup> ここではバルクに対する作用を考えているので、境界項は無視している。境界でもこの表式が整合するためには対称性の有限可換群  $G = \prod_i \mathbb{Z}_{N_i}$  の各直積因子に対して  $L = 0 \pmod{N_i}$  を満たす必要がある。[14] では、周期境界条件の 1 次元系を幾つかの連結成分に分割してパッチごとに対称性を考慮する bundle symmetry を導入しており、境界項を無視する妥当性を考察している。

$L$  を任意にとつて具体的に  $U_g^{(k)} |\psi\rangle$  の係数を計算すると、

$$\begin{aligned}
& \left(X_g^{(0)}\right)^{-B_k(1)} A^{(1)} \left(X_g^{(0)}\right)^{B_k(1)} \left(X_g^{(0)}\right)^{-B_k(2)} A^{(2)} \dots \\
& \quad \dots A^{(L-1)} \left(X_g^{(0)}\right)^{B_k(L-1)} \left(X_g^{(0)}\right)^{-B_k(L)} A^{(L)} \left(X_g^{(0)}\right)^{B_k(L)} \\
& = \left(X_g^{(0)}\right)^{-B_{k-1}(1)} A^{(1)} \left(X_g^{(0)}\right)^{-B_{k-1}(2)} A^{(2)} \dots \\
& \quad \dots A^{(L-1)} \left(X_g^{(0)}\right)^{-B_{k-1}(L)} A^{(L)} \left(X_g^{(0)}\right)^{B_k(L)} \\
& \doteq \left(X_g^{(1)}\right)^{-B_{k-1}(1)} A^{(1)} \left(X_g^{(1)}\right)^{B_{k-1}(1)} \left(X_g^{(1)}\right)^{-B_{k-1}(2)} A^{(2)} \left(X_g^{(1)}\right)^{B_{k-1}(2)} \dots \\
& \quad \dots \left(X_g^{(1)}\right)^{-B_{k-2}(L)} A^{(L-1)} \left(X_g^{(1)}\right)^{B_{k-2}(L)} \left(X_g^{(1)}\right)^{-B_{k-1}(L)} A^{(L)} \\
& \quad \times \left(X_g^{(1)}\right)^{B_{k-1}(L)} \left(X_g^{(0)}\right)^{B_k(L)} \\
& \doteq \dots \\
& \doteq \left(X_g^{(l)}\right)^{-B_{k-l-1}(1)} A^{(1)} \left(X_g^{(l)}\right)^{-B_{k-l-1}(2)} A^{(2)} \dots \\
& \quad \dots A^{(L-1)} \left(X_g^{(l)}\right)^{-B_{k-l-1}(L)} A^{(L)} \prod_{n=0}^l \left(X_g^{(n)}\right)^{B_{k-n}(L)} \\
& \doteq \left(X_g^{(k-1)}\right)^\dagger A^{(1)} \left(X_g^{(k-1)}\right)^\dagger A^{(2)} \dots \\
& \quad \dots \left(X_g^{(k-1)}\right)^\dagger A^{(L-1)} \left(X_g^{(k-1)}\right)^\dagger A^{(L)} \prod_{n=0}^{k-1} \left(X_g^{(n)}\right)^{B_{k-n}(L)} \\
& \doteq \left(X_g^{(k)}\right)^\dagger A^{(1)} A^{(2)} \dots A^{(L)} \left(\prod_{n=0}^k \left(X_g^{(n)}\right)^{B_{k-n}(L)}\right).
\end{aligned}$$

よって対称性  $U_g^{(k)}$  の全系への作用が端にゲージとして局在する。

### 4.2.3 可換群多極子 SPT 相の分類

本節では簡単のため  $G$  を有限可換群とする。

1 次元 SPT 相の端に現れるゲージは  $G$  射影表現であり、分類は  $H^2(G, U(1))$  で与えられた (射影表現については appendix C.2 を参照)。 $X_g^{(k)}$  は群元  $g \in G$  とランク  $k$  の自由度があるので、この表示だけから推察すると、素朴には  $r+1$  種類の独立な  $G$  作用がある対称性の射影表現、すなわち  $G^{\times r}$  の射影表現になって、分類は  $H^2(G^{\times(r+1)}, U(1))$  になると予想される。しかし対称性作用が端にゲージとして現れるので、 $U$  の可換性は端のゲージの可換性に対応し、分類は制限される。具体的には、

$$\begin{aligned}
& X_h^{(l)\dagger} X_g^{(k)\dagger} A \dots A \prod_{m=0}^k \left(X_g^{(m)}\right)^{B_{k-m}(L)} \prod_{n=0}^l \left(X_h^{(n)}\right)^{B_{l-n}(L)} \\
& = X_g^{(k)\dagger} X_h^{(l)\dagger} A \dots A \prod_{n=0}^l \left(X_h^{(n)}\right)^{B_{l-n}(L)} \prod_{m=0}^k \left(X_g^{(m)}\right)^{B_{k-m}(L)}
\end{aligned} \tag{4.2.4}$$

を要請する。

$G$  が有限可換群であることに注意して、

$$X_g^{(k)} X_h^{(l)} = e^{i\theta_{g,h}(k,l)} X_h^{(l)} X_g^{(k)} \tag{4.2.5}$$

表 4.1:  $r = 3$  のときの  $\theta_{g,h}(k, l)$  の表。赤字で示した部分が独立な成分であり、他は (4.2.7) と (4.2.8) により決定される。

$k \backslash l$	0	1	2	3
0	0	0	0	$\theta(0, 3)$
1	0	0	$-\theta(0, 3)$	$\theta(1, 3)$
2	0	$\theta(0, 3)$	$-\theta(0, 3) - \theta(1, 3)$	$\theta(2, 3)$
3	$-\theta(0, 3)$	$2\theta(0, 3) + \theta(1, 3)$	$-\theta(0, 3) - \theta(1, 3) - \theta(2, 3)$	$\theta(3, 3)$

とおく。??でみたように、 $e^{i\theta_{g,h}(k,l)}$  は  $H^2(G^{\times(r+1)}, U(1))$  と同型である。よって (4.2.4) を満たす  $\theta$  を全て列挙すれば SPT 相を分類したことになる。対称性の可換性条件は

$$\exp \left[ i \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l \theta_{g,h}(m, n) B_{k-m}(L) B_{l-n}(L) - i\theta_{g,h}(k, l) \right] = 1 \quad (4.2.6)$$

と整理できる。以下の命題により条件は大幅に簡約される。

**Prop. 2**

(4.2.6) が任意の  $L \in \mathbb{N}$  及び  $g, h \in G$  に対して成り立つことと、

$$\theta_{g,h}(m, n) = \theta_{g,h}(m+1, n) + \theta_{g,h}(m, n+1) \quad (\text{for } m, n < r) \quad (4.2.7)$$

$$\theta_{g,h}(m, n) = 0 \quad (\text{for } m+n < r) \quad (4.2.8)$$

が共に成り立つことは同値。

証明は技術的なので appendix E.5 に回すが、この命題により任意の  $g, h \in G$  に対して  $\theta_{g,h}(k, l)$  を  $k, l$  の表にまとめると、 $l = r$  の 1 列により表全体が決定される (Tbl. 4.1)。

加えて、(4.2.5) にて再度ゲージを交換することで

$$e^{i\theta_{g,h}(k,l)} = e^{-i\theta_{h,g}(l,k)} \quad (4.2.9)$$

が成り立つ。

■ $r = 3$  の場合の分類 これにより Tbl. 4.1 のような表の最右列に残る自由度が計算できる。具体的に  $r = 3$  の場合を例にとって考察する。

(4.2.8) により任意の  $g, h$  で  $\theta_{g,h}(0, 0) = \theta_{g,h}(0, 1) = \theta_{g,h}(1, 0) = \theta_{g,h}(0, 2) = \theta_{g,h}(1, 1) = \theta_{g,h}(2, 0) = 0$  である。最初に現れる非自明な自由度は  $\theta_{g,h}(0, 3)$  であり、これを決定すると (4.2.7) により

$$\theta_{g,h}(0, 3) = -\theta_{g,h}(1, 2) = \theta_{g,h}(2, 1) = -\theta_{g,h}(3, 0)$$

である。さらに (4.2.9) により

$$\theta_{g,h}(0, 3) = -\theta_{h,g}(3, 0) \stackrel{(4.2.7)}{=} \theta_{h,g}(0, 3)$$

となるので、 $\theta_{g,h}(0, 3)$  は  $g, h$  の交換に関して対称となる。

続いての自由度  $\theta_{g,h}(1, 3)$  を決定すると、(4.2.7) により

$$\theta_{g,h}(2, 2) = -\theta_{g,h}(1, 3) - \theta_{g,h}(0, 3)$$

であり、右辺はすでに決定した自由度  $\theta_{g,h}(0,3)$  を除いて  $\theta_{g,h}(1,3)$  の逆符号になる。同様に

$$\theta_{g,h}(3,1) = \theta_{g,h}(1,3) + 2\theta_{g,h}(0,3)$$

は  $\theta_{g,h}(0,3)$  を除いて  $\theta_{g,h}(1,3)$  と等価。(4.2.9) を考慮すると

$$\theta_{g,h}(1,3) = -\theta_{h,g}(3,1) \stackrel{(4.2.7)}{=} -\theta_{h,g}(1,3) - 2\theta_{h,g}(0,3)$$

となり、既出の自由度  $\theta_{g,h}(0,3)$  を除いて  $\theta_{g,h}(1,3)$  は  $g, h$  の交換に関して反対称になる。より厳密に言えば、 $\theta_{g,h}(1,3)$  の  $g, h$  に関する対称性が

$$\theta_{g,h}(1,3) + \theta_{h,g}(1,3) = -2\theta_{g,h}(0,3)$$

となるため、 $\theta_{g,h}(0,3)$  の自由度で完全に決定される。

$\theta_{g,h}(2,3)$  を決定すると、(4.2.7) により  $\theta_{g,h}(3,2)$  が決定され、(4.2.9) から

$$\theta_{g,h}(2,3) - \theta_{h,g}(2,3) = -\theta_{g,h}(0,3) - \theta_{g,h}(1,3)$$

となり、すでに決めている自由度を除いて  $\theta_{g,h}(2,3)$  は  $g, h$  の交換に関して対称。

最後に  $\theta_{g,h}(3,3)$  を決定すると Tbl. 4.1 の全ての成分が決定される。(4.2.9) により

$$\theta_{g,h}(3,3) = -\theta_{h,g}(3,3)$$

なので、 $\theta_{g,h}(3,3)$  は  $g, h$  の交換に関して反対称。

以上の議論から、 $r = 3$  の multipole SPT 相は  $g, h$  対称な  $\theta_{g,h}(0,3), \theta_{g,h}(2,3)$  と  $g, h$  反対称な  $\theta_{g,h}(1,3), \theta_{g,h}(3,3)$  の 4 種類の独立な自由度で決定される。その一方、??における議論から

#### 4.2.4 decorated domain wall の構成法による多極子 SPT 相の具体例

次数  $r$  の多極子 SPT 相は  $\mathbb{Z}_N$  スピンを用いて具体例を系統的に組むことができる。 $Z, X$  を  $\mathbb{Z}_N$ 、 $\mathcal{Z}, \mathcal{X}$  を  $\mathbb{Z}_M$  スピンの一般化 Pauli 行列とする。すなわち

$$ZX = e^{2\pi i/N} XZ, \quad \mathcal{Z}\mathcal{X} = e^{2\pi i/M} \mathcal{X}\mathcal{Z}.$$

これらは  $G = \mathbb{Z}_N \times \mathbb{Z}_M$  の忠実な表現を構成する。

degree  $2n$  の多極子 SPT 相

degree  $2n + 1$  の多極子 SPT 相



## 付録 A

# 線型代数に関する命題と証明

本文で用いた線型代数に関する命題とその証明をまとめる。明記しない限り有限次元の複素数体上のベクトル空間を考える。

### A.1 行列の分解と幾何学的解釈

$m \times n$  行列  $A$  は、 $\mathbb{C}^n$  空間から  $\mathbb{C}^m$  空間への線形写像である。線形性から、本質的に  $\mathbb{C}^n$  の基底が  $\mathbb{C}^m$  へどのように移されるかだけで決定される。また行列のランクは  $\mathbb{C}^m$  に移された基底の次元、すなわち残存する基底ベクトルの本数である。そこで、

1. 変換で残存する  $\mathbb{C}^m$  の正規直交基底  $r = \text{rank } A$  本を指定する
2.  $r$  本の正規直交基底へ移る  $\mathbb{C}^n$  の基底を指定する

の2段階に分解できる。1段階目は  $m$  成分を有するベクトル  $r$  本を指定する操作であり、 $m \times r$  行列で表される。2段階目は  $\mathbb{C}^n$  の基底から  $r$  本を適切に選び、拡大縮小して  $\mathbb{C}^r$  部分空間に制限する操作であり、 $r \times n$  行列で表される。これを踏まえて、以下の命題が成り立つ。

#### Prop. 3: 階数分解

任意の  $m \times n$  行列  $M$  は、 $r = \text{rank } M$  とすると、 $m \times r$  行列  $B$ ,  $r \times n$  行列  $C$  を用いて  $M = BC$  と分解できる。特に  $B^\dagger B = 1_r$  とできる。

#### Prf.

$M$  の列ベクトル  $\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n\}$  は  $r$  次元の線形部分空間  $V$  に属する。 $V$  の正規直交基底  $\{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_r\}$  をとると、各  $\mathbf{a}_j$  は

$$\mathbf{a}_j = \sum_{k=1}^r \mathbf{b}_k c_{kj}$$

と一意に表せる。 $B$  を  $(\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_r)$  を列に持つ  $m \times r$  行列、 $C$  を  $(c_{kj})$  を成分とする  $r \times n$  行列とすれば  $M = BC$  と分解できる。構成から  $B^\dagger B = 1_r$  である。

Sec. 2.1.1 の流れを追うと、 $M$  の特異値分解も類似の解釈ができることがわかる。Sec. 2.1.1 に記法を合わせれば、ユニタリ  $U, V$  は階数分解  $\tilde{M} = \tilde{B}\tilde{C}$  の結果と  $r \times r$  ユ

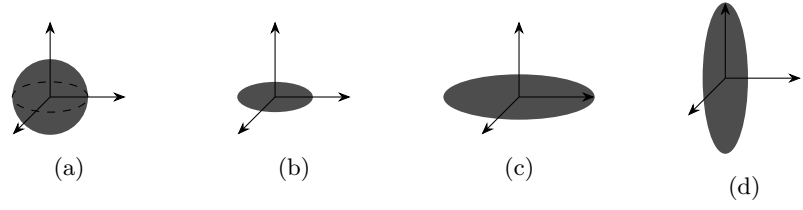


図 A.1: 線形変換  $A: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^m$  の幾何学的解釈。  $n = m = 3, r = 2$  の場合を示す。(a)  $\mathbb{C}^n$  の単位球  $B^n$ 。標準基底が表面に配置されている。(b)  $V$  によって  $B^n$  が  $r$  次元球  $B^r$  に潰される。(c)  $\Sigma$  によって  $r$  次元球が  $r$  次元楕円体に伸縮される。(d)  $U$  によって  $r$  次元楕円体が  $\mathbb{C}^m$  に埋め込まれる。

ニタリ行列  $\tilde{D}$  を用いて  $U = \tilde{B}\tilde{D}, V = \tilde{D}^\dagger\tilde{C}$  と表された。階数分解と同様に解釈すれば、 $V$  は  $\mathbb{C}^n$  の標準基底を  $\mathbb{C}^r$  部分空間の正規直交基底に移す操作、 $U$  は  $\mathbb{C}^r$  部分空間の正規直交基底を  $\mathbb{C}^m$  の正規直交基底に埋め込む操作であり、 $\Sigma$  は基底の長さの拡大、縮小を表す。

より直感的な解釈として、 $\mathbb{C}^n$  の単位球  $B^n$  の  $A$  による変換を考える (Fig. A.1)。 $\mathbb{C}^n$  の標準基底は  $B^n$  の表面に配置してあり、 $A$  はこの球を  $\mathbb{C}^m$  の楕円体に変換する。まず  $V$  によって  $B^n$  は  $r$  次元球  $B^r$  に潰される。ユニタリ性から、 $r$  次元空間では厳密に球体になることに注意。次に  $\Sigma$  によってこの  $r$  次元球は各基底ベクトルの方向に  $\Sigma$  の対角成分の値で伸縮され、 $r$  次元楕円体になる。最後にこの  $r$  次元楕円体はユニタリ  $U$  によって  $\mathbb{C}^m$  空間に埋め込まれる。ここでもユニタリ性から、楕円体の形は変わらない。

## A.2 ノルム

本稿で扱う種々のノルムの定義と性質を概観する。

初めに、ベクトルのノルムを定義する。最もメジャーな定義は Euclid ノルムだが、性質に応じて他のノルムも用いられる。

### Def. 3: $L_p$ ノルム

$v \in \mathbb{C}^n$  に対し、 $L_p$  ノルムを

$$\|v\|_p := \left( \sum_{i=1}^n |v_i|^p \right)^{1/p}$$

と定義する。

特に  $L_2$  ノルムが Euclid 距離、 $L_1$  ノルムが Manhattan 距離を与える。特に  $L_2$  ノルムは  $\|v\|_2 = \sqrt{v^\dagger v}$  と表すことができる。 $L_\infty$  ノルムは  $p \rightarrow \infty$  の自然な極限として  $\max_i |v_i|$  で定義される。本稿で使うのはこの3つのみ。Fig. A.2 を見てもわかるように、

$$\|v\|_\infty \leq \|v\|_2 \leq \|v\|_1 \quad (\text{A.2.1})$$

が成り立つ。明示しない限り  $2$  ノルムを用い、 $\|v\|$  と略記する。 $L_1, L_\infty$  ノルムは基底の選び方に依存することに注意。逆に長さ  $1$  のノルムによる球面を考えることも示唆的であ



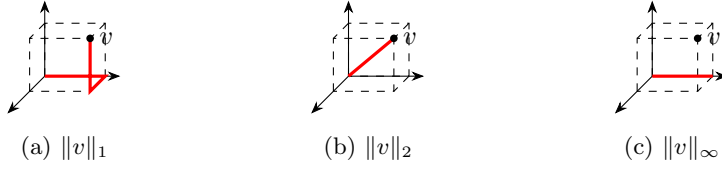
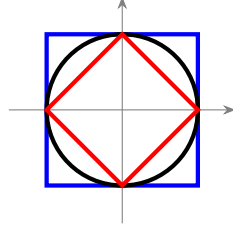


図 A.2: ノルムの幾何学的解釈

図 A.3:  $L_1$  ノルム (赤),  $L_2$  ノルム (黒),  $L_\infty$  ノルム (青) で定義される  $\mathbb{R}^2$  上の長さ 1 の円周

る。それぞれのノルムで定義される  $\mathbb{R}^2$  上半径 1 の円周を描画すると Fig. A.3 のようになる。

続いて行列のノルムを定義する。本稿で用いるのは以下の 3 つである。

#### Def. 4: 行列ノルム

$m \times n$  行列  $A$  に対し、誘導ノルムを

$$\|A\| := \sup_{v \in \mathbb{C}^n; \|v\|=1} \|Av\|,$$

Frobenius ノルムを

$$\|A\|_F := \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2} = \sqrt{\text{Tr}(A^\dagger A)},$$

トレースノルムを

$$\|A\|_{\text{tr}} := \text{Tr} \sqrt{A^\dagger A}$$

と定義する。

appendix A.1 で述べたように、行列は幾何学的解釈が可能で、特に特異値分解はその解釈を明確にする。行列  $A$  の特異値分解を  $A = U\Sigma V^\dagger$ , 特異値の順序を  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots > 0$  としてそれぞれのノルムを比較する。ユニタリ  $U, V$  は  $\mathbb{C}^r \subset \mathbb{C}^n$  のベクトルの 2 ノルムを変えず、 $\mathbb{C}^n \setminus \mathbb{C}^r$  のベクトルを潰すので、

$$\|A\| = \sup_{\|v\|=1} \|U\Sigma V^\dagger v\| = \sup_{\|v\|=1} \|\Sigma v\| = \sigma_1 = \|\sigma\|_\infty$$

が成り立つ。Frobenius ノルムは

$$\|A\|_F = \sqrt{\text{Tr}(V\Sigma U^\dagger U\Sigma V^\dagger)} = \sqrt{\text{Tr}(\Sigma^2)} = \sqrt{\sum_k \sigma_k^2} = \|\sigma\|_2$$

	誘導ノルム	Frobenius ノルム	トレースノルム
定義	$\sup_{\ v\ =1} \ Av\ $	$\sqrt{A^\dagger A}$	$\text{Tr} \sqrt{A^\dagger A}$
$\sigma$ による表現	$\ A\  = \ \sigma\ _\infty$	$\ A\ _F = \ \sigma\ _2$	$\ A\ _{\text{tr}} = \ \sigma\ _1$
楕円体による解釈	楕円体の最長半径	主軸の二乗平均長	全主軸の合計長

表 A.1: 行列ノルムの比較

となる。トレースノルムは

$$\|A\|_{\text{tr}} = \text{Tr} \sqrt{V \Sigma U^\dagger U \Sigma V^\dagger}$$

と計算される。ここに、 $\sqrt{A}$  は  $A = BB$  なる行列  $B$  である。平方根の内部は固有値を  $\Sigma^2$  の対角成分とするエルミート行列なので (cf. Sec. 2.1.1)、ユニタリ行列  $W$  と  $\Sigma^2$  を用いて  $V \Sigma U^\dagger U \Sigma V^\dagger = W \Sigma^2 W^\dagger$  と対角化できて、

$$\|A\|_{\text{tr}} = \text{Tr} \sqrt{W \Sigma^2 W^\dagger} = \text{Tr}(W \Sigma W^\dagger) = \text{Tr}(\Sigma) = \|\sigma\|_1$$

となる。appendix A.1 の楕円体を用いた解釈と照合すると、Tbl. A.1 のようにまとめられる。(A.2.1) と同様に、

$$\|A\|_{\text{tr}} \geq \|A\|_F \geq \|A\|$$

が成り立つ。ベクトルノルムと異なり上記のノルムはいずれも基底の取り方に依存しないが、行列のノルムは Frobenius ノルムをとることが比較的多い。また  $m$  行 1 列の行列すなわち列ベクトルでは、3つのノルムは全て  $L_2$  ノルムに一致する。

またベクトルの余弦定理  $\|u - v\|^2 = \|u\|^2 + \|v\|^2 - (u^\dagger v + v^\dagger u) = \|u\|^2 + \|v\|^2 - (\langle u, v \rangle + \langle v, u \rangle)$  に対応して、

$$\|A - B\|_F^2 = \|A\|_F^2 + \|B\|_F^2 - \text{Tr}(A^\dagger B + B^\dagger A)$$

をもとに行列の内積を定義する。

**Def. 5: Hilbert-Schmidt 内積**

$m \times n$  行列  $A, B$  に対し、Hilbert-Schmidt 内積を

$$\langle A, B \rangle_{HS} := \text{Tr}(A^\dagger B)$$

と定義する。

この値が大きいほど  $\|A - B\|_F$  が小さくなるので、Frobenius ノルムで測った行列  $A, B$  の相関と解釈できる。特異値分解すると

$$\langle A, B \rangle_{HS} = \text{Tr} \left( V_A \Sigma_A U_A^\dagger U_B \Sigma_B V_B^\dagger \right) = \text{Tr} \left( \Sigma_A U_A^\dagger U_B \Sigma_B V_B^\dagger V_A \right)$$

の形を得る。

最後に演算子ノルムを定義する。本稿で用いるのは以下のもののみである。

**Def. 6: 演算子ノルム**

線形変換  $T: \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$  に対し、演算子ノルムを

$$\|T\| := \sup_{A \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}); \|A\|=1} \|T(A)\|$$

と定義する。

ここまでで定義した全てのノルムで

**非負**  $\|x\| \geq 0$

**0 なら零元**  $\|x\| = 0 \iff x = 0$

**斉次**  $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$  for  $\alpha \in \mathbb{C}$

**三角不等式**  $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

を満たす。上 3 つはそれぞれの定義から直ちに従う。三角不等式の証明は非自明だが、ここでは省略する。

ノルムの計算にあたって有用な公式を導出する。まずはじめに、誘導ノルムに関する以下の性質を示す。

**Cor. 3: 誘導ノルムの性質**

適切なサイズの行列  $A, B$ , ベクトル  $v$  に対し、以下が成り立つ。

$$\|Av\| \leq \|A\| \|v\|$$

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$$

第 1 式は左辺が線形変換したあとのベクトルのノルム、右辺は  $A$  による拡大の最大値を  $v$  のノルムにかけたものである。第 2 式右辺は  $A$  によるベクトルの拡大の最大値と  $B$  によるベクトルの拡大の最大値をかけたものであり、 $AB$  による拡大の最大値を下回らない。この解釈に従えば、第 1 式ではベクトル  $v$  が  $A$  の主軸に沿うとき、第 2 式では  $B$  の主軸が  $A$  の主軸に沿うときに等号が成り立つことがわかる。

**Prf.**

第一式は

$$\|Av\| = \|A(v/\|v\|)\| \|v\| \leq \sup_{\|v'\|=1} \|Av'\| \|v\| = \|A\| \|v\|$$

から得られる。またこれを用いて、

$$\|AB\| = \sup_{\|v\|=1} \|ABv\| \leq \sup_{\|v\|=1} \|A\| \|Bv\| \leq \sup_{\|v\|=1} \|A\| \|B\| \|v\|$$

から第二式を得る。

What to proven...

$$|\text{Tr } AB| \leq \|A\|_F \|B\|$$



## 付録 B

# 対称性と表現論

本章では対称性の記述において重要な役割を占める群及びある種の圏とその表現論を数学的側面から扱う。本稿では離散対称性を主に扱っているため、ここでも離散対称性を念頭に記述する。群の表現論については主に

### B.1 群

対称性を素朴に記述すると群が現れる。



## 付録 C

# 群の表現

量子力学は線形代数によって記述される。対称性を量子力学に組み込むには、必然的にその構造を線形代数に持ち込まなければならない。群の表現は、群の構造を線形空間や射影空間に持ち込むための枠組みである。量子力学において対称性を真正面から議論するには群の表現論を避けて通れない。本節では、はじめに appendix C.1 で群を線型空間で表現する**線形表現**を定義し、さらに表現の最も良い簡約である既約表現を導入する。加えて Landau paradigm に基づく相の分類との関係を議論する。続いて appendix C.2 で、

本節は主に [30] を参考にした。本節では群の有限次元表現のみを扱う。また群は特に有限群を念頭に置く。

### C.1 線形表現

#### C.1.1 線形表現の定義

##### Def. 7: 線形表現

群  $G$  に対し、準同型写像  $D : G \rightarrow \text{GL}(d)$  を  $G$  の  $d$  次元線形表現 (linear representation) または単に表現という。

直ちに

$$D(1_G) = \text{id}_d, \quad D(g^{-1}) = D(g)^{-1}$$

を得る。

##### Def. 8: 表現の基底 (basis)

線型空間  $X$  に対し群  $G$  が線型写像として左作用するものとする。このとき一次独立な  $d$  個のベクトル  $\{\psi_\mu \in X\}_{\mu=1, \dots, d}$  と  $G$  の  $d$  次元表現  $D : G \rightarrow \text{GL}(d; X)$  との間に

$$(g\psi)_\mu = \sum_{\nu=1}^d D(g)_{\mu\nu} \psi_\nu \quad (\forall g \in G)$$

が成り立つとき、 $\{\psi_\nu\}_{\nu=1, \dots, d}$  を表現  $D$  の基底という。

量子力学では、表現  $D(g)$  が対称性演算子、基底  $\psi_\mu$  が状態ベクトルを表す。上の定義は、対称性操作  $g \in G$  に対応する対称性演算子  $D(g)$  の作用によって状態  $\psi_\mu$  が状態

$(g\psi)_\mu$  に変換されることを示している。量子力学で対称性が群の表現として現れるといったとき、上の描像で終始している。物理現象は観測するまで基底の選び方に依存しないという信念のもと、群の表現もしばしば基底の変換で同一視する。有限群  $G$  の二つの  $d$  次元線形表現  $D_1, D_2$  が

$$\exists T \in \text{GL}(d), \forall g \in G, D_1(g) = TD_2(g)T^{-1}$$

を満たすとき、二つの表現  $D_1, D_2$  は同値であると言って  $D_1 \sim D_2$  で表す。また  $D_1$  から  $D_2$  を導く操作を同値変換という。多くの場面で等価な表現を同一視するため、等価な表現に共通する量が欲しい。線形代数の知識から行列式や対角和がこれに該当することがわかる。群の表現論、特に物質の相分類に関わる表現論では対角和が特に有用で、指標 (character) と呼ばれる。

量子系において、確率の保存を満たすように線形表現もユニタリであることが望ましい。表現  $D$  の値域が  $U(d)$  のとき  $D$  をユニタリ表現 (unitary representation) という。

#### Thm. 8: 表現のユニタリ化

有限群の任意の線形表現は同値変換でユニタリ表現にできる。



**Prf.**

群  $G$  の任意の  $d$  次元線形表現  $D : G \rightarrow \text{GL}(d)$  に対し、

$$H := \sum_{g \in G} D(g)^\dagger D(g)$$

とすると、これは明らかにエルミート行列である。また  $D(g)$  に対して逆元  $D(g)^{-1}$  が取れることから  $\det D(g) \neq 0$  ( $\forall g \in G$ ) であり、 $H$  は正定値である。従ってユニタリ行列  $U \in \text{U}(d)$  により

$$H = U \Lambda U^\dagger, \quad \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_d)$$

と対角化できて、固有値  $\lambda_i$  は全て正。

そこで  $D$  と等価な表現  $D'$  を

$$D'(g) := V^{-1} D(g) V, \quad V := U \Lambda^{-1/2}$$

により与えると、

$$\begin{aligned} D'(g)^\dagger D'(g) &= V^\dagger D(g)^\dagger (V^{-1})^\dagger V^{-1} D(g) V \\ &= \Lambda^{-1/2} U^\dagger D(g)^\dagger U \Lambda^{1/2} \Lambda^{1/2} U^\dagger D(g) U \Lambda^{-1/2} \\ &= \Lambda^{-1/2} U^\dagger D(g) H D(g) U \Lambda^{-1/2} \end{aligned}$$

ここで

$$D(g)^\dagger H D(g) = \sum_{g'} D(g)^\dagger D(g')^\dagger D(g') D(g) = \sum_{g'' (=g'g) \in G} D(g'g)^\dagger D(g'g) = H$$

なので、

$$D'(g)^\dagger D'(g) = \Lambda^{-1/2} U^\dagger H U \Lambda^{-1/2} = 1.$$

となり、 $D'$  はユニタリ表現である。

この定理を踏まえ、以下では線形表現をユニタリ表現として扱う。

### C.1.2 種々の表現の構成

量子力学の複合粒子系はテンソル積で記述される。Hilbert 空間  $V_1, V_2$  がそれぞれ  $d_1, d_2$  次元の線形空間であるとき、複合系  $V_1 \otimes V_2$  は  $d_1 d_2$  次元である。これを反映して、 $V_1$  に作用する  $d_1$  次元線形表現  $D^{(1)}$  と  $V_2$  に作用する  $d_2$  次元線形表現  $D^{(2)}$  から複合系  $V_1 \otimes V_2$  に作用する  $d_1 d_2$  次元線形表現を構成する。

まずは二つの系が完全に独立しており、それぞれが有する対称性  $G, H$  すら別々であって良い場合を考える。群  $G, H$  の表現  $D^{(G)} : G \rightarrow V_1, D^{(H)} : H \rightarrow V_2$  をとる。 $V_1 \boxtimes V_2 := V_1 \otimes V_2$  は通常の線型空間のテンソル積として、

$$\begin{array}{ccc} D^{(G)} \boxtimes D^{(H)} : & G \times H & \rightarrow & V_1 \boxtimes V_2 \\ & \Downarrow & & \Downarrow \\ & (g, h) & \mapsto & D^{(G)}(g) \otimes D^{(H)}(h) \end{array}$$

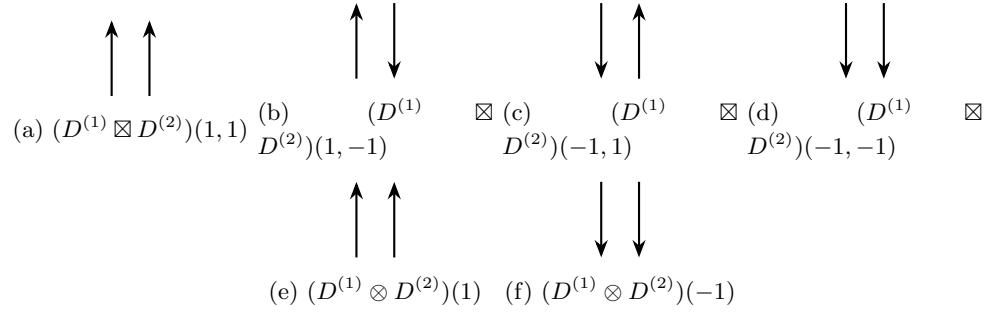


図 C.1: 2 粒子  $\mathbb{Z}_2$  スピン系における外部テンソル積表現 (a-d) とテンソル積表現 (e-f) それぞれで表せる対称性操作

で定義される  $D^{(G)} \boxtimes D^{(H)}$  を  $D^{(G)}$  と  $D^{(H)}$  の外部テンソル積またはボックステンソル積 (box tensor product) と呼ぶ。ここに、 $D^{(G)}(g) \otimes D^{(H)}(h)$  は

$$V_1 \otimes V_2 \mapsto (D^{(G)}(g)V_1) \otimes (D^{(H)}(h)V_2)$$

と作用し、行列形式で書くと

$$\begin{pmatrix} D_{11}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{11}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) & & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ D_{11}^{(G)}(g)D_{d_21}^{(H)}(h) & \cdots & D_{11}^{(G)}(g)D_{d_2d_2}^{(H)}(h) & & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{d_21}^{(H)}(h) & \cdots & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{d_2d_2}^{(H)}(h) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ D_{d_11}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_11}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) & & D_{d_1d_1}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_1d_1}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ D_{d_11}^{(G)}(g)D_{d_21}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_11}^{(G)}(g)D_{d_2d_2}^{(H)}(h) & & D_{d_1d_1}^{(G)}(g)D_{d_21}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_1d_1}^{(G)}(g)D_{d_2d_2}^{(H)}(h) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \psi_5 \\ \psi_6 \\ \psi_7 \end{pmatrix}$$

となる。すなわち  $D^{(G)}$  の添え字で  $d_1 \times d_1$  個のブロックから一つが指定され、 $D^{(H)}$  の添え字でブロック内  $d_2 \times d_2$  個の成分から一つが指定される。外部テンソル積は主に 2 つの系の stacking と呼ばれる操作で用いられる。

上で見たような外部テンソル積による複合系は複合系を独立な系の複合としか見ておらず、マクロな対称性の記述に適さない。我々が興味を持っているのは、個々の系が同じ対称性を有しており ( $G = H$ )、マクロな対称性操作を施す場合である。そこで、

$$D^{(1)} \otimes D^{(2)} : G \rightarrow \text{GL}(d_1 d_2); g \mapsto D^{(1)}(g) \otimes D^{(2)}(g)$$

を**テンソル積表現** (tensor product representation) または**直積表現**と呼ぶ。例えば 2 スピン系における外部テンソル積表現とテンソル積表現は Fig. C.1 のような違いがある。量子多体系で通常考察する大域的対称性は後者である。

スピン 1/2 粒子の 2 体系では、合計スピンとして  $S = 0$  の状態と  $S = 1$  の状態がある。このときスピン角運動量を保存するユニタリ変換で両者の間を繋ぐことはできない。これは、基底の適切な変換によって表現行列が以下のようにブロック対角化され、二つのセクターを混ぜる非対角項が存在しなくなることを意味する。

$$D^{(1)} \oplus D^{(2)}(g) = \begin{pmatrix} D^{(1)}(g) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(g) \end{pmatrix}$$

このような表現を**直和表現** (direct sum representation) と呼ぶ。対称性演算子  $D^{(1)} \oplus D^{(2)}(g)$  と交換する演算子もまた  $d_1 \times d_1$  と  $d_2 \times d_2$  のブロック対角行列で表される。**ホンマか???** 異なるブロックは互いに完全に独立しているため、直和表現の解析は個別のセクターに注目すれば良い。線形表現がある小さな表現の直和表現 (と同値な表現) であるとき、基底を適切に選ぶことでさらに直和分解し、別々のセクターとすると解析が容易になる。このように、さらに小さな表現の直和表現に分解できる表現を**可約表現** (reducible representation)、それ以上小さな表現に直和分解できない表現を**既約表現** (irreducible representation) と呼ぶ。任意の表現は既約表現から構成できるので、表現論の、すなわち量子力学における対称性の解析は既約表現の解析に帰着する。

### C.1.3 Landau paradigm における相の分類と既約表現の分類

以下、詳細に立ち入る前に物理的背景を確認する。

Landau paradigm は対称性の自発的破れの有無と物質の相を対応させる指導原理である。熱力学極限の基底状態では、基底状態の対称性が自発的に破れ、理論すなわち Hamiltonian の対称性の部分群に落ちる場合がある。

Hamiltonian の対称性を群  $G$  とする。群元  $g \in G$  は Hilbert 空間のユニタリ演算子  $\hat{U}_g$  に対応する。対称性操作の結合性  $\hat{U}_{g_1}\hat{U}_{g_2} = \hat{U}_{g_1g_2}$  を要請すると、 $\hat{U}$  は  $G$  のユニタリ線形表現となる。Hamiltonian が  $G$  で対称であるとは、任意の  $g \in G$  に対し Hamiltonian が同じ次元のユニタリ表現  $\hat{U}_g$  と可換であることである。このとき Hamiltonian と  $\{\hat{U}_g\}_{g \in G}$  は同時対角化可能なので、エネルギー固有状態をこれらの同時固有状態に取れる。

一方で基底状態の対称性を群  $H \leq G$  とする。 $\hat{U}$  の  $H$  における表現は

$$\hat{U}_h^{(H)} := \begin{cases} \hat{U}_h & (h \in H) \\ 0 & (h \notin H) \end{cases}$$

で定義されるので、基底状態の対称性は

$$\hat{U}_h |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

とする。<sup>\*1</sup>

### C.1.4 Schur の補題と帰結

既約表現において以下の補題が有用である。

#### Lem. 2: Schur の補題 I

$D^{(1)}, D^{(2)}$  が群  $G$  の既約表現で、次元がそれぞれ  $m, n$  のとき、

$$\forall g \in G, D^{(1)}(g)M = MD^{(2)}(g)$$

なる  $m \times n$  行列  $M$  は

1.  $M = 0$

<sup>\*1</sup> 基底への作用で生じる位相因子の議論は appendix C.2 にて後述。

2.  $M$  は正方行列で  $\det M \neq 0$  かつ  $D^{(1)} \sim D^{(2)}$  のいずれか。

**Lem. 3: Schur の補題 II**

群  $G$  の有限次元既約表現  $D$  に対して、

$$D(g)M = MD(g) \quad (\forall g \in G)$$

を満たす行列  $M$  は単位行列の定数倍に限る。

*Proof of Lem. 2.* 表現  $D^{(1)}$  の作用する線型空間を  $V_1$ 、 $D^{(2)}$  の作用する線型空間を  $V_2$  とすると、 $M$  は  $V_2$  から  $V_1$  への線形変換と捉えられる。 $\ker M = \{x \in V_2 | Mx = 0\}$  の任意の元は  $MD^{(2)}x = D^{(1)}Mx = 0$  を満たすので、 $D^{(2)}x \in \ker M$  すなわち  $D_2 \ker M = \ker M$ 。 $D^{(2)}$  が正則かつ既約なので  $\ker M = V_2$  または  $\ker M = 0$  に限られる。

$\ker M = V_2$  のとき  $M = 0$ 。

$\ker M = 0$  のとき、 $M \neq 0$  は単射を成す。 $\forall x \in V_2$ ,  $D_1(g)Mx = MD_2(g)x$  すなわち  $D^{(1)}MV_2 = MV_2$ 。 $D^{(1)}$  が既約なので  $MV_2 = V_1$  に限られ、 $M : V_2 \rightarrow V_1$  は全射。ゆえに  $\det M \neq 0$  であり、直ちに  $D^{(2)}(g) = M^{-1}D^{(1)}(g)M$  を得る。□

*Proof of Lem. 3.* 仮定により  $\forall \lambda \in \mathbb{C}$  にて

$$D(g)(M - \lambda 1) = (M - \lambda 1)D(g)$$

が成り立つ。 $D$  が既約表現なので Schur の補題 I により

1.  $M - \lambda 1 = 0$
2.  $\det(M - \lambda 1) \neq 0$

のいずれか。 $\lambda$  を  $M$  の固有値とすれば  $\det(M - \lambda 1) = 0$  なので  $M$  は単位行列の定数倍に限られる。□

この補題から直ちに得られる帰結として、本稿で用いている命題に以下がある。

**Cor. 4: 有限 Abel 群の既約表現は 1 次元表現**

Abel 群の既約表現は 1 次元表現。

*Proof.* Abel 群の表現行列は

$$D(g)D(g') = D(g')D(g)$$

を満たすので、Lem. 3 により  $D(g)$  は単位行列の定数倍。特に既約表現なら  $D(g)$  は 1 次元になる。□

**Def. 9: 正則表現 (regular representation)**

群  $G$  から  $G$  への左作用

$$\rho : G \rightarrow \text{Aut } G; g \mapsto (g' \mapsto gg')$$

によって与えられる線形表現を正則表現という。

のちに Landau paradigm に基づく相分類を議論するため、部分群の表現も定義しなければならない。群の表現を部分群へ自然に落とし込むことは容易い。少しテクニカルだが、逆に部分群の表現をそれを含む群へ自然に拡張することもできる。

**Def. 10: 表現の制限・誘導表現**

群  $G$  の表現  $D$  の  $H \leq G$  への制限を、

$$D \downarrow H := \{D(h) | h \in H\}$$

で定義する。また  $G$  が有限群であって、左剰余類で

$$G = g_1 H \otimes \cdots \otimes g_k H \quad (g_1 = 1_G, k = |G/H|)$$

と分解できるとき、 $H$  の表現  $\Delta$  による  $G$  の誘導表現  $\Delta \uparrow G$  を

$$[(\Delta \uparrow G)(g)]_{i\mu, j\nu} := \delta_{ij}(g) [\Delta(g_i^{-1} g g_j)]_{\mu\nu} \\ \text{with } \delta_{ij}(g) = \begin{cases} 1 & (g_i^{-1} g g_j \in H) \\ 0 & (g_i^{-1} g g_j \notin H) \end{cases}, \quad \left( \begin{matrix} \mu, \nu \in \{1, \dots, \dim \Delta\} \\ i, j \in \{1, \dots, k = |G/H|\} \end{matrix} \right) \quad (\text{C.1.1})$$

と定義する。

**Prf. (C.1.1) が表現であること**

$g, g' \in G$  を与える。 $g_i^{-1} g g' g_j \in H$  のとき、 $g' g_j \in g_m H, g g_m \in g_n H$  とすると、

$$g_i H \ni g g' g_j = g g_m (g_m^{-1} g' g_j) \in g_n H$$

なので  $n = i$ . 従って

$$\exists! m \in \{1, \dots, |G/H|\} \text{ s.t. } \delta_{ij}(g g') = \delta_{im}(g) \delta_{mj}(g').$$

これにより

$$[(\Delta \uparrow G)(g g')]_{i\mu, j\nu} = \delta_{ij}(g g') \Delta(g_i^{-1} g g' g_j)_{\mu\nu} \\ = \sum_{m=1}^{|G/H|} \delta_{im}(g) \delta_{mj}(g') [\Delta(g_i^{-1} g g_m) \Delta(g_m^{-1} g g_j)]_{\mu\nu}.$$

**Cor. 5: 誘導表現の指標**

部分群  $H \leq G$  によって  $G = g_1 H \oplus \cdots \oplus g_{|G/H|} H$  と剰余類分解できるとする。 $H$  の表現  $\Delta_H$  の指標  $\chi_H$  に対して  $\Delta_H \uparrow G$  の指標は

$$\text{tr}(\Delta_H \uparrow G)(g) = \sum_{i\mu} \sum_{j\nu} \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} (\Delta_H \uparrow G)(g)_{i\mu, j\nu} = \sum_{j=1}^{|G/H|} \delta_{jj}(g) \chi_H(g_j^{-1} g g_j).$$

## C.2 射影表現

appendix C.1 では対称性演算子をユニタリ線形表現として扱い、Landau パラダイムが再現されることを確認した。しかし量子状態は常に  $U(1)$  位相の同一視を受ける。線形表現は  $U(1)$  位相自由度を許さないで、量子力学の対称性を記述するには不十分である。

対称性演算子を量子状態に作用させることで、一般に位相因子が生じ得る。この位相因子は、状態の位相自由度と捉えるよりも、演算子に  $U(1)$  位相自由度があるした方が都合が良い。実際、スピン  $1/2$  粒子の  $\pi$  回転を 2 回連続すると

$$\exp[i\pi\hat{\sigma}^z/2]\exp[i\pi\hat{\sigma}^z/2]|\psi\rangle = \exp[i\pi\hat{\sigma}^z]|\psi\rangle = -|\psi\rangle$$

となるが、この位相  $-1$  は両辺の  $|\psi\rangle$  を  $U(1)$  変換しても取り除くことができない。この現象に対する一つの解釈として、スピン演算子は Lie 代数  $\mathfrak{so}(3) \cong \mathfrak{su}(2)$  で生成される Lie 群  $SU(2)$  ( $\neq SO(3)$ ) の表現、すなわち回転群  $SO(3)$  の普遍被覆  $SU(2)$  の表現とみなす方法があるが、

- 物理的操作と表現される群が一致しない
- 普遍被覆が有名でない群では記述が煩雑になる

といった説明上の問題が生じる。本稿ではより見通しの良い解決策として、表現に  $U(1)$  位相自由度を許す射影表現を導入する。

### Def. 11: 射影表現 (projective representation)

群  $G$  と線型空間  $V$  において、 $D : G \rightarrow GL(V)$  と  $\omega : G \times G \rightarrow U(1)$  が

$$\begin{aligned} D(g)D(g') &= \omega(g, g')D(gg') \quad (\forall g, g' \in G) \\ (D(g_1)D(g_2))D(g_3) &= D(g_1)(D(g_2)D(g_3)) \end{aligned} \quad (C.2.1)$$

を満たすとき、 $D$  は  $\omega$  を乗数系 (multiplier) とする射影表現という。

### Cor. 6: コサイクル条件

離散群  $G$  に対して  $\omega : G \times G \rightarrow U(1)$  が  $G$  のある射影表現の乗数系であることと、

$$\omega(g_1, g_2)\omega(g_1g_2, g_3) = \omega(g_2, g_3)\omega(g_1, g_2g_3) \quad (\forall g_1, g_2, g_3 \in G) \quad (C.2.2)$$

を満たすことは同値。

*Proof.* (C.2.1) は

$$\begin{aligned} (D(g_1)D(g_2))D(g_3) &= \omega(g_1, g_2)D(g_1g_2)D(g_3) = \omega(g_1, g_2)\omega(g_1g_2, g_3)D(g_1g_2g_3) \\ D(g_1)(D(g_2)D(g_3)) &= D(g_1)\omega(g_2, g_3)D(g_2g_3) = \omega(g_2, g_3)\omega(g_1, g_2g_3)D(g_1g_2g_3) \end{aligned}$$

が等しいことを意味する。よって  $\omega$  が乗数系なら (C.2.2) が成り立つ。

逆に (C.2.2) が成り立つとする。

□

今我々は演算子に  $U(1)$  位相自由度を与えているので、 $D(g) \sim D_\theta(g) := e^{i\theta(g)} D(g)$  の同一視を受ける。この変換合わせて乗数系  $\omega$  も同一視を与えるべきである。 $U(1)$  変換によって

$$\omega(g_1, g_2) = D(g_1)D(g_2)D^{-1}(g_1g_2) \mapsto \frac{e^{i\theta(g_1)}e^{i\theta(g_2)}}{e^{i\theta(g_1g_2)}} D(g_1)D(g_2)D^{-1}(g_1g_2)$$

となるので、真に意味を持つ  $\omega$  は  $e^{i\theta(g_1)}e^{i\theta(g_2)}/e^{i\theta(g_1g_2)}$  の形で表せる自由度を 1 と同一視したものになる。すなわち、異なる乗数系  $\omega_1, \omega_2$  の間に

$$\omega_2(g_1, g_2) = \omega_1(g_1, g_2) e^{i\theta(g_1)} e^{i\theta(g_2)} / e^{i\theta(g_1g_2)}$$

なる  $\theta: G \rightarrow \mathbb{R}^\times$  が存在するとき、 $\omega_1 \sim \omega_2$  とする。

appendix C.1 にて、同一視を考慮に入れて線形表現を分類したように、射影表現の乗数系も同一視を入れて分類する。この問題は、ある群  $G$  を与えたとき、 $G$  の射影表現の乗数系に上の同値関係で同一視を入れたとき、あり得るものをすべて列挙することを意味する。

### C.2.1 射影表現の分類

### C.2.2 有限可換群の射影表現の分類に関する既知の結果

$G$  が有限可換群であれば、射影表現の乗数系を簡単に分類できることが知られている。

#### Def. 12: bicharacter

群  $G$  に対して、 $\beta: G \times G \rightarrow U(1)$  が

$$\beta(g_1g_2, h) = \beta(g_1, h)\beta(g_2, h), \quad \beta(g, h_1h_2) = \beta(g, h_1)\beta(g, h_2)$$

を任意の  $g, g_1, g_2, h, h_1, h_2 \in G$  満たすとき、 $\beta$  を  $G$  の bicharacter という。特に  $\beta(g, h) = \beta(h, g)$  のとき  $\beta$  を symmetric bicharacter,  $\beta(g, h) = [\beta(h, g)]^{-1}$  のとき anti-symmetric bicharacter という。

#### Lem. 4: 有限可換群の射影表現の乗数系は anti-symmetric bicharacter

有限可換群  $G$  の射影表現の乗数系を  $\omega$  とする。このとき、

$$\text{alt}(\omega)(g_1, g_2) := \frac{\omega(g_1, g_2)}{\omega(g_2, g_1)} \quad (\text{C.2.3})$$

で定義される  $\text{alt}(\omega)$  は anti-symmetric bicharacter である。

**Prf.**

Cocycle 条件 (C.2.2) および  $G$  が可換であることから、

$$\begin{aligned} \text{alt}(\omega)(g_1 g_2, h) &= \frac{\omega(g_1 g_2, h)}{\omega(h, g_1 g_2)} = \frac{\omega(g_1, g_2 h) \omega(g_2, h) / \omega(g_1, g_2)}{\omega(h, g_1) \omega(h g_1, g_2) / \omega(g_1, g_2)} \\ &= \frac{\omega(g_1, h g_2) \omega(g_2, h)}{\omega(h, g_1) \omega(g_1 h, g_2)} \\ &= \frac{\omega(g_1 h, g_2) \omega(g_1, h) / \omega(h, g_2) \cdot \omega(g_2, h)}{\omega(h, g_1) \omega(g_1 h, g_2)} \\ &= \text{alt}(\omega)(g_1, h) \text{alt}(\omega)(g_2, h) \end{aligned}$$

となり、 $\text{alt}(\omega)$  は第 1 変数について群準同型。同様に第 2 変数についても準同型。  
また定義より

$$\text{alt}(\omega)(h, g) = \frac{\omega(h, g)}{\omega(g, h)} = (\text{alt}(\omega)(g, h))^{-1}.$$

[25] に以下の命題が示されている。

**Prop. 4:** 有限可換群射影表現の分類は群の反可換な bicharacter の分類と等価

$G$  を有限可換群として、

$$X^2(G) := \{\text{bicharacters } G \times G \rightarrow U(1)\}$$

$$X_s^2(G) := \{\text{symmetric bicharacters } G \times G \rightarrow U(1)\}$$

$$X_a^2(G) := \{\text{anti-symmetric bicharacters } G \times G \rightarrow U(1)\}$$

とする。(C.2.3) により定義される  $\text{alt}$  は同型

$$X^2(G) / X_s^2(G) \cong H^2(G, U(1)) \cong X_a^2(G)$$

を誘導する。

**Prf.**

Lem. 4 より  $\xi \in Z^2(G, U(1))$  なら  $\text{alt}(\xi) \in X_a^2(G)$ 。また  $\xi \in B^2(G, U(1))$  なら  $\varphi \in C^1(G, U(1))$  が存在して  $\xi(g_1, g_2) = \varphi(g_1) \varphi(g_2) / \varphi(g_1 g_2)$  と書けるので

$$\text{alt}(\xi)(g_1, g_2) = \frac{\varphi(g_1) \varphi(g_2) / \varphi(g_1 g_2)}{\varphi(g_2) \varphi(g_1) / \varphi(g_2 g_1)} = 1.$$

よって  $\text{alt}$  は  $H^2(G, U(1))$  から  $X_a^2(G)$  への写像を誘導する。逆に  $\xi \in Z^2(G, U(1))$  が  $\text{alt}(\xi) = 1$  を満たすならば、 $G$  の  $\xi$  による中心拡大は可換群になる。



## 付録 D

# 量子情報理論

本章では、本文で使った量子情報理論の知識を記載する。

### D.1 純粋状態・混合状態

Hilbert 空間  $\mathcal{H}$  の量子状態に対する以下の操作は  $\mathcal{H}$  の中で閉じない。

- 部分系の取り出し
- 古典的確率混合

純粋状態の部分トレースは一般に混合状態である。

### D.2 状態の純粋化

上で純粋状態と混合状態を定義したが、混合状態は線形演算子であるのに対し純粋状態は Hilbert 空間のベクトルなので扱いが容易である。上述のように純粋状態の部分トレースは混合状態になるので、混合状態をある純粋状態の部分トレースとして表せることが期待される。

### D.3 エンタングルメント

エンタングルメント (量子もつれ) は古典対応物のない量子力学的な相関であり、量子情報理論において重要な役割を果たす。

#### Def. 13: エンタングルメントエントロピー

量子状態  $\rho_{AB}$  の部分系  $A$  に対するエンタングルメントエントロピー  $S_A$  を

$$S_A := -\text{Tr}_A(\rho_A \log \rho_A)$$

と定義する。

エンタングルメントエントロピーは部分系の片方をトレースアウトするが、数学的には以下の量を定義できる。

**Def. 14: von Neumann エントロピー**

量子状態  $\rho$  の von Neumann エントロピーを

$$S(\rho) := -\text{Tr}(\rho \log \rho)$$

と定義する。

**Thm. 9: エンタングルメントエントロピーは凹関数**

$\{p_i\}$  を  $(\sum_i p_i = 1)$  なる確率分布、 $\{\rho_i\}$  を量子状態の密度演算子の集合とするとき、

$$S\left(\sum_i p_i \rho_i\right) \geq \sum_i p_i S(\rho_i)$$

が成り立つ。

**Prf.**

$\{\rho_i\}$  で表される量子系を  $A$ , 新たに正規直交基底  $\{|i\rangle\}$  から構成される量子系を  $B$  として

$$\rho_{AB} := \sum_i p_i \rho_i \otimes |i\rangle \langle i|$$

を定義すると見通しが良い。 $\rho_i$  の固有値と固有ベクトルをそれぞれ  $\lambda_i, |i\rangle$  として結合エントロピーを計算すると、

$$\begin{aligned} S_A &= -\text{Tr} \left[ \left( \sum_i p_i \rho_i \otimes |i\rangle \langle i| \right) \ln \left( \sum_j p_j \rho_j \otimes |j\rangle \langle j| \right) \right] \\ &= -\sum_{klmn} \langle k|_A \langle l|_B \left( \sum_i p_i \rho_i \otimes |i\rangle \langle i| \right) |m\rangle_A |n\rangle_B \\ &\quad \times \langle m|_A \langle n|_B \ln \left( \sum_j p_j \rho_j \otimes |j\rangle \langle j| \right) |k\rangle_A |l\rangle_B \\ &= -\sum_{kmn} \langle k|_A p_n \rho_n |m\rangle_A \langle m|_A \ln(p_n \rho_n) |k\rangle_A \\ &= -\sum_k p_k \lambda_k \ln(p_k \lambda_k) = -\sum_k p_k \lambda_k \ln \lambda_k - \sum_k \lambda_k p_k \ln p_k \\ &= \sum_k p_k S(\rho_k) - \sum_k \lambda_k p_k \ln p_k \end{aligned}$$

**D.4 忠実度**

二つの量子状態がどれだけ同じかを測る指標として忠実度 (fidelity) がある。

純粋状態  $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$  の同一性は状態ベクトルの Hilbert 空間における内積で表せば良い。ただし状態ベクトルは  $U(1)$  位相自由度をもつため、絶対値で評価するのが適切であろう。

$$\mathcal{F}(|\psi\rangle, |\phi\rangle) := |\langle \psi | \phi \rangle| = \sqrt{\langle \psi | \phi \rangle \langle \phi | \psi \rangle}.$$

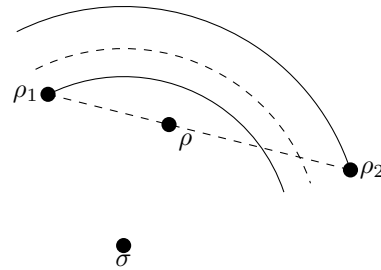


図 D.1: 状態空間における状態  $\rho_1, \rho_2$  の混合  $\rho$  と比較対称  $\sigma$  の位置関係。状態の混合は状態空間における内分点をとる操作と解釈できる。 $\rho_1, \rho_2$  までの距離を  $p : (1 - p)$  に内分した長さ  $\sigma$  からの距離が一致するのは破線の内側だが、内分点  $\rho$  は必ずこの円の内部に位置する。

状態ベクトルをそれぞれ規格化していれば  $0 \leq \mathcal{F}(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \leq 1$  であり、 $\mathcal{F}(|\psi\rangle, |\phi\rangle) = 1$  のとき  $|\psi\rangle$  と  $|\phi\rangle$  は同一の状態を表す。

混合状態の場合、一度純粋化してから上の定義を用いることで忠実度を定義できる。

#### Def. 15: 忠実度

量子状態の密度演算子  $\rho, \sigma$  に対し、忠実度  $\mathcal{F}(\rho, \sigma)$  を

$$\mathcal{F}(\rho, \sigma) := \text{Tr} \sqrt{\rho^{1/2} \sigma \rho^{1/2}} = \|\rho^{1/2} \sigma^{1/2}\|_{\text{tr}}$$

と定義する。

忠実度は状態の内積が根本概念であるから、状態空間の中での距離の近さと解釈できる。二つの状態の混合は状態空間の内分点をとると解釈すれば、Fig. D.1 の位置関係に対応する不等式が成り立つ。

#### Cor. 7: 忠実度の凸性

$\{p_i\}$  を確率分布、 $\{\rho_i\}, \{\sigma_i\}$  を量子状態の密度演算子の集合とすると、

$$\mathcal{F}\left(\sum_i p_i \rho_i, \sigma\right) \geq \sum_i p_i \mathcal{F}(\rho_i, \sigma)$$

が成り立つ。

#### Prf.

(トレースノルムの凸性から示せそう)



## 付録 E

# 本文で省略した証明

本文のいくつかの命題、特に数学的命題は、内容が技術的であることと議論の流れを妨げることを理由に証明を省略している。本章では保留した命題の証明を補完する。

### E.1 Thm. 1 (Lieb-Robinson 限界) の証明

記法は Sec. 1.1.1 に従う。

$H = H_U + H_{Y^c}$  の分割を

$$H_Y := \sum_{Z \cap Y \neq \emptyset} h_Z, \quad H_{Y^c} := \sum_{Z \cap Y = \emptyset} h_Z$$

で与える。 $[H_{Y^c}, B_Y] = 0$  であることに注意。 $f(t) := [A(t), B]$  とおくと、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f(t) &= \frac{d}{dt} (e^{iHt} A e^{-iHt} B_Y - B_Y e^{iHt} A e^{-iHt}) \\ &= [i[H, A(t)], B_Y] \\ &= i[H_{Y^c}, [A(t), B_Y]] + [i[H_Y, A(t)], B_Y] \\ &= i[H_{Y^c}, f(t)] + [i[H_Y, A(t)], B_Y] \end{aligned}$$

となる。定数変化法によりこれを解くと

$$f(t) = e^{iH_{Y^c} t} [A(0), B_Y] e^{-iH_{Y^c} t} + \int_0^t ds e^{iH_{Y^c}(t-s)} [i[H_Y, A(s)], B_Y] e^{-iH_{Y^c}(t-s)}$$

となる。NOT CHECKED YET!!! ノルムをとると

$$\begin{aligned} \|[A(t), B_Y]\| &\leq \|[A(0), B_Y]\| + \int_0^t ds \|[i[H_Y, A(s)], B_Y]\| \\ &\leq \|A_X, B_Y\| + 2\|B_Y\| \int_0^t ds \|[H_Y, A(s)]\| \\ &= \|A_X, B_Y\| + 2\|B_Y\| \sum_{Z \cap Y \neq \emptyset} \int_0^t ds \|[A(s), h_Z]\|. \end{aligned} \tag{E.1.1}$$

$C_A(Z, t) := \sup_{O_Z} \|[A(t), O_Z]\| / \|O_Z\|$  とおく。ここに、

$$\|[A(t), B_Y]\| \leq \|B_Y\| C_A(Y, t),$$

$$C_A(Z, 0) \leq 2\|A_X\| \delta(X, Z)$$

である。ただし  $\delta(X, Z)$  は  $X \cap Z \neq \emptyset$  のとき 1、そうでないとき 0 である。これにより (E.1.1) から

$$\sup_{B_Y} \|[A(t), B_Y]\| \leq \sup_{B_Y} \left( \|[A_X, B_Y]\| + 2\|B_Y\| \sum_{Z \cap Y \neq \emptyset} \int_0^t ds \|[A(s), h_Z]\| \right)$$

すなわち

$$C_A(Y, t) \leq C_A(Y, 0) + 2 \sum_{Z \cap Y \neq \emptyset} \int_0^t ds \|h_Z\| C_A(Z, s)$$

を得る。したがって

$$\begin{aligned} C_A(Y, t) &\leq 0 + 2 \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \int_0^t ds_1 C_A(Z_1, s_1) \\ &\leq 2 \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \int_0^t ds_1 \left( C_A(Z_1, 0) + 2 \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \int_0^{s_1} ds_2 C_A(Z_2, s_2) \right) \\ &\leq 2 \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \int_0^t ds_1 2\|A_X\| \delta(X, Z_1) \\ &\quad + 2^2 \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 C_A(Z_2, s_2) \\ &\leq 2\|A_X\| \cdot 2t \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset, X \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \\ &\quad + 2^2\|A_X\| \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 2\|A_X\| \delta(X, Z_2) \\ &\quad + 2^3 \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \sum_{Z_3 \cap Z_2 \neq \emptyset} \|h_{Z_3}\| \\ &\quad \times \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 \int_0^{s_2} ds_3 C_A(Z_3, s_3) \\ &\leq \dots \\ &\leq 2\|A_X\| \cdot 2t \sum_{\substack{Z_1 \cap Y \neq \emptyset \\ X \cap Z_1 \neq \emptyset}} \|h_{Z_1}\| + 2\|A_X\| \frac{(2t)^2}{2!} \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{\substack{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset \\ X \cap Z_2 \neq \emptyset}} \|h_{Z_2}\| \\ &\quad + 2\|A_X\| \frac{(2t)^3}{3!} \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \sum_{\substack{Z_3 \cap Z_2 \neq \emptyset \\ X \cap Z_3 \neq \emptyset}} \|h_{Z_3}\| + \dots \end{aligned}$$

すなわち、

$$C_A(Y, t) \leq 2\|A_X\| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2t)^n}{n!} \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \cdots \sum_{\substack{Z_n \cap Z_{n-1} \neq \emptyset \\ X \cap Z_n \neq \emptyset}} \|h_{Z_n}\|. \quad (\text{E.1.2})$$

各項に対応するような  $X, Y$  をつなぐ path がなければ、その項は 0 になる。(1.1.1) を

使って  $\|h_{Z_i}\|$  の総和部分を上から押さえると

$$\begin{aligned}
& \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \cdots \sum_{Z_{n-2} \cap Z_{n-1} \neq \emptyset} \|h_{Z_{n-1}}\| \sum_{\substack{Z_{n-1} \cap Z_n \neq \emptyset \\ X \cap Z_n \neq \emptyset}} \|h_{Z_n}\| \\
& \leq \sum_{p_1 \in Y} \sum_{Z_1 \ni p_1} \|h_{Z_1}\| \cdots \sum_{p_{n-1} \in Z_{n-2}} \sum_{Z_{n-1} \ni p_{n-1}} \|h_{Z_{n-1}}\| \\
& \quad \times \sum_{p_n \in Z_{n-1}} \sum_{Z_n \ni p_n, X \cap Z_n \neq \emptyset} \|h_{Z_n}\| \\
& \leq \sum_{p_1 \in Y} \sum_{Z_1 \ni p_1} \|h_{Z_1}\| \cdots \sum_{p_{n-1} \in Z_{n-2}} \sum_{Z_{n-1} \ni p_{n-1}} \|h_{Z_{n-1}}\| \sum_{p_n \in Z_{n-1}} se^{-\mu} \\
& \leq \sum_{p_1 \in Y} \sum_{Z_1 \ni p_1} \|h_{Z_1}\| \cdots \sum_{p_{n-1} \in Z_{n-2}} \sum_{Z_{n-1} \ni p_{n-1}} \|h_{Z_{n-1}}\| kse^{-\mu} \\
& \leq \sum_{p_1 \in Y} \sum_{Z_1 \ni p_1} \|h_{Z_1}\| \cdots \sum_{p_{n-2} \in Z_{n-3}} \sum_{Z_{n-2} \ni p_{n-2}} \|h_{Z_{n-2}}\| k^2 (se^{-\mu})^2 \\
& \leq \cdots \\
& \leq \begin{cases} \sum_{p_1 \in Y} (kse^{-\mu})^n & (\exists \text{ path of length } n \text{ connecting } Y \rightarrow X) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \\
& \leq |Y| (ks)^n e^{-\mu d(X,Y)}
\end{aligned}$$

と評価できるので、(E.1.2) は

$$\begin{aligned}
C_A(Y, t) & \leq 2\|A_X\| |Y| e^{-\mu d(X,Y)} \sum_{n=d(X,Y)}^{\infty} \frac{(2kst)^n}{n!} \\
& = 2\|A_X\| |Y| e^{-\mu d(X,Y)} (e^{2kst} - 1).
\end{aligned}$$

経路を逆から辿れば

$$C_A(Y, t) \leq 2\|A_X\| |X| e^{-\mu d(X,Y)} (e^{2kst} - 1)$$

も成り立つ。左辺は  $\|[A(t), B_Y]\|/\|B_Y\|$  の上界なので、定理が従う。

## E.2 Thm. 2 (1D SPT は相関関数が指数減衰) の証明

記法は Sec. 1.1.2 に従う。また (1.1.3) の導出までは Sec. 1.1.2 で済んでいる。

### E.2.1 $\hat{\Theta}$ の具体形

まずは  $\hat{\Theta}$  の具体形を与える。1/t の  $t=0$  周りでの複素周回積分が定数になること、および Fourier 変換が階段関数になる関数を求めたいを念頭に置くと、 $e^{-i\omega t}/t$  の実数全体にわたる積分を考察するのが良いだろう。極  $t=0$  を虚軸正側で回避するか負側で回避するかで積分値が変わる。Fig. E.1 の積分路をとって積分を実行すると、

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \text{P} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{-i\omega t}}{t} = -i \text{sgn}(\omega) \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

である。Fig. E.2 のように極自体を虚軸に沿って移動させても類似の結果が得られる。

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{-i\omega t}}{t - i\varepsilon} = -i\Theta(\omega) \sqrt{2\pi}.$$

図 E.1:  $e^{-i\omega t}/t$  の積分路。図 E.2:  $e^{-i\omega t}/(t - i\varepsilon)$  の積分路。

両者の結果を比較すると、

$$-i\Theta(\omega)\sqrt{2\pi} = -i\sqrt{\frac{\pi}{2}}(\text{sgn}(\omega) + 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \left( P \frac{1}{t} - i\pi\delta(t) \right)$$

を得る。よって  $\Theta$  の逆変換は

$$\hat{\Theta}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \delta(t) + P \frac{i}{\pi t} \right) \quad (\text{E.2.1})$$

である。[\[10\]](#) ではこの結果に  $\pi$  がかかっている。計算間違えたか?

### E.2.2 相関関数の不等式評価

本文 Sec. 1.1.2 の議論から、 $\langle \phi_0 | A_X | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | B_Y | \phi_0 \rangle = 0$  と仮定しても一般性を失わない。本文では、相関関数と等価な形を目指して  $\Theta(\omega)$  や Gaussian のフィルターをかけた結果 (1.1.5) が得られた。すなわち相関関数とこの値に近いことが望ましい。これを踏まえ、相関関数を

$$\begin{aligned} & \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle \\ &= \langle \phi_0 | [\tilde{A}_X, B_Y] | \phi_0 \rangle + \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle - \langle \phi_0 | [\tilde{A}_X, B_Y] | \phi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \\ & \quad - \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle - \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle \right) \end{aligned} \quad (\text{E.2.2})$$

と書き直す。最右辺の各項を評価する。



■(E.2.2) 第1項の評価 (E.2.1) を用いて

$$\begin{aligned} & \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \right| \\ &= \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left( \delta(-t) - \frac{i}{\pi t} \right) e^{-\alpha t^2} \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \right| \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left( \delta(-t) + \frac{1}{\pi t} \right) e^{-\alpha t^2} \| [A_X(t), B_Y] \| \end{aligned}$$

とする。以降、主値積分の記号は省略する。 $d = d(X, Y)$  と略し、定数  $c > 0$  をとる。

$$\begin{aligned} (\text{LHS}) &\leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{|t| \leq cd} dt \left( \delta(-t) + \frac{1}{\pi t} \right) e^{-\alpha t^2} \| [A_X(t), B_Y] \| \\ &\quad + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \|A\| \|B\| \int_{|t| \geq cd} dt \frac{e^{-\alpha t^2}}{\pi c d} \\ &\leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \|A\| \|B\| \min(|X|, |Y|) e^{-\mu d} \int_{|t| \leq cd} dt \left( \delta(t) + \frac{1}{\pi t} \right) (e^{2kst} - 1) \\ &\quad + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \|A\| \|B\| \frac{2e^{-\alpha c^2 d^2}}{\sqrt{\alpha c d}} \end{aligned}$$

となる。最後の不等式では、第1項に Lieb-Robinson 限界を、第2項の導出には

$$\int_a^\infty dt e^{-x^2/2} < \int_a^\infty dt \frac{x}{a} e^{-x^2/2} = \frac{e^{-a^2}}{a} \quad (\text{E.2.3})$$

を使っている。さらに  $e^x - 1 = \sum_{n=1}^\infty x^n/n! < \sum_{n=1}^\infty x^n/(n-1)! = x e^x$  から

$$\int_{-a}^a dx \frac{e^x - 1}{x} < \int_{-a}^a dx \frac{x e^x}{x} < e^a$$

が成り立つので、

$$((\text{E.2.2}) \text{ 1st term}) \leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \|A\| \|B\| \left[ \min(|X|, |Y|) e^{-\mu d} \frac{e^{2kscd}}{\pi} + \frac{2e^{-\alpha c^2 d^2}}{\sqrt{\alpha c d}} \right].$$

■(E.2.2) 第2項以降の評価 (E.2.2) 第2項以降では時間発展した演算子と時間発展していない演算子を比較しているので、時間発展の固有状態 (エネルギー固有状態) で展開するのが簡単だろう。 $\langle \phi_0 | A_X | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | B_Y | \phi_0 \rangle = 0$  に注意して、

$$\begin{aligned} & \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \\ &= \sum_n \left( \langle \phi_0 | e^{iHt} A_X e^{-iHt} | n \rangle \langle n | B_Y | \phi_0 \rangle - \langle \phi_0 | B_Y | n \rangle \langle n | e^{iHt} A_X e^{-iHt} | \phi_0 \rangle \right) \\ &= \sum_{n \neq 0} \left( \langle 0 | A_X | n \rangle \langle n | B_Y | 0 \rangle e^{-i(E_n - E_0)t} - \langle 0 | B_Y | n \rangle \langle n | A_X | 0 \rangle e^{i(E_n - E_0)t} \right) \end{aligned}$$

となるので、

$$\begin{aligned} & ((\text{E.2.2}) \text{ 2nd term}) \\ &= \sum_{n \neq 0} \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} e^{-i(E_n - E_0)t} \langle 0 | A_X | n \rangle \langle n | B_Y | 0 \rangle \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} e^{i(E_n - E_0)t} \langle 0 | B_Y | n \rangle \langle n | A_X | 0 \rangle \right) \end{aligned}$$

と変形できる。 $t$  積分を実行すれば (E.2.2) 第 3 項との比較が可能になるだろう。時間積分が  $\hat{\Theta}$  と Gaussian  $G_\alpha(t) := e^{-\alpha t^2}$  の Fourier 変換になっていることを踏まえ、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) G_\alpha(-t) e^{-iEt} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (\Theta * \hat{G}_\alpha)(-E) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \Theta(-E - \omega) \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} e^{-\omega^2/4\alpha} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \Theta(\omega - E) \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} e^{-\omega^2/4\alpha} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\alpha\pi}} \int_{-\infty}^E d\omega e^{-\omega^2/4\alpha} \\ &= \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\alpha\pi}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} - \int_E^{\infty} \right) d\omega e^{-\omega^2/4\alpha} & (E \geq 0) \\ \frac{1}{2\sqrt{\alpha\pi}} \int_{-\infty}^E d\omega e^{-\omega^2/4\alpha} & (E \leq 0) \end{cases} \end{aligned}$$

と評価できる。(E.2.3) を使うと

$$\text{LHS} \leq \begin{cases} 1 + \mathcal{O}(e^{-E^2/4\alpha}) & (E \geq 0) \\ \mathcal{O}(e^{-E^2/4\alpha}) & (E \leq 0) \end{cases}$$

を得る。 $E_n - E_0 \geq \Delta$  ( $n \neq 1$ ) を踏まえると

$$\begin{aligned} ((\text{E.2.2}) \text{ 2nd term}) &= \sum_{n \neq 0} \left[ \langle 0 | A_X | n \rangle \langle n | B_Y | 0 \rangle \left( 1 + \mathcal{O}(e^{-\Delta^2/4\alpha}) \right) \right. \\ &\quad \left. - \langle 0 | B_Y | n \rangle \langle n | A_X | 0 \rangle \mathcal{O}(e^{-\Delta^2/4\alpha}) \right] \\ &= \langle \phi_0 | A_X (1 - |\phi_0\rangle\langle\phi_0|) B_Y | \phi_0 \rangle + \mathcal{O}(\|A\| \|B\| e^{-\Delta^2/4\alpha}) \\ &= \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle + \mathcal{O}(\|A\| \|B\| e^{-\Delta^2/4\alpha}) \end{aligned}$$

となる。

■定数の決定 以上の結果を全て統合すると、

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle &\leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \|A\| \|B\| \left[ \min(|X|, |Y|) e^{-\mu d} \frac{e^{2kscd}}{\pi} + \frac{2e^{-\alpha c^2 d^2}}{\sqrt{\alpha cd}} \right] \\ &\quad + \mathcal{O}(\|A\| \|B\| e^{-\Delta^2/4\alpha}) \end{aligned}$$

である。相加相乗平均の不等式を繰り返し用いると

$$e^{-x} + e^{-1/x} \geq 2e^{-(x+1/x)/2} \geq 2e^{-1}$$

であり、等号成立は  $x = 1$  のときに限る。これを踏まえ  $\alpha = \Delta/(2cd)$  とおくと、概ね最適な評価が得られる。このとき、

$$\langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle \leq \mathcal{O} \left( \|A\| \|B\| \left[ \min(|X|, |Y|) e^{(2ksc-\mu)d} + \left( 1 + \frac{1}{\sqrt{\Delta cd/2}} \right) e^{-\Delta cd/2} \right] \right)$$

だが、大まかに  $\min(|X|, |Y|) \geq 1 + 1/\sqrt{\Delta cd/2}$  を期待して

$$\langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle \leq \mathcal{O} \left( \|A\| \|B\| \min(|X|, |Y|) \exp \left[ - \left( \mu - \left( 2ks - \frac{\Delta}{2} \right) c \right) d \right] \right).$$

$c > 0$  と  $\mu - (2ks - \Delta/2)c > 0$  が任意のパラメーターで成立するように  $c$  を選ぶと、

$$c = \frac{\mu}{\Delta/2 + 2ks}$$

とすることで、

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle &\leq \mathcal{O}\left(\|A\| \|B\| \min(|X|, |Y|) e^{-d(\mu + c(\Delta/2 - 2ks))}\right) \\ &= \mathcal{O}\left(\|A\| \|B\| \min(|X|, |Y|) e^{-\tilde{\mu}d}\right) \end{aligned}$$

$$\tilde{\mu} = \frac{\mu}{1 + 4ks/\Delta}$$

を得る。

### E.3 整数論に関する命題の証明

**Prop. 5: 整数値関数は二項係数の線型結合で一意に表せること**

任意の  $r$  次までの有理数値関数の集合を  $V_r := \{P : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Q} \mid \deg P \leq r\}$ 、整数値関数への制限を  $V_r^{\mathbb{Z}} := \{P : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z} \mid \deg P \leq r\}$  とする。整数値関数  $P \in V_r^{\mathbb{Z}}$  は  $\{n_m \in \mathbb{Z}\}_{m=0}^r$  を用いて

$$P(x) = \sum_{m=0}^r n_m \binom{x+m-1}{m}$$

という形で一意に表される。ただし  $\binom{x+m-1}{m} = x(x+1)\cdots(x+m-1)/m!$  は二項係数である。

*Proof.*

■  $\binom{x+m-1}{m}$  が  $V_r^{\mathbb{Z}}$  の独立な基底であること 任意の  $f \in V_r$  に対して

$$\Delta f(x) = f(x+1) - f(x), \quad \Delta^0 f(x) = f(x), \quad \Delta^{k+1} f(x) = \Delta(\Delta^k f(x))$$

を定め、

$$B_k(x) = \binom{x+k-1}{k} = \frac{x(x+1)\cdots(x+k-1)}{k!}$$

とする。このとき、

$$\Delta B_k(x) = \frac{1}{k!}((x+k) - x)(x+1)(x+2)\cdots(x+k-1) = \binom{x+k-1}{k-1}$$

なので

$$\Delta^m B_k(x) = \begin{cases} \binom{x+k-1}{k-m} & (k \geq m), \\ 0 & (k < m). \end{cases}$$

$x = 0$  にて評価すると、 $m \geq 1$  では

$$(\Delta^m B_k)(0) = \begin{cases} \binom{k-1}{k-m} = \binom{k-1}{m-1} & (k \geq m), \\ 0 & (k < m) \end{cases}$$

および  $m = 0$  にて  $(\Delta^0 B_k)(0) = \delta_{k,0}$  を得る。  $(r+1) \times (r+1)$  行列

$$M = [(\Delta^m B_k)(0)]_{m,k=0}^r = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \binom{0}{0} & \binom{1}{0} & \cdots & \binom{r-1}{0} \\ 0 & 0 & \binom{1}{1} & \cdots & \binom{r-1}{1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \binom{r-1}{r-1} \end{pmatrix}$$

は上三角行列であり、対角成分はすべて 1 であるから  $\det M = 1$  で、 $\mathbb{Q}$  上では  $M^{-1}$  を持つ。  $T: V_r \rightarrow \mathbb{Q}^{r+1}$  を  $T[P] := ((\Delta^m P)(0))_{m=0}^r$  で与えると、

$$(T[B_k])_{k=0}^r = ((\Delta^m B_k)(0))_{m,k=0}^r = M$$

なので  $T$  は次元を変えず、 $B_k$  は  $V_r$  の独立な基底を張る。

■ **整数値関数の一意的な分解** 上記の事実から任意の  $P \in V_r$  は

$$P(x) =: \sum_{k=0}^r n_k B_k(x), \quad n_k \in \mathbb{Q} \quad (\text{E.3.1})$$

と一意に分解できる。特に  $P \in V_r^{\mathbb{Z}}$  のとき、 $P(\mathbb{Z}) \subset \mathbb{Z}$  であり、(E.3.1) を具体的に計算することで

$$n_0 = P(0), \quad n_k = (\Delta^k P)(0) = \sum_{m=k}^r n_m \binom{m-1}{k-1} \quad (k \geq 1)$$

とわかるので、

$$\begin{pmatrix} (\Delta^0 P)(0) \\ (\Delta^1 P)(0) \\ (\Delta^2 P)(0) \\ \vdots \\ (\Delta^r P)(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \binom{0}{0} & \binom{1}{0} & \cdots & \binom{r-1}{0} \\ 0 & 0 & \binom{1}{1} & \cdots & \binom{r-1}{1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \binom{r-1}{r-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_0 \\ n_1 \\ n_2 \\ \vdots \\ n_r \end{pmatrix}.$$

行列は正則なので、この方程式を解くことで係数が具体的に求まる。

■  $n_k$  が整数であること 仮定より  $n_r = (\Delta^r P)(0) \in \mathbb{Z}$  である。 $k$  についての帰納法により、

$$n_k = b_k - \sum_{m=k+1}^r n_m \binom{m-1}{k-1} \in \mathbb{Z}$$

なので全ての  $k$  に対し  $n_k \in \mathbb{Z}$  である。 □

## E.4 (4.2.3) の転送行列を用いた議論による証明

証明するのは以下の命題である。方針は [5, 20] に従う。

### Prop. 6: (4.2.3)

ランク  $r$  の多極子対称性を持つ系のバルクにおいて、任意の  $k \leq r$  に対し、ランク  $k$  の多極子対称性の作用により (4.2.3) を満たすゲージが存在する。

帰納法により証明する。 $r = 1$  のときは本文で示した通り。 $k$  で成り立つと仮定し、 $k + 1$  で成り立つことを示す。

$A$  をランク  $r$  の多極子対称性を有する SPT 基底状態を構成する左標準形の injective MPS テンソルとする。すなわち、転送行列  $T(\mathcal{O}) = \sum_h A^{h\dagger} \mathcal{O} A^h$  の左固有ベクトルが単位行列、右固有ベクトルがフルランク行列  $\rho$  である。

$$\begin{array}{c} \boxed{A} \\ | \\ \boxed{A} \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{c} \boxed{A} \\ | \\ \boxed{A} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{\rho} \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \boxed{\rho} \\ \hline \end{array}. \quad (\text{E.4.1})$$

$U_g^{(k+1)} |\psi\rangle$  は (4.2.3) を繋げたものだが、SPT 相の定義から  $|\psi\rangle$  はただ一つの基底状態なので、 $\langle\psi|U_g^{(k+1)}|\psi\rangle$  は  $U(1)$  位相因子である。この値は転送行列  $T_k(\mathcal{O}) := \sum_h A^{h\dagger} \mathcal{O} X_g^{(k)\dagger} A^h$  を繋げることで評価できる。転送行列  $T_k$  が左固有値として  $|\lambda| \neq 1$  を持てば、 $\langle\psi|U_g^{(k+1)}|\psi\rangle$  は熱力学極限  $L \rightarrow \infty$  で発散するか 0 となって不合理。よって  $T_k$  は  $U(1)$  固有値の左固有ベクトル  $X_g^{(k+1)\dagger}$  がある。

$$\begin{array}{c} \boxed{X_g^{(k+1)}} \\ | \\ \boxed{X_g^{(k)\dagger}} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{A} \\ | \\ \boxed{A} \end{array} = \boxed{X_g^{(k+1)}}. \quad (\text{E.4.2})$$

本文同様、 $\doteq$  は  $U(1)$  位相因子を除いて両辺が一致することを表す。

続いて以下の量を評価する。

$$\begin{array}{c} \boxed{\rho} \\ | \\ \boxed{X^{(k+1)}} \quad \boxed{X^{(k+1)\dagger}} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{A} \\ | \\ \boxed{X^{(k+1)}} \quad \boxed{X^{(k)\dagger}} \quad \boxed{A} \quad \boxed{X^{(k+1)\dagger}} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{\rho} \end{array} \\ = \begin{array}{c} \boxed{X^{(k+1)}} \quad \boxed{A} \\ | \\ \boxed{X^{(k)\dagger}} \quad \boxed{A} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{\sqrt{\rho}} \\ | \\ \boxed{\sqrt{\rho}} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{X^{(k+1)\dagger}} \end{array}. \quad (\text{E.4.3})$$

(E.4.1) により、この右辺の上半分と下半分はノルムが等しいことがわかる。

$$\begin{array}{c} \boxed{X^{(k+1)}} \quad \boxed{A} \\ | \\ \boxed{X^{(k+1)\dagger}} \quad \boxed{A} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{\sqrt{\rho}} \\ | \\ \boxed{\sqrt{\rho}} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{X^{(k+1)}} \quad \boxed{\sqrt{\rho}} \\ | \\ \boxed{X^{(k+1)\dagger}} \quad \boxed{\sqrt{\rho}} \end{array} \\ = \begin{array}{c} \boxed{X^{(k)}} \quad \boxed{A} \quad \boxed{X^{(k+1)}} \\ | \\ \boxed{X^{(k)\dagger}} \quad \boxed{A} \quad \boxed{X^{(k+1)\dagger}} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{\sqrt{\rho}} \\ | \\ \boxed{\sqrt{\rho}} \end{array}.$$

最後の等号で  $X_g^{(k)}$  のユニタリ性を利用した。(E.4.3) と比較すると、

$$\left| \begin{array}{c} \begin{array}{c} X^{(k+1)} \quad A \\ \hline X^{(k)\dagger} \quad A \end{array} \quad \begin{array}{c} \sqrt{\rho} \\ \sqrt{\rho} \end{array} \\ \begin{array}{c} X^{(k+1)} \quad A \\ \hline X^{(k+1)\dagger} \quad A \end{array} \quad \begin{array}{c} \sqrt{\rho} \\ \sqrt{\rho} \end{array} \end{array} \right|^2 = \begin{array}{c} \begin{array}{c} X^{(k+1)} \quad A \\ \hline X^{(k+1)\dagger} \quad A \end{array} \quad \begin{array}{c} \sqrt{\rho} \\ \sqrt{\rho} \end{array} \\ \begin{array}{c} X^{(k+1)} \quad A \\ \hline X^{(k+1)\dagger} \quad A \end{array} \quad \begin{array}{c} \sqrt{\rho} \\ \sqrt{\rho} \end{array} \end{array},$$

を得る。これは Cauchy-Schwarz の不等式であり、左辺の上半分と下半分は同じノルムを有しているので互いに比例する。よって、

$$\begin{array}{c} | \\ \hline X^{(k+1)\dagger} \quad A \quad \sqrt{\rho} \end{array} = \begin{array}{c} | \\ \hline X^{(k)\dagger} \quad A \quad X^{(k+1)\dagger} \quad \sqrt{\rho} \end{array}$$

となり、 $X_g^{(k+1)}$  がユニタリなら (4.2.3) と等価。

(4.2.3) と (E.4.2) により

$$\begin{array}{c} \begin{array}{c} X^{(k+1)} \quad A \\ \hline X^{(k+1)\dagger} \quad A \end{array} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} X^{(k+1)} \quad A \\ \hline X^{(k)\dagger} \quad A \quad X^{(k+1)\dagger} \end{array} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} X^{(k+1)} \\ \hline X^{(k+1)\dagger} \end{array} \end{array}.$$

が成り立つ。injective MPS テンソルから構成される転送行列の  $U(1)$  固有値は常に 1 で、対応する固有ベクトルは常に単位行列であるから、 $X_g^{(k+1)}$  はユニタリ演算子である。

Prop. 2 を証明する。

## E.5 Prop. 2 の証明

■証明で使う記法 証明に先立って記法を整理する。この証明では任意の  $g, h \in G$  を固定するため、 $\theta_{g,h}(k, l)$  を  $\theta(k, l)$  と略記する。また

$$S_L(k, l) := \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l \theta(m, n) B_L(k-m) B_L(l-n), \quad B_L(t) := \binom{L+t-1}{t},$$

$$C_L(k, l) := S_L(k, l) - \theta(k, l),$$

を導入することで (4.2.6) は

$$\exp[iC_L(k, l)] = 1.$$

と書き直せる。与えられた関数  $f: \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  に対して差分作用素  $\Delta$  を

$$\Delta f(k, l) := f(k, l) - f(k-1, l) - f(k, l-1) + f(k-1, l-1)$$

とする。さらに Pascal の恒等式

$$\binom{L+t-1}{t} = \binom{L+t-2}{t-1} + \binom{L+t-2}{t},$$

を書き換えることで

$$B_L(t) = B_L(t-1) + B_{L-1}(t) \quad (\text{E.5.1})$$

とできる。これにより  $\Delta S_L(k, l)$  は次のように簡略化できる。

$$\Delta S_L(k, l) = S_{L-1}(k, l). \quad (\text{E.5.2})$$

実際、

$$\begin{aligned} \Delta S_L(k, l) &= \sum_{m=0}^{k-1} \sum_{n=0}^{l-1} \theta(m, n) (B_L(k-m)B_L(l-n) - B_L(k-1-m)B_L(l-n) \\ &\quad - B_L(k-m)B_L(l-1-n) + B_L(k-1-m)B_L(l-1-n)) \\ &\quad + \left( \sum_{m=0}^{k-1} B_L(k-m)\delta_{n,l} + \sum_{n=0}^{l-1} \delta_{m,k}B_L(l-n) + \delta_{k,m}\delta_{l,n} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{m=0}^{k-1} B_L(k-1-m)\delta_{n,l} - \sum_{n=0}^{l-1} \delta_{m,k}B_L(l-1-n) \right) \theta(m, n) \\ &= \sum_{m=0}^{k-1} \sum_{n=0}^{l-1} \theta(m, n) (B_L(k-m) - B_L(k-1-m))(B_L(l-n) - B_L(l-1-n)) \\ &\quad + \sum_{m=0}^{k-1} \theta(m, l) (B_L(k-m) - B_L(k-1-m)) \\ &\quad + \sum_{n=0}^{l-1} \theta(k, n) (B_L(l-n) - B_L(l-1-n)) + \theta(k, l) \\ &= \sum_{m=0}^{k-1} \sum_{n=0}^{l-1} \theta(m, n) B_{L-1}(k-m)B_{L-1}(l-n) + \sum_{m=0}^{k-1} \theta(m, l) B_{L-1}(k-m) \\ &\quad + \sum_{n=0}^{l-1} \theta(k, n) B_{L-1}(l-n) + \theta(k, l), \end{aligned}$$

によって確かめられる。最後の行では (E.5.1) を用いた。

■**十分性** はじめに十分性を示す。

(4.2.6) が任意の  $L, g, h$  で成り立つとき、 $C_L(k, l) = 0$  と書き換えられるので、

$$\begin{aligned} 0 &= \Delta C_L(k, l) = \Delta S_L(k, l) - \Delta \theta(k, l) \\ &= S_{L-1}(k, l) - \Delta \theta(k, l) \\ &= \theta(k-1, l) - \theta(k, l-1) + \theta(k-1, l-1). \end{aligned}$$

2 行目では (E.5.2) を、3 行目では  $C_{L-1} = S_{L-1} - \theta = 0$  を用いた。これは (4.2.7) と同値である。

(4.2.8)  $(\theta(k, l) = 0 \text{ for } k+l < r)$  の証明を帰納法で行う。 $C_L(0, 1) = \theta(0, 0)L = 0$  より  $\theta(0, 0) = 0$  が保証される。これは  $k+l = 0$  の場合に対応する。 $s < r$  を固定し、

$k + l < s$  に対して  $\theta(k, l) = 0$  となることを仮定する。 $\theta(k, l) = \theta(k + 1, l) + \theta(k, l + 1)$  が証明されているので、 $\theta(0, s)$  を決めると  $k + l = s$  となる他の  $\theta(k, l)$  が決定する。

$$\theta(0, s) = -\theta(1, s - 1) = \theta(2, s - 2) = \cdots = (-1)^s \theta(s, 0)$$

一方で、

$$0 = C_L(0, s + 1) = \sum_{n=0}^s \theta(0, n) B_L(s + 1 - n) = L\theta(0, s)$$

となるので、任意の  $k + l = s$  にて  $\theta(k, l) = 0$ 。

■**必要性** 続いて (4.2.7) ( $\theta(k, l) = \theta(k + 1, l) + \theta(k, l + 1)$  for  $k, l < r$ ) および (4.2.8) ( $\theta(k, l) = 0$  for  $k + l < r$ ) を仮定する。前者は

$$\Delta\theta(k, l) = \theta(k, l), \quad \forall k, l < r + 1 \quad (\text{E.5.3})$$

と書き換えられる。(E.5.2) と (E.5.3) によって

$$\Delta C_L(k, l) = \Delta S_L(k, l) - \Delta\theta(k, l) = S_{L-1}(k, l) - \theta(k, l).$$

よって

$$\Delta C_L(k, l) = C_{L-1}(k, l)$$

である。

$L = 1$  を考えるのは物理的ではないが、 $C_1$  は数学的に well-defined なので、これを評価する。

$$C_1(k, l) = \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l \theta(m, n) B_1(k - m) B_1(l - n) - \theta(k, l) = \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l \theta(m, n) - \theta(k, l)$$

$k + l \leq r$  のとき、仮定から右辺は 0 となる。一方  $k + l > r$  のとき、

$$\begin{aligned} \Delta C_1(k, l) &= \left( \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l - \sum_{m=0}^{k-1} \sum_{n=0}^l - \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^{l-1} + \sum_{m=0}^{k-1} \sum_{n=0}^{l-1} \right) \theta(m, n) - \Delta\theta(k, l) \\ &= \theta(k, l) - \theta(k, l) = 0. \end{aligned}$$

よって任意の  $k, l \geq 0$  にて  $C_1(k, l) = 0$  である。

$L$  の帰納法により  $C_L(k, l) = 0$  を示す。任意の  $k, l \geq 0$  で  $C_{L-1}(k, l) = 0$  となることを仮定する。(??) により

$$C_L(k, l) = C_L(k - 1, l) + C_L(k, l - 1) - C_L(k - 1, l - 1)$$

すなわち任意の  $m + n < k + l$  で  $C_L(m, n) = 0$  なら  $C_L(k, l) = 0$  である。 $m + n \leq r$  をとると、

$$C_L(m, n) = \sum_{m'=0}^m \sum_{n'=0}^n \theta(m', n') B_L(m - m') B_L(n - n') - \theta(m, n) = 0$$

第 2 の等号では残っている  $\theta(m', n')$  が仮定により 0 であることを用いた。よって  $k + l$  の帰納法により、任意の  $k, l \geq 0$  にて  $C_L(k, l) = 0$  である。これは (4.2.6) と同値である。



## 参考文献

- [1] Ian Affleck, Tom Kennedy, Elliott H. Lieb, and Hal Tasaki. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 59, pp. 799–802, Aug 1987.
- [2] Ian Affleck, Tom Kennedy, Elliott H. Lieb, and Hal Tasaki. Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets. *Communications in Mathematical Physics*, Vol. 115, pp. 477–528, 9 1988.
- [3] Itai Arad, Alexei Kitaev, Zeph Landau, and Umesh Vazirani. An area law and sub-exponential algorithm for 1d systems, 2013.
- [4] Fernando G. S. L. Brandão and Michał Horodecki. An area law for entanglement from exponential decay of correlations. *Nature Physics*, Vol. 9, No. 11, p. 721–726, September 2013.
- [5] Jacob C Bridgeman and Christopher T Chubb. Hand-waving and interpretive dance: an introductory course on tensor networks. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, Vol. 50, No. 22, p. 223001, May 2017.
- [6] Hans J. Briegel. *Cluster States*, pp. 96–105. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2009.
- [7] Hans J. Briegel and Robert Raussendorf. Persistent entanglement in arrays of interacting particles. *Physical Review Letters*, Vol. 86, No. 5, p. 910–913, January 2001.
- [8] Xie Chen, Yuan-Ming Lu, and Ashvin Vishwanath. Symmetry-protected topological phases from decorated domain walls. *Nature Communications*, Vol. 5, No. 1, p. 3507, March 2014.
- [9] J. Ignacio Cirac, David Pérez-García, Norbert Schuch, and Frank Verstraete. Matrix product states and projected entangled pair states: Concepts, symmetries, theorems. *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 93, p. 045003, Dec 2021.
- [10] Toby S. Cubitt. Advanced quantum information theory course. lecture notes for “Advanced Quantum Information Theory course”, for UCL quantum CDT, Jul 2018.
- [11] M. Fannes, B. Nachtergaele, and R. F. Werner. Finitely correlated states on quantum spin chains. *Communications in Mathematical Physics*, Vol. 144, pp. 443–490, May 1992.
- [12] José Garre-Rubio, Laurens Lootens, and András Molnár. Classifying phases protected by matrix product operator symmetries using matrix product states.

- Quantum*, Vol. 7, p. 927, February 2023.
- [13] Karen A. Hallberg. New trends in density matrix renormalization. *Advances in Physics*, Vol. 55, No. 5–6, p. 477–526, July 2006.
  - [14] Jung Hoon Han, Ethan Lake, Ho Tat Lam, Ruben Verresen, and Yizhi You. Topological quantum chains protected by dipolar and other modulated symmetries. *Phys. Rev. B*, Vol. 109, p. 125121, Mar 2024.
  - [15] M. B. Hastings. Lieb-schultz-mattis in higher dimensions. *Phys. Rev. B*, Vol. 69, p. 104431, Mar 2004.
  - [16] M B Hastings. An area law for one-dimensional quantum systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, Vol. 2007, No. 08, p. P08024–P08024, August 2007.
  - [17] Matthew B. Hastings and Tohru Koma. Spectral gap and exponential decay of correlations. *Communications in Mathematical Physics*, Vol. 265, No. 3, p. 781–804, April 2006.
  - [18] Tom Kennedy, Elliott H. Lieb, and Hal Tasaki. A two-dimensional isotropic quantum antiferromagnet with unique disordered ground state. *Journal of Statistical Physics*, Vol. 53, pp. 383–415, 10 1988.
  - [19] Stefan Knabe. Energy gaps and elementary excitations for certain vbs-quantum antiferromagnets. *Journal of Statistical Physics*, Vol. 52, pp. 627–638, 08 1988.
  - [20] Ho Tat Lam. Classification of dipolar symmetry-protected topological phases: Matrix product states, stabilizer hamiltonians, and finite tensor gauge theories. *Phys. Rev. B*, Vol. 109, p. 115142, Mar 2024.
  - [21] Elliott H. Lieb and Derek W. Robinson. The finite group velocity of quantum spin systems. *Communications in Mathematical Physics*, Vol. 28, pp. 251–257, Sep 1972.
  - [22] Takuma Saito, Weiguang Cao, Bo Han, and Hiromi Ebisu. Matrix product state classification of 1d multipole symmetry protected topological phases, 2025.
  - [23] U. Schollwöck. The density-matrix renormalization group. *Reviews of Modern Physics*, Vol. 77, No. 1, p. 259–315, April 2005.
  - [24] Ulrich Schollwöck. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, Vol. 326, No. 1, pp. 96–192, Jan 2011. January 2011 Special Issue.
  - [25] D. Tambara. Representation of tensor categories with fusion rules of self-duality for abelian groups. *Israel Journal of Mathematics*, Vol. 118, No. 1, pp. 29–60, 12 2000.
  - [26] Hal Tasaki. *Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems*. Springer Cham, May 2020.
  - [27] Steven R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 69, pp. 2863–2866, Nov 1992.
  - [28] Han Yan. private communication.
  - [29] 塩崎謙. ノート：行列積状態, 2024.
  - [30] 犬井鉄郎, 田辺行人, 小野寺嘉孝. 応用群論 (増補版) -群表現と物理学-. 裳華房, 1980.

- 
- [31] 西野友年. テンソルネットワークの基礎と応用. サイエンス社, Jun 2021.
  - [32] 西野友年. テンソルネットワーク入門. 講談社, Apr 2023.
  - [33] 高橋和孝, 西森秀稔. 相転移・臨界現象と繰り込み群. 丸善出版株式会社, Apr 2017.

# 索引

- ( $\xi, l_0$ )-指数減衰, 11
- ☒
  - for group representation, 58
  - for vector space, 57
- $\downarrow$ ,  $\rightarrow$  制限 (表現)
- $\sim$ 
  - as linear representation,  $\rightarrow$  同値 (線形表現)
- $\uparrow$ ,  $\rightarrow$  誘導表現
- basis
  - of representation, 55
- bicharacter, 63
- box tensor product,  $\rightarrow$  external tensor product
- canonical form, 22
- character
  - of group representation, 56
- $\text{Cor}(X : Y)$ , 11
- density matrix renormalization group,  $\rightarrow$  DRG26
- direct sum
  - representation, 59
- DMRG, 26
- external tensor product, 58
- fidelity, 66
- Frobenius ノルム, 13, 49
- GHZ 状態, 19
- Hilbert-Schmidt 内積, 50
- irreducible representation, 59
- Jordan-Wigner 変換, 28
- $k$ -local Hamiltonian, 6
- linear representation,  $\rightarrow$  representation
- $L_p$  ノルム, 48
- matrix product state,  $\rightarrow$  MS22
- MPS,  $\rightarrow$  行列積状態, 22
- multiplier, 62
- multipole symmetry, 39, 40
- projective representation, 62
- reducible
  - representation, 59
- regular
  - representation, 60
- representation
  - of group, 55
- Schmidt ランク, 18
- Schur の補題 I, 59
- Schur の補題 II, 60
- SVD,  $\rightarrow$  特異値分解
- tensor product
  - representation, 58
- unitary
  - representation, 56
- $W$  状態, 19
- 演算子ノルム, 50
- 階数分解, 47
- 外部テンソル積, 58
- 可約
  - 表現, 59
- 基底
  - 表現, 55
- 既約表現, 59
- 行列積状態, 20, 22
- クラスター性, 5
- 指標
  - 群の表現の—, 56
- 射影表現, 62
- Schmidt 分解, 18
- 乗数系, 62
- 制限
  - 表現の—, 61
- 正則
  - 表現, 60
- 線形表現,  $\rightarrow$  表現
- 相関長
  - 状態の—, 11
- 相互作用距離, 6
- 多極子, 39
- 多極子対称性, 39, 40
- 忠実度, 66, 67
  - 純粋状態の—, 66
- 直積
  - 表現, 58
- 直和
  - 表現, 59
- 転送行列, 26
- テンソル積
  - 表現, 58
- 同値
  - 線形表現の—, 56
- 同値変換
  - 群の表現, 56

特異値, 15  
特異値分解, 15  
トレースノルム, 26, 49  
  
virtual  
  —な脚, 21  
  
表現, 55  
標準形  
  MPS の—, 22  
  
physical  
  —な脚, 21  
フュージョンテンソル, 37  
  
ボックステンソル積, → 外部テンソル積  
ボンド次元, 22  
  
密度行列繰り込み群, 26  
  
誘導ノルム, 49  
誘導表現, 61  
ユニタリ性  
  特異値分解の—, 15  
ユニタリ表現  
  群の—, 56