

空間非一様に作用する対称性を持つ 1 次元トポロジカル相の 分類

京都大学 基礎物理学研究所
齊藤 巧磨

2026 年 1 月 16 日

概要

物質の相分類は対称性の自発的破れをもとにする Landau パラダイムをもとに発展してきたが, Landau パラダイムを超えた物理としてトポロジカル相の存在が注目され, 研究が進んでいる. 近年, 一般化対称性と呼ばれる対称性の再定義によって分類が進展している. しかし分類にあたって念頭に置かれているのは, 基底状態の縮退が有限であり, さらに励起によって現れるエニオンが追加のエネルギーなしに時空全体を自由に運動できるような, 一般化対称性との親和性が高いケースがほとんどである.

このような理想的なトポロジカル物質の反例となる模型としてフラクトン系が知られている. 励起によりエニオン統計性をもつ粒子 (フラクトン) を生じるが, 追加のエネルギーなしに運動できなかつたり, 運動方向が制限されたり, さらに基底状態の縮退度がシステムサイズに応じて発散するなどの特性がある. 粒子の運動制限を生じるメカニズムとして空間位置に依存する作用を与える非一様な対称性の存在が鍵を握っている. 空間 1 次元系を例にとると, 電荷を保存する $U(1)$ 対称性に加えて電気双極子を保存する双極子対称性も Hamiltonian に要請することで, 電荷がペアとなって運動することを要請し, 孤立電荷を固定できる. 一般に n 次の多極子を保存する対称性 (多極子対称性) は n 次多項式を用いた群作用を与えるため, 多極子対称性下でのトポロジカル相を分類することで空間非一様に作用する対称性を持つトポロジカル相が分類できる.

空間 1 次元系ではエニオンは発生しないが, 励起ギャップのある系の基底状態が行列積状態で記述できたり, 基底状態の縮退を伴うトポロジカル相の存在が否定されているなど, トポロジカル相の分類が比較的容易になる.

本修士論文の研究パートである Chap. 5 では, 1 次元スピン系にて非一様な対称性を生成する多極子対称性を課して SPT 相を分類した. 基底状態を表現する行列積状態に対して多極子対称性の対称性操作を施すことで, テンソルの両端にゲージが発生する. 基底状態の非縮退性を保ちつつ発生しうるゲージを列挙することで群コホモロジーを用いた SPT 相の分類の表式が得られる. また分類した相の代表模型として, 有限可換群により生成される多極子対称性のもとで不変な SPT 相を与える模型を具体的に構成し, 端状態を与えた. その結果, 多極子対称性のもとで 1 次元 SPT 相は通常の対称性の場合と同様に 2 次の群コホモロジーによって分類されるが, 可換性との整合性を踏まえると, 通常のカテゴリによる分類により得られる結果に当てはめると大部分の相が禁止されることがわかった.

目次

第 1 章	励起ギャップのある 1 次元スピン系	4
1.1	励起ギャップのあるボゾン系のセットアップ	4
1.2	Lieb-Robinson 限界	6
1.3	gapped 系における基底状態のクラスター性	11
1.4	1 次元 gapped 系のエンタングルメントエントロピーの面積則	15
第 2 章	行列積状態	17
2.1	Schmidt 分解	17
2.2	開放端条件での行列積状態	24
2.3	転送行列の特性	31
2.4	周期境界条件下における並進対称行列積状態	40
2.5	parent Hamiltonian	46
第 3 章	1 次元トポロジカル相と分類	51
3.1	自明相と SSB 相 - 横磁場強磁性 Ising 模型	51
3.2	Landau パラダイムによる相の分類	54
3.3	AKLT 模型	56
3.4	クラスター模型	62
3.5	gapped なトポロジカル相の物理的定義	65
3.6	1 次元系の on-site かつ一様な対称性による相の分類	71
第 4 章	toric code 模型と X cube 模型	83
4.1	toric code 模型	83
4.2	X cube 模型	85
第 5 章	多極子対称性下の SPT 相の分類	88
5.1	多極子対称性	88
5.2	MPS を用いた多極子 SPT 相の分類	90
5.3	多極子 SPT 相の具体例	96
付録 A	線型代数に関する命題と証明	101
A.1	行列の分解と幾何学的解釈	101
A.2	ノルム	102

A.3	正写像	111
付録 B	量子情報理論	127
B.1	エントロピー	127
付録 C	群の表現	133
C.1	線形表現	133
C.2	射影表現	146
付録 D	本文で省略した証明	156
D.1	gapped 系に関する命題の証明	156
D.2	整数論に関する命題の証明	173
D.3	多極子対称性下での SPT 相の分類 (Sec. 5.2) に関する命題の証明	175
索引		184

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。物質の相は温度や圧力、外場などの制御パラメータに応じて変化し、相転移を通じて異なる相へと移り変わる。古典的には、物質の相は局所秩序変数の挙動を対称性の自発的破れによって分類する Landau パラダイム [1] により理解されてきた。最も簡単な磁性体にはじまり、超伝導、超流動といった量子現象も Landau パラダイムの枠組みで説明され、凝縮系物理学に多大なる影響を与えた。しかし 20 世紀後半に入ると、Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 転移 [2-4] に代表される、局所秩序変数では検知できない相転移が発見された。特異点の存在や物質の形状といった系のトポロジカルな性質に起因して物理が変更を受けるため、一般にトポロジカル相と呼ばれる。対称性によってどんなトポロジカル相が存在するかを問うトポロジカル相の分類問題は、近年物性物理学における重要な研究課題となっている。ここ 20 年で分類が急速に進展し、理想的なケースにおいては包括的な理解が得られ、低次元から分類が完了しつつある。

上記の理想的なケースとは励起子が時空全体を自由に運動できることを想定している。くりこみの粗視化に伴い格子系を稠密にしていけば、励起子が格子上の任意の位置に移動できるようになると考えられるからである。しかしこの直感の反例となる模型としてフラクトン系が与えられた。対称性の作用を空間一様にせず、位置に依存した形で作用させることで、励起子の運動を制限した模型を構成できる [5]。励起状態だけでなく基底状態にも非自明な性質が現れ、励起ギャップがありながら厳密に縮退する基底状態が熱力学極限に伴い発散するなど、従来の模型では見られない特性が現れる。

このような非自明な物理を生じる模型を系統的に理解するには、やはり相の分類が必要だろう。トポロジカル相の分類にあたっては低次元系、特に空間 1 次元系にて解析的に有用な結果が多く知られている。空間非一様な対称性のもとでのトポロジカル相の分類も、まずは空間 1 次元系にて理解を深めることが重要である。本研究では格子系にて空間非一様な対称性を生成する有限可換群の多極子対称性を課した 1 次元スピン系にて、トポロジカル相の分類を行った。また分類した相の代表模型を具体的に構成した。

続いて各章の概要を述べる。Chap. 1 では議論の前提となる 1 次元 gapped 系の基礎的な性質を紹介する。特に相関関数が指数減衰すること、基底状態のエンタングルメントエントロピーがシステムサイズに依存しない定数で抑えられることを示す。これらの性質によりトポロジカル相の分類が格段に容易になっている。Chap. 2 では任意の 1 次元 gapped 系の基底状態が行列積状態 (MPS) と呼ばれるテンソルネットワークで表現できることを示す。本研究の最も重要な道具立てであり、以降の議論の基礎となる。Chap. 3 では 1 次元のトポロジカル相の実例をもとにして、理想的な場合の分類手法を説明する。空間非一様な対称性を導入する背景は Chap. 4 にて紹介する。ここで紹介する模型は高次元系にて実現されるが、その基礎的な性質を理解することで、空間非一様な対称性がトポロジカル相の分類に与える影響を把握できるだろう。本研究の結果は Chap. 5 にてまとめている。テクニカルな補足や数学的な前提知識は付録にまとめた。

本稿全体を通して自然単位系 $\hbar = c = 1$ を用いる。

第 1 章

励起ギャップのある 1 次元スピン系

本章では 1 次元格子上の量子スピン系が励起ギャップをもつときに現れる一般性質を整理する。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。量子場理論では、基底状態が真空に対応し、励起は粒子の生成、ギャップは質量に対応する。

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により減衰する。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

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

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 [6] にて示された。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 [7] ことは示唆的である。

1.1 励起ギャップのあるボゾン系のセットアップ

まず問題設定を整理する。設定は本章に限らず、本稿全体で要請する。格子点を Λ_s 、格子のボンドを Λ_b とし、これを合わせて $\Lambda = (\Lambda_s, \Lambda_b)$ とする。凝縮系物理学において興味があるのは熱力学極限である。現段階では格子の形状をどのように取るかは問わず、熱力学極限とは $|\Lambda_s| \rightarrow \infty$ を意味する。 $x, y \in \Lambda_s$ が Λ_b の部分集合で連結されているとき、 $\text{dist}(x, y)$ と書いたら、 x, y 間の最短経路長を表す。格子は次の意味で有限次元であると仮定する。

Assumps. 1: 格子の有限次元性

熱力学極限をとる格子点 Λ_s の増大列は、ある定数 $\eta > 0$ を用いて

$$\sup_{\Lambda_s} \sup_{x \in \Lambda_s} \sum_{y \in \Lambda_s} \frac{1}{[1 + \text{dist}(x, y)]^\eta} < \infty$$

を満たす。

例えば d 次元 Euclid 空間における通常の格子は半径 r の球面に含まれるサイト数が $\mathcal{O}(r^{d-1})$ であるため、

$$(\text{LHS}) \approx \sum_y \frac{1}{r^\eta} \approx \int_1^\infty dr \frac{r^{d-1}}{r^\eta} = \int_1^\infty dr \frac{1}{r^{\eta-d+1}}$$

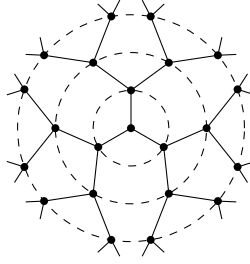


図 1.1: Bethe 格子

が有限になるような $\eta > d$ が必ず存在する. 一方 Bethe 格子 (Fig. 1.1) のように, 距離に応じて指数関数的にサイト数が増加する格子はこの仮定を満たさない.

格子点 $x \in \Lambda_s$ ごとに局所 Hilbert 空間 \mathcal{H}_x を定義する. 各点の Hilbert 空間の次元は $\sup_{x \in \Lambda_s} \dim \mathcal{H}_x < \infty$ を満たすとする. 全 Hilbert 空間は $\mathcal{H} = \bigotimes_{x \in \Lambda_s} \mathcal{H}_x$ で与える.

Λ_s の部分系の集合 S をとることで全系の Hamiltonian が

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

と書けるとする. 例えば空間 1 次元 $\Lambda_s \cong \mathbb{Z}$ の Ising 模型を念頭に置く場合, S は隣接する格子点の組全体の集合 $S = \{\{x, x+1\} \mid x \in \mathbb{Z}\} \cong \Lambda_b$ である. 局所 Hamiltonian h_X は $X \subset \Lambda_s$ に台 (非自明な作用) を持つ演算子である. このことを $\text{supp } h_X = X$ と書く. $X, Y \in S$ が同じサイト数であっても, $X \neq Y$ であれば h_X と h_Y は異なる形状の相互作用を表して良い. ただし相互作用はある程度局所的であることを要請し, 次の仮定をする.

Assumps. 2: 相互作用の指数減衰

相互作用 h_X は定数 $\lambda_0, \mu, \varepsilon > 0$ を用いて

$$\sum_{X \ni x, y} \|h_X\| \leq \lambda_0 e^{-(\mu + \varepsilon) \text{dist}(x, y)}$$

を満たす.^a

^a 演算子のノルム $\|h_X\|$ は Hilbert 空間に作用する行列としての誘導ノルムとする. appendix A.2.2 を参照.

距離 r の 2 点に働く相互作用が $V(r) = \mathcal{O}(e^{-\mu r})$ の形で指数減衰する場合, 典型的な局所 Hamiltonian はこの仮定を満たす.^{*1}

励起ギャップは以下のように定義する.

^{*1} 一方で Coulomb 相互作用のように冪減衰する相互作用はこの仮定を満たさないが, 以降の議論を応用すると冪減衰する Lieb-Robinson 限界およびクラスター性も導出できる [6].

Def. 1: 励起ギャップ

Hamiltonian H_Λ のスペクトル $\text{Spec}(H_\Lambda)$ が以下を満たすとき、基底状態の上に励起ギャップがある (gapped) という。

- H_Λ の基底状態が q -重縮退する。すなわち、固有状態 $E_{0,1}^{(\Lambda)}, \dots, E_{0,q}^{(\Lambda)}$ が

$$\max_{\mu, \mu'} |E_{0,\mu}^{(\Lambda)} - E_{0,\mu'}^{(\Lambda)}| \rightarrow 0 \quad (|\Lambda_s| \rightarrow \infty)$$

を満たす $\text{Spec}(H_\Lambda)$ の最小の元である。

- q -重の基底状態と第 1 励起状態のスペクトル間のギャップが、 $|\Lambda_s|$ に依存しない ($\mathcal{O}(1)$ の) 定数 ΔE で下から抑えられる。

本稿全体を通して、我々が考察するのは常に Assumps. 1 and 2 を満たす励起ギャップのあるスピン系である。

1.2 Lieb-Robinson 限界

相対論的量子力学では空間的に十分離れた 2 点間の bosonic な演算子は交換し、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。^{*2} 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 [7] 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. 2: 相互作用距離

Hamiltonian の台の集合 S を用いて領域 $X, Y \subset \Lambda_s$ 間の距離を

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

とする。^a

^a X, Y は S の元である必要はない。

Fig. 1.2 を参照。時間発展を離散ステップで見ると、点 $x \in \Lambda_s$ 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。

^{*2} 寧ろ bosonic な演算子の定義を、空間的に十分離れた演算子が交換することとする。空間的に離れた演算子が反可換なときは fermionic な演算子と呼ぶ。[6] では fermionic な演算子に対しても Lieb-Robinson 限界及びクラスター性を示している。

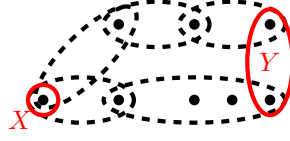


図 1.2: 格子系と相互作用の例. 破線は局所 Hamiltonian が非自明に作用する範囲を表す. この図では $d(X, Y) = 2$ である.

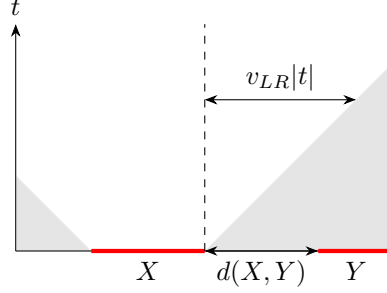


図 1.3: Lieb-Robinson 限界による光円錐. 着色部は“空間的に離れて”おり, 実質的な情報の伝播がないことを示している.

Thm. 3: 指数減衰する相互作用系に関する Lieb-Robinson 限界

A_X, B_Y をコンパクトな台 X, Y ($X \cap Y = \emptyset$) で定義された bosonic な演算子とする. Hamiltonian H の系が Assump. 1 および Assump. 2 を満たすとき, H による時間発展 $A_X(t) := e^{iHt} A_X e^{-iHt}$ を用いて

$$\|[A_X(t), B_Y]\| \leq C \|A_X\| \|B_Y\| |X| |Y| e^{-\mu d(X, Y)} (e^{v|t|} - 1) \quad (1.2.1)$$

を満たす正定数 $C, v > 0$ が存在する.

証明は技術的なので Sec. 1.2.1 に回す. (1.2.1) 右辺最後の -1 を無視して (十分時間が経過したのち) $v_{LR} = v/\mu$ を与え, 交換子のノルムが $\exp[-\mu(d(X, Y) - v_{LR}|t|)]$ で上から押さえられることを見ると, v_{LR} が速度であると解釈しやすい (Fig. 1.3).

(1.2.1) 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 [8, 9] を紹介する. Alice は部分系 $X \subset \Lambda_s$, Bob は部分系 $Y \subset \Lambda_s$ にのみアクセスできるとする. 初期状態 ρ を与え, 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 $H' = O_X$ によって微小時間 ε だけ時間発展させて, 状態を $\rho' = \rho + i\varepsilon[O_X, \rho]$ 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 に台を持つ物理量 M_Y を測定する.

Bob の測定結果の期待値の差は

$$\begin{aligned} \Delta O_Y &:= |\text{Tr}[\rho' M_Y(t)] - \text{Tr}[\rho M_Y(t)]| \\ &= \varepsilon |\text{Tr}[[O_X, \rho] M_Y(t)]| = \varepsilon |\text{Tr}[\rho [M_Y(t), O_X]]| \leq \varepsilon \|[O_X, M_Y(t)]\| \end{aligned}$$

となる。最後の不等式では $|\text{Tr } AB| \leq \|A\|_{\text{tr}} \|B\|$ (Prop. 47) から導いている。Lieb-Robinson 限界 (Thm. 3) は Bob の測定結果の差が “光円錐” $d = v_{LR}t$ からの距離の指数関数により減少することを示しており、因果律を実質的に保証している。

1.2.1 Lieb-Robinson 限界 (Thm. 3) の証明

証明の方針は [6] に従うが、一部 [10] を参考にしている。

$H = H_Y + H_{Y^c}$ 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。 $f(t) := [A_X(t), B_Y]$ とおくと、 $dA_X(t)/dt = i[H, A_X(t)]$ により

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

非斉次線形微分方程式なので定数変化法により解けて、

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

とできる。ノルムをとると

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

$C_A(Z, t) := \sup_{O_Z \neq 0} \|[A_X(t), O_Z]\|/\|O_Z\|$ とおくと

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

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。特に

$$C_A(Z, 0) \begin{cases} = 0 & (X \cap Z = \emptyset) \\ \leq 2\|A_X\| & (X \cap Z \neq \emptyset) \end{cases} =: 2\|A_X\| \delta(X, Z)$$

に注意すると,

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

すなわち,

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

と展開できる. 各項に対応するような X, Y をつなぐ長さ n の path がなければ, その項は 0 になる.

ここで以下の補題を与える.

Lem. 4

ある $\lambda'_0 > 0$ が存在して,

$$\exp[-(\mu + \varepsilon) \text{dist}(x, y)] \leq \frac{\lambda'_0 \exp[-\mu \text{dist}(x, y)]}{[1 + \text{dist}(x, y)]^\eta} \quad (1.2.2)$$

とできる. また Assump. 1 のもと, ある $p_0 > 0$ が存在して,

$$\sum_{z \in \Lambda_s} \frac{\exp[-\mu \text{dist}(x, z)]}{[1 + \text{dist}(x, z)]^\eta} \frac{\exp[-\mu \text{dist}(z, y)]}{[1 + \text{dist}(z, y)]^\eta} \leq \frac{p_0 \exp[-\mu \text{dist}(x, y)]}{[1 + \text{dist}(x, y)]^\eta} \quad (1.2.3)$$

とできる.

Prf.

$\text{dist}(x, y)$ に関する関数 $\exp[-\varepsilon \text{dist}(x, y)][1 + \text{dist}(x, y)]^\eta$ は上に有界であるから, (1.2.2) を満たす $\lambda'_0 > 0$ が常に存在する.

三角不等式から $[1 + \text{dist}(x, y)]^\eta \leq [1 + \text{dist}(x, z) + \text{dist}(z, y)]^\eta \leq [1 + \text{dist}(x, z) + 1 + \text{dist}(z, y)]^\eta$ である. 右辺について, 一般に $A, B \geq 0$ に対し

$$(A + B)^\eta \leq [2 \max(A, B)]^\eta = 2^\eta \max(A^\eta, B^\eta) \leq 2^\eta (A^\eta + B^\eta)$$

であるから,

$$[1 + \text{dist}(x, y)]^\eta \leq 2^\eta ([1 + \text{dist}(x, z)]^\eta + [1 + \text{dist}(z, y)]^\eta)$$

が成り立つ. (1.2.3) は

$$\begin{aligned} & \sum_{z \in \Lambda_s} \frac{\exp[-\mu \text{dist}(x, z)] \exp[-\mu \text{dist}(z, y)]}{[1 + \text{dist}(x, z)]^\eta [1 + \text{dist}(z, y)]^\eta} \\ &= \sum_{z \in \Lambda_s} \frac{\exp[-\mu \text{dist}(x, z)] \exp[-\mu \text{dist}(z, y)]}{[1 + \text{dist}(x, y)]^\eta} \frac{[1 + \text{dist}(x, y)]^\eta}{[1 + \text{dist}(x, z)]^\eta [1 + \text{dist}(z, y)]^\eta} \\ &\leq \sum_{z \in \Lambda_s} \frac{\exp[-\mu \text{dist}(x, z)] \exp[-\mu \text{dist}(z, y)]}{[1 + \text{dist}(x, y)]^\eta} 2^\eta \frac{[1 + \text{dist}(x, z)]^\eta + [1 + \text{dist}(z, y)]^\eta}{[1 + \text{dist}(x, z)]^\eta [1 + \text{dist}(z, y)]^\eta} \\ &= \sum_{z \in \Lambda_s} \frac{\exp[-\mu \text{dist}(x, z)] \exp[-\mu \text{dist}(z, y)]}{[1 + \text{dist}(x, y)]^\eta} 2^\eta \left(\frac{1}{[1 + \text{dist}(x, z)]^\eta} + \frac{1}{[1 + \text{dist}(z, y)]^\eta} \right) \end{aligned}$$

によって得られる. 最右辺の総和は Assump. 1 により有限であることが保証されている. \square

この補題により適切な p_0 を取ることで

$$\begin{aligned} & \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \cdots \sum_{\substack{Z_n \cap Z_{n-1} \neq \emptyset \\ X \cap Z_n \neq \emptyset}} \|h_{Z_n}\| \\ &\leq \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} \sum_{z_{12}, \dots, z_{n-1, n} \in \Lambda_s} \sum_{Z_1 \ni y, z_{12}} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \ni z_{12}, z_{23}} \|h_{Z_2}\| \cdots \sum_{Z_n \ni z_{n-1, n}, x} \|h_{Z_n}\| \\ &\leq \sum_{\substack{x \in X \\ y \in Y}} \sum_{z_{12}, \dots, z_{n-1, n} \in \Lambda_s} \sum_{Z_1 \ni y, z_{12}} \|h_{Z_1}\| \cdots \sum_{Z_{n-1} \ni z_{n-2, n-1}, z_{n-1, n}} \|h_{Z_{n-1}}\| \lambda_0 e^{-(\mu + \varepsilon) \text{dist}(z_{n-1, n}, x)} \\ &\leq \sum_{\substack{x \in X \\ y \in Y}} \sum_{z_{12}, \dots, z_{n-1, n} \in \Lambda_s} \sum_{Z_1 \ni y, z_{12}} \|h_{Z_1}\| \cdots \sum_{Z_{n-1} \ni z_{n-2, n-1}, z_{n-1, n}} \|h_{Z_{n-1}}\| \frac{\lambda_0 \lambda'_0 e^{-\mu \text{dist}(z_{n-1, n}, x)}}{[1 + \text{dist}(z_{n-1, n}, x)]^\eta} \\ &\leq \cdots \\ &\leq \sum_{\substack{x \in X \\ y \in Y}} \sum_{z_{12}, \dots, z_{n-1, n} \in \Lambda_s} \frac{\lambda_0 \lambda'_0 e^{-\mu \text{dist}(y, z_{12})}}{[1 + \text{dist}(y, z_{12})]^\eta} \frac{\lambda_0 \lambda'_0 e^{-\mu \text{dist}(z_{12}, z_{23})}}{[1 + \text{dist}(z_{12}, z_{23})]^\eta} \cdots \frac{\lambda_0 \lambda'_0 e^{-\mu \text{dist}(z_{n-1, n}, x)}}{[1 + \text{dist}(z_{n-1, n}, x)]^\eta} \\ &\leq \sum_{\substack{x \in X \\ y \in Y}} (\lambda_0 \lambda'_0)^n \frac{p_0^{n-1} e^{-\mu \text{dist}(x, y)}}{[1 + \text{dist}(x, y)]^\eta} \leq |X| |Y| p_0^{-1} (p_0 \lambda_0 \lambda'_0)^n e^{-\mu d(X, Y)} \end{aligned}$$

と評価できるので,

$$\begin{aligned} C_A(Y, t) &\leq 2p_0^{-1} \|A_X\| \|X\| \|Y\| e^{-\mu d(X, Y)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2tp_0 \lambda_0 \lambda'_0)^n}{n!} \\ &\leq \text{const.} \times \|A_X\| \|X\| \|Y\| e^{-\mu d(X, Y)} [e^{2tp_0 \lambda_0 \lambda'_0} - 1] \end{aligned}$$

が成り立つ. $\|[A(t), B_Y]\|/\|B_Y\| \leq C_A(Y, t)$ なので, 定数 $v > 0$ を適切に取ることで

$$\|[A(t), B_Y]\| \leq \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| \|X\| \|Y\| e^{-\mu d(X, Y)} [e^{vt} - 1]$$

である. □

1.3 gapped 系における基底状態のクラスター性

Thm. 5: ボゾン系のクラスター性

P_0 を Hamiltonian H の基底状態空間への射影, A_X, B_Y をそれぞれコンパクトな領域 $X, Y \subset \Lambda_s$ に台を持つ演算子とする. Hamiltonian を H とする系が Assumps. 1 and 2 を満たし, さらに励起ギャップ $\Delta E > 0$ があるとき, 熱力学極限の任意の基底状態 $|\Phi\rangle$ について

$$\left| \langle \Phi | A_X B_Y | \Phi \rangle - \frac{1}{2} [\langle \Phi | A_X P_0 B_Y | \Phi \rangle + \langle \Phi | B_Y P_0 A_X | \Phi \rangle] \right| \leq \|A_X\| \|B_Y\| \times \mathcal{O}(e^{-\tilde{\mu} d(X, Y)})$$

が成立する. ただし, $\tilde{\mu}$ は Lieb-Robinson 限界 (Thm. 3) の定数 $\mu, v > 0$ を用いて

$$\tilde{\mu} := \frac{\mu}{1 + 2v/\Delta E}$$

と表される.

「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 限界が本質的に関わっていることには注目すべきである. また特に基底状態が縮退する系について, 主張の左辺は連結相関関数

$$\langle \Phi | A_X B_Y | \Phi \rangle - \langle \Phi | A_X | \Phi \rangle \langle \Phi | B_Y | \Phi \rangle$$

とは一般に異なることに注意せよ. 例えば, 古典 Ising 模型の基底状態を Bell 状態

$$|\pm\rangle = \frac{|\uparrow\uparrow \cdots\rangle \pm |\downarrow\downarrow \cdots\rangle}{\sqrt{2}}$$

により展開すると, 連結相関関数が

$$\langle \pm | Z_x Z_y | \pm \rangle - \langle \pm | Z_x | \pm \rangle \langle \pm | Z_y | \pm \rangle = 1 - 0 \cdot 0 = 1$$

であるのに対し, 定理における不等式左辺は

$$\begin{aligned} &\langle \pm | Z_x Z_y | \pm \rangle - \frac{1}{2} [\langle \pm | Z_x (|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|) Z_y | \pm \rangle + \langle \pm | Z_y (|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|) Z_x | \pm \rangle] \\ &= 1 - \frac{\langle \pm | Z_x \mathbf{1} Z_y | \pm \rangle + \langle \pm | Z_y \mathbf{1} Z_x | \pm \rangle}{2} = 0 \end{aligned}$$

となる. 基底状態が縮退しない場合, 主張の左辺は常に連結相関関数と等しいので, 励起ギャップがあるなら連結相関関数が指数減衰することが直ちに従う.

1.3.1 証明の概観

証明自体はテクニカルなので Sec. 1.3.2 に回すが, [10] を参考に証明の方針を概観する.

出発点は基底状態における交換関係の評価である. ハミルトニアン H による時間発展で $A_X(t) := e^{iHt} A_X e^{-iHt}$ を与える. $|\Phi\rangle$ を規格化した基底状態としたとき,

$$\begin{aligned} \langle \Phi | [A_X(t), B_Y] | \Phi \rangle &= \langle \Phi | A_X(t)(1 - P_0) B_Y | \Phi \rangle - \langle \Phi | B_Y(1 - P_0) A_X(t) | \Phi \rangle \\ &\quad + \langle \Phi | A_X(t) P_0 B_Y | \Phi \rangle - \langle \Phi | B_Y P_0 A_X(t) | \Phi \rangle \end{aligned} \quad (1.3.1)$$

と分解できる. q -重縮退した基底状態ベクトル $|\Phi_{0,\nu}\rangle$ ($\nu = 1, \dots, q$) のエネルギー固有値を $E_{0,\nu}$, 励起状態のベクトルを $|\Phi_n\rangle$ ($n \geq 1$), そのエネルギー固有値を E_n とする. 基底状態 $|\Phi\rangle$ の分解を

$$|\Phi\rangle = \sum_{\nu} a_{\nu} |\Phi_{0,\nu}\rangle$$

で与えると, (1.3.1) 右辺各項は

$$\langle \Phi | A_X(t)(1 - P_0) B_Y | \Phi \rangle = \sum_{\nu, \nu'} \sum_{n \neq 0} a_{\nu}^* a_{\nu'} \langle \Phi_{0,\nu} | A_X | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | B_Y | \Phi_{0,\nu'} \rangle e^{i(E_{0,\nu} - E_n)t} \quad (1.3.2)$$

$$\langle \Phi | B_Y(1 - P_0) A_X(t) | \Phi \rangle = \sum_{\nu, \nu'} \sum_{n \neq 0} a_{\nu}^* a_{\nu'} \langle \Phi_{0,\nu} | B_Y | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | A_X | \Phi_{0,\nu'} \rangle e^{i(E_n - E_{0,\nu'})t} \quad (1.3.3)$$

$$\langle \Phi | A_X(t) P_0 B_Y | \Phi \rangle = \sum_{\nu, \nu'} \sum_{\mu} a_{\nu}^* a_{\nu'} \langle \Phi_{0,\nu} | A_X | \Phi_{0,\mu} \rangle \langle \Phi_{0,\mu} | B_Y | \Phi_{0,\nu'} \rangle e^{i(E_{0,\nu} - E_{0,\mu})t}$$

$$\langle \Phi | B_Y P_0 A_X(t) | \Phi \rangle = \sum_{\nu, \nu'} \sum_{\mu} a_{\nu}^* a_{\nu'} \langle \Phi_{0,\nu} | B_Y | \Phi_{0,\mu} \rangle \langle \Phi_{0,\mu} | A_X | \Phi_{0,\nu'} \rangle e^{i(E_{0,\mu} - E_{0,\nu'})t}$$

である.

主張を示すに当たって重要になるのは (1.3.2) の $t = 0$ における値であり, (1.3.1) からは特に (1.3.3) の寄与を除きたい. そこで指数関数の肩に現れる符号に注目し, 波数が負になるものを選択的に取り出す. 幸い (1.3.2) の Fourier 変換は実質的に欲しい式の $t = 0$ における値なので, $\omega < 0$ のみを通すフィルターを導入すればクラスター性を評価できる. 具体的には, 複素積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{-i\omega t}}{t + i0} = \begin{cases} -2\pi i & (\omega > 0) \\ 0 & (\omega < 0) \end{cases} \quad (1.3.4)$$

を利用し, (1.3.1) を t 積分して

$$\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{1}{t + i0} \langle \Phi | [A_X(t), B_Y] | \Phi \rangle = \langle \Phi | A_X(1 - P_0) B_Y | \Phi \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{i(E_{0,\nu} - E_n)t}}{t + i0} + \dots \quad (1.3.5)$$

とすると, (1.3.3) の寄与が消える. 左辺のノルムを評価すれば, 相関関数の振る舞いを与えられる.

(1.3.5) 左辺について, t が小さい領域では Lieb-Robinson 限界により $d(X, Y)$ の指数関数で抑えられる. t の大きい支配的な領域を押さえるために, Gaussian フィルター $e^{-\alpha t^2}$ を導入して左辺の積分を

$$\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{-\alpha t^2}}{t + i0} \langle \Phi | [A_X(t), B_Y] | \Phi \rangle$$

と書き直す. このとき右辺の (1.3.4) にもフィルターがかかって階段関数ではなくなるため, (1.3.3) の寄与が混入する. すなわち,

- (1.3.5) 左辺で t が大きい部分の寄与を抑えるには α が大きい方が望ましい
- (1.3.5) 右辺に (1.3.3) の寄与を混入させないためには α が小さい方が望ましい

のトレードオフを考慮して α を適切に選ぶと, (1.3.5) 右辺第 1 校の適切な上限を与えることができ, 基底状態のクラスター性が示される.

1.3.2 証明

不等式評価

証明は煩雑なので appendix D.1.1 に回すが, まず以下の補題を与える.

Lem. 6: フィルター付き階段関数の評価

$E \in \mathbb{R}, \alpha > 0$ に対して,

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \frac{e^{-iEt} e^{-\alpha t^2}}{t + i\epsilon} &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^0 d\omega e^{-(\omega+E)^2/4\alpha} \\ &= \begin{cases} 1 + \mathcal{O}\left(\frac{\exp(-\Delta E^2/4\alpha)}{|\Delta E|}\right) & (E \geq \Delta E) \\ \mathcal{O}\left(\frac{\exp(-\Delta E^2/4\alpha)}{|\Delta E|}\right) & (E \leq -\Delta E) \end{cases} \end{aligned}$$

(1.3.1) の分解と Lem. 6 により,

$$\begin{aligned} &\lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \frac{\langle \Phi | [A_X(t), B_Y] | \Phi \rangle}{t + i\epsilon} e^{-\alpha t^2} \\ &= \langle \Phi | A_X (1 - P_0) B_Y | \Phi \rangle + \langle \Phi | B_Y (1 - P_0) A_X | \Phi \rangle \times \mathcal{O}\left(\frac{\exp(-\Delta E^2/4\alpha)}{|\Delta E|}\right) \\ &\quad + \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \frac{e^{-\alpha t^2}}{t + i\epsilon} [\langle \Phi | A_X(t) P_0 B_Y | \Phi \rangle - \langle \Phi | B_Y P_0 A_X(t) | \Phi \rangle] \end{aligned} \quad (1.3.6)$$

が成り立つ. $d = d(X, Y)$, $c > 0$ によって左辺のノルムを評価すると

$$\begin{aligned} &\left\| \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \left(\int_{0 \leq |t| \leq cd} + \int_{cd < |t| \leq T} \right) dt \frac{\langle \Phi | [A_X(t), B_Y] | \Phi \rangle}{t + i\epsilon} e^{-\alpha t^2} \right\| \\ &\leq \int_{0 \leq |t| \leq cd} dt C \|A_X\| \|B_Y\| e^{-\mu d} \frac{e^{v|t|} - 1}{|t|} + \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{cd < |t| \leq T} dt \|A_X\| \|B_Y\| \frac{e^{-\alpha t^2}}{cd} \end{aligned}$$

である. ただし, 第 1 項の導出に Lieb-Robinson 限界 (Thm. 3) と $e^{-\alpha t^2} \leq 1$ を使い, X, Y がコンパクトであることから $|X||Y|$ を定数 C に含めた. 第 2 項の導出に $1/|t| \leq 1/cd$ を用いた. 第 1 項にはさらに $e^x - 1 = \sum_{n=1}^{\infty} x^n/n! < \sum_{n=1}^{\infty} x^n/(n-1)! = xe^x$ から得られる

$$\int_0^{cd} dt \frac{e^{vt} - 1}{t} \leq \int_0^{cd} dt \frac{vte^{vt}}{t} \leq e^{vcd}$$

によって, 第 2 項は積分範囲を $(0, \infty)$ に拡大した Gauss 積分によって評価できて,

$$\|(1.3.6) \text{ LHS}\| \leq \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| e^{-\mu d} e^{vcd} + \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| \frac{e^{-\alpha c^2 d^2}}{\sqrt{\alpha cd}}$$

を得る. (1.3.6) 右辺第 2 項は

$$\langle \Phi | B_Y (1 - P_0) A_X | \Phi \rangle \mathcal{O} \left(\frac{\exp(-\Delta E^2/4\alpha)}{|\Delta E|} \right) = \mathcal{O} \left(\|A_X\| \|B_Y\| \frac{\exp(-\Delta E^2/4\alpha)}{\Delta E} \right)$$

である. (1.3.6) 右辺最終項を評価する. Lem. 6 により

$$\begin{aligned} & \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \langle \Phi_{0,\nu} | A_X(t) P_0 B_Y | \Phi_{0,\nu'} \rangle e^{-\alpha t^2} \\ &= \sum_{\mu} \langle \Phi_{0,\nu} | A_X | \Phi_{0,\mu} \rangle \langle \Phi_{0,\mu} | B_Y | \Phi_{0,\nu'} \rangle \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \frac{e^{i(E_{0,\nu} - E_{0,\mu})t}}{t + i\epsilon} \\ &= \sum_{\mu} \langle \Phi_{0,\nu} | A_X | \Phi_{0,\mu} \rangle \langle \Phi_{0,\mu} | B_Y | \Phi_{0,\nu'} \rangle \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^0 d\omega \exp \left[-\frac{(\omega + \Delta E_{\mu,\nu})^2}{4\alpha} \right] \\ &\rightarrow \langle \Phi_{0,\nu} | A_X P_0 B_Y | \Phi_{0,\nu'} \rangle \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^0 d\omega \exp \left[-\frac{\omega^2}{4\alpha} \right] = \frac{1}{2} \langle \Phi_{0,\nu} | A_X P_0 B_Y | \Phi_{0,\nu'} \rangle \end{aligned}$$

である. ここに, $\Delta E_{\mu,\nu} := E_{0,\nu} - E_{0,\mu}$ は格子のサイズ無限大極限 $|\Lambda_s| \rightarrow \infty$ にて 0 に収束することを使った. (1.3.6) に残った項も全く同様である.

以上を総合して,

$$\begin{aligned} & \left| \langle \Phi | A_X B_Y | \Phi \rangle - \frac{1}{2} [\langle \Phi | A_X P_0 B_Y | \Phi \rangle + \langle \Phi | B_Y P_0 A_X | \Phi \rangle] \right| \\ & \leq \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| e^{-(\mu - \nu c)d} + \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| \frac{e^{-\alpha c^2 d^2}}{\sqrt{\alpha c d}} + \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| \frac{e^{-\Delta E^2/4\alpha}}{\Delta E} \end{aligned}$$

である.

最適パラメーターの選択

ここで, パラメーター c, α を適切に選び, 最適な評価を与える. 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, 等号成立は $x = 1$ のときに限る. これを踏まえると, $\alpha = \Delta E/2cd$ にて概ね最適な評価が得られ,

$$\begin{aligned} & \left| \langle \Phi | A_X B_Y | \Phi \rangle - \frac{1}{2} (\langle \Phi | A_X P_0 B_Y | \Phi \rangle + \langle \Phi | B_Y P_0 A_X | \Phi \rangle) \right| \\ & \leq \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| e^{-(\mu - \nu c)d} + \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| \left(\frac{1}{\sqrt{\Delta E c d/2}} + \frac{\text{const.}}{\Delta E} \right) e^{-\Delta E c d/2}. \end{aligned}$$

仮定より $\Delta E = \mathcal{O}(1)$ は定数により下から押さえられ, また $d \geq 1$ であるから, 右辺第 2 項も $\|A_X\|, \|B_Y\|, \exp(-\Delta E c d/2)$ と定数の積で押さえられる. 先ほど同様に相加相乗平均を念頭に置くと

$$e^{-(\mu - \nu c)d} + e^{-\Delta E c d/2} \geq 2 \exp \left[-\frac{\mu - (v - \Delta E/2)c}{2} d \right]$$

である. 等号成立は $\mu - \nu c = \Delta E c d/2$ すなわち $c = \mu/(v + \Delta E/2)$ のときに限り, またそのとき両辺各項は d について常に減少関数である. ゆえに $\tilde{\mu} = \mu/(1 + 2v/\Delta E)$ にて

$$\left| \langle \Phi, A_X B_Y \Phi \rangle - \frac{1}{2} [\langle \Phi, A_X P_0 B_Y \Phi \rangle + \langle \Phi, B_Y P_0 A_X \Phi \rangle] \right| \leq \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| e^{-\tilde{\mu} d(X,Y)}$$

が成り立つ. □

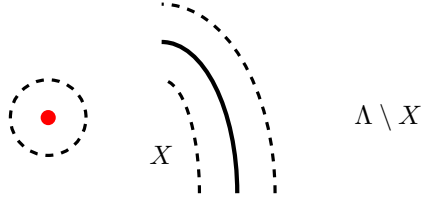


図 1.4: エンタングルメントの面積則. 赤点とエンタングルする点は周囲の破線の円を超えないと期待すると, X と $\Lambda \setminus X$ の境界 (太線) を跨ぐエンタングルメントの最大値は境界近傍 (破線内側) にある点の数に比例すると考えられる.

1.4 1 次元 gapped 系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 系の基底状態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に指数減衰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着目領域の面積に比例すること (面積則) 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. 1.4 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だろう. 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 B.1), 上限は X の境界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, 1 次元 gapped 系の局所 Hamiltonian が近接サイトにしか作用しない (2-local な) 場合, 基底状態に縮退がなければ von Neumann 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 [11] にて示されており, [12] で上限を与える定数評価が改善された. 縮退がある場合の Rényi エントロピーに関する面積則も同様に示されている [13, 14]. 後の章で議論する 1 次元 gapped 系の行列積状態による近似可能性には Rényi エントロピーの面積則が必要になるため, ここでは [14] の議論に従って Rényi エントロピーの面積則を示す.

Thm. 7: 1D gapped 系における Rényi エントロピーの面積則

1 次元 gapped 系の基底状態の Rényi エンタングルメントエントロピー S_α ($0 < \alpha < 1$) はたかだか $\tilde{O}(1/(\alpha^3 \Delta E))$ で抑えられる.

von Neumann エントロピーは $\alpha < 1$ における Rényi エントロピーの値の下限であるから (Prop. 68), この証明により von Neumann エントロピーも面積則を満たすことが直ちにわかる

証明は煩雑なため appendix D.1.2 に回すが, ここでは方針を概観する.

主要なアイデアとして, [12] にて導入された approximate ground state projector (AGSP) と呼ばれる演算子により基底状態を構成する. AGSP 演算子は量子状態のエンタングルメントエントロピーの上限を与える Schmidt ランク (cf. Sec. 2.1) を抑えながら, 励起状態成分を減衰するように設計されている. 具体的には, AGSP 演算子 A と Schmidt ランクの間に

$$R(A|\psi\rangle) \leq DR(|\psi\rangle)$$

の関係を満たす定数 D が存在する。エンタングルメントがない直積状態に AGSP 演算子を繰り返し作用させることで基底状態に十分近くエンタングルメントが小さい状態を構成できる。 D が小さくなるように AGSP を設計できれば、無限回の作用をしてもエンタングルメントエントロピーが定数で抑えられるだろう。

議論の方針は以下の通りである。まずエンタングルメントを評価する切断面から十分遠くの影響を無視しつつ、全体の低エネルギー状態をほとんど保存するような摂動 Hamiltonian $H^{(t)}$ を構成する。摂動により本来縮退していた基底状態が分裂しうするため、分裂した基底状態に均一に作用する AGSP 演算子を構成する。直積状態に AGSP 演算子を繰り返し作用させて Rényi エンタングルメントエントロピーを評価する。

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 [15] 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. 本章は主に [16–18] 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 $\text{rank } M$ でおよそ評価せざるを得ないだろう. ^{*1} 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, 標準的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 (cf. appendix A.2.2). 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.

Problem 8: 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

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

を実現する \tilde{M} を求めよ.

^{*1} 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.

$\tilde{r} \geq \text{rank } M$ 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 8 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 Prop. 42 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、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。^{*2} Lagrange の未定乗数 $\lambda_{ij} \in \mathbb{R}$ を成分とする行列 $\tilde{\Lambda}$ により

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

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}, \tilde{C} の成分で微分して停留点を求めると

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

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

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

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

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

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。

^{*2} 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。

最適化問題 Problem 8 に戻る. 停留点における目的関数の値は

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

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を成分にもつ対角行列を選べばよい. 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. 9: 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 Σ 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.^a また Σ 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.

^a 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, $U U^\dagger = 1_m, V V^\dagger = 1_n$ とは限らない.

Thm. 10: 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. また行列を四角で囲まずに

$$\text{---} \bullet \text{---}$$

のようにすることもある。この記法を用いると特異値分解は

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

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の意味する。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。

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 空間は各サイトの Hilbert 空間のテンソル積 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 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

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

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 $\sum_i |i\rangle_A u_{ik}$ は正規直交基底を組む。 $\sum_j (v^\dagger)_{kj} |j\rangle_B$ 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. 11: 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。

Thm. 10 の系として以下が示される。

Cor. 12: 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 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots > 0$ 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

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

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 分解により状態が二つの系の純粋状態によって記述できるので, 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すると

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

の可分状態を得て, A のエンタングルメントエントロピーは

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

と計算できる. A 系をトレースアウトしても同じ結果を得るので $S_A = S_B$ である. $\sum_k \sigma_k^2 = 1$ であるから Cor. 72 により Schmidt ランクで S_A の上限が決まる.

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

Cor. 12 では Schmidt ランクを制限, すなわちエントロピーの最大値を削減した上での状態の最適近似を求めた. Schmidt ランクがエンタングルメントエントロピーの最大値を反映するので, 誤差をエントロピーで評価できるだろう. von Neumann エントロピーは $\alpha < 1$ の Rényi エントロピーの下限なので, Rényi エントロピーで評価できるに越したことはない. [19] では以下の補題が示されている.

Lem. 13: 低ランク Schmidt 分解の誤差の Rényi エントロピーによる評価

状態 $\rho = \sum_{i=1}^d \lambda_i |i\rangle\langle i|$ の係数が降順に (i.e. $i \leq j \implies \lambda_i \geq \lambda_j$) 並んでいるとする. $\varepsilon_D = \sum_{i=D+1}^d \lambda_i$ としたとき, 任意の $\alpha \in (0, 1)$ に対して

$$\ln \varepsilon_D \leq \frac{1-\alpha}{\alpha} \left(S_\alpha(\rho) - \ln \frac{D}{1-\alpha} \right).$$

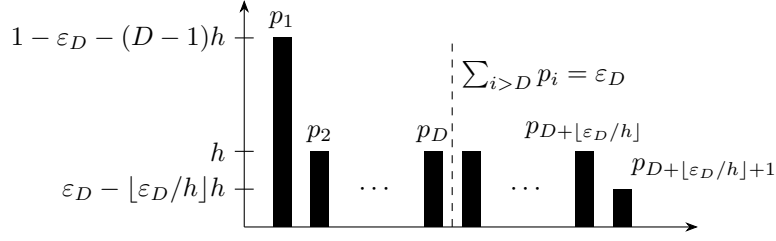


図 2.1: Rényi エントロピーの下限を与える分布 $\{p_i\}$

純粋状態の Schmidt 分解

$$|\Phi\rangle_{AB} = \sum_{k=1}^d \sqrt{\lambda_k} |\phi_k\rangle_A \otimes |\psi_k\rangle_B, \quad \lambda_k = \sigma_k^2$$

を与えたとき, $|\Phi\rangle_{AB}$ の縮約密度行列 $\rho_A = \text{Tr}_B |\Phi\rangle\langle\Phi|_{AB} = \sum \lambda_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k|$ と $\text{Tr}_B |\Phi_{\tilde{d}}\rangle\langle\Phi_{\tilde{d}}|_{AB}$ を比した誤差は定理の ε_D を $D = \tilde{d}$ としたものにほかならない. よって上記の補題は Schmidt 分解による純粋状態の近似誤差を Rényi エントロピーで評価している.

Prf.

■任意の Rényi エントロピーの下限評価 まず任意の確率分布 $\{p_i\}_{i=1}^d$ の Rényi エントロピーを $\varepsilon_D(\{p_i\}) := \sum_{i=D+1}^d p_i$ の関数により下から評価する. 対数関数は単調増加なので $\sum_i p_i^\alpha$ の下限を与えればよい.

$$(p_i)_i \succ (q_i)_i \implies \sum_i p_i^\alpha \leq \sum_i q_i^\alpha$$

は Rényi エントロピーの Schur concavity の証明で導出した (B.1.1) そのものである. そこで $\sum_{i=D+1}^d p_i = \varepsilon_D$ を固定した確率分布で最も分布が偏っているものを構成すれば良い.

$0 < h < (1 - \varepsilon_D)/D$ を満たすパラメーター h によって以下の確率分布を定める.

$$\begin{aligned} p_1 &= 1 - \varepsilon_D - (D-1)h, \\ p_2 &= p_3 = \dots = p_{D+[\varepsilon_D/h]} = h, \\ p_{D+[\varepsilon_D/h]+1} &= \varepsilon_D - [\varepsilon_D/h]h, \\ p_{D+[\varepsilon_D/h]+1} &= p_{D+[\varepsilon_D/h]+2} = \dots = p_d = 0 \end{aligned}$$

Fig. 2.1 も参照せよ. h の上限により $p_1 \geq p_2$ が保証される. $\sum_{i>D} \lambda_i = \varepsilon_D$ なる任意の分布 $(\lambda_i)_i$ に対して $h = \lambda_D (< 1/D - \varepsilon_D/D)$ とすれば $(p_i)_i \succ (\lambda_i)_i$ を満たす. 実際, $k \leq D$ では

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k p_i &= 1 - \varepsilon_D - (D-1)h + (k-1)h = \sum_{i=1}^D \lambda_i - (D-k)\lambda_D \\ &= \sum_{i=1}^D \lambda_i + \sum_{i=k+1}^D (\lambda_i - \lambda_D) \geq \sum_{i=1}^D \lambda_i \end{aligned}$$

であり, $D < k \leq D + [\varepsilon_D/h]$ では

$$\sum_{i=1}^k p_i = 1 - \varepsilon_D + (k-D)\lambda_D = \sum_{i=1}^D \lambda_i + \sum_{i=D+1}^k \lambda_D \geq \sum_{i=1}^k \lambda_i$$

さらに $k > D + \lfloor \varepsilon_D/h \rfloor$ では

$$\sum_{i=1}^k p_i = 1 \geq \sum_{i=1}^k \lambda_i$$

であることから確認できる.

再びパラメーター h を用いた表現によるこの特別な分布 $(p_i)_i$ にて

$$\sum_{i=1}^d p_i^\alpha = [1 - \varepsilon_D - (D-1)h]^\alpha + [D + \lfloor \varepsilon_D/h \rfloor - 1]h^\alpha + [\varepsilon_D - \lfloor \varepsilon_D/h \rfloor h]^\alpha$$

と計算できる. $h < (1 - \varepsilon_D)/D$ から $1 - \varepsilon_D - (D-1)h > h$ であることから第 1 項と第 2 項の一部について

$$[1 - \varepsilon_D - (D-1)h]^\alpha - h^\alpha > 0$$

が成り立ち, また

$$\left(\frac{\varepsilon_D}{h} - \left\lfloor \frac{\varepsilon_D}{h} \right\rfloor\right)h^\alpha - \left(\frac{\varepsilon_D}{h} - \left\lfloor \frac{\varepsilon_D}{h} \right\rfloor\right)^\alpha h^\alpha = \left(\frac{\varepsilon_D}{h} - \left\lfloor \frac{\varepsilon_D}{h} \right\rfloor\right)^\alpha h^\alpha \left[\left(\frac{\varepsilon_D}{h} - \left\lfloor \frac{\varepsilon_D}{h} \right\rfloor\right)^{1-\alpha} - 1\right] \leq 0$$

なので残りの項は $(D + \varepsilon_D/h)h^\alpha$ で下から押さえられる. よって

$$\sum_i p_i^\alpha \geq (D + \varepsilon_D/h)h^\alpha \geq \frac{D^{1-\alpha}\varepsilon_D^\alpha}{(1-\alpha)^{1-\alpha}\alpha^\alpha}$$

である. ^a ここから Rényi エントロピーを計算すると

$$S_\alpha(\{p_i\}_{i=1}^d) \geq \frac{1}{1-\alpha} \ln \left[\frac{D^{1-\alpha}(\varepsilon_D)^\alpha}{(1-\alpha)^{1-\alpha}\alpha^\alpha} \right]$$

となるので,

$$\ln \varepsilon_D \leq \frac{1-\alpha}{\alpha} \left(S_\alpha(\rho) - \ln \frac{D}{1-\alpha} \right) + \ln \alpha$$

と評価できる. $\ln \alpha < 0$ なので題意を満たす. □

^a 最右辺は h 実関数としての最小値を与えている.

2.1.3 3 粒子以上での Schmidt 分解の不可能性

$L = 2$ では状態の Schmidt 分解ができた. 同様の計算が $L > 2$ 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

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

の可分状態となる。一般にサイト数に関わらず、Schmidt 分解の部分トレースは可分状態である。逆に、部分トレースが可分でない、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

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

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。

2.2 開放端条件での行列積状態

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。バルクの物理は境界条件に依存しないという信念に基けば、MPS は周期境界条件でも有効だと期待される。本節ではまず開放端条件での MPS を導入し、これを利用して周期境界条件での MPS を定義する。

2.2.1 開放端条件での標準形 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

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

とできる. Schmidt ランク $r_{L-1} = \text{rank } \Sigma_{L-1}$ は $\min(d_1 + \dots + d_{L-1}, d_L) \leq (d_1 + \dots + d_L)/2$ 以下である. 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. 特異値分解 (Thm. 9) のユニタリ性は

$$\begin{aligned} 1_{r_{L-1}} &= V_L^\dagger V_L = \text{---} \boxed{V_L^\dagger} \text{---} \boxed{V_L} \text{---} \\ &= U_{L-1}^\dagger U_{L-1} = \text{---} \boxed{U_{L-1}^\dagger} \text{---} \boxed{U_{L-1}} \text{---} \end{aligned}$$

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

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

と表される. ただし記法として

$$\begin{array}{c} \boxed{A} \\ \vdots \\ \boxed{B} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{C} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \boxed{A} \text{---} \boxed{B} \text{---} \boxed{C} \text{---} \end{array}$$

としている. virtual な脚の端を曲げることでトレースを表している.

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,

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

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

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

も成立する. Schmidt ランクは $r_{L-2} = \min(d_1 + \dots + d_{L-2}, d_{L-1} + r_{L-1}) \leq (d_1 + \dots + d_L)/2$ 以下である. 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,

$$\begin{array}{c} \vdots \\ \boxed{M_{i_1, \dots, i_L}} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{U_1} \end{array} \begin{array}{c} \Sigma_1 \\ \bullet \\ \Sigma_1 \end{array} \begin{array}{c} \boxed{A_2} \end{array} \text{---} \boxed{A_3} \text{---} \dots \text{---} \boxed{A_L},$$

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

$$\begin{array}{c} \vdots \\ \boxed{M_{i_1, \dots, i_L}} \end{array} = \Sigma_0 \begin{array}{c} \boxed{A_1} \end{array} \text{---} \boxed{A_2} \text{---} \boxed{A_3} \text{---} \dots \text{---} \boxed{A_L}$$

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

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

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.

Thm. 14: 開放端条件における純粋状態の右標準形 MPS

有限次元 Hilbert 空間のテンソル積で表される L サイト系の開放端条件における純粋状態は右標準形 (right canonical form) の行列積状態 (matrix product state; MPS)

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

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. 開放端条件であることを明示して OBC-MPS と呼ぶこともある. ここに,

$$\sum_{i_k} A_k^{i_k} (A_k^{i_k})^\dagger = \text{---} \boxed{A_k} \text{---} \boxed{A_k^\dagger} \text{---} = \begin{array}{c} \text{---} \boxed{A^\dagger} \\ | \\ \boxed{A} \text{---} \end{array} = 1_{r_{k-1}} \quad (2.2.1)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i_k} (A_k^{i_k})^\dagger \Sigma_{k-1}^2 A_k^{i_k} &= \text{---} \boxed{A_k^\dagger} \text{---} \Sigma_{k-1}^2 \text{---} \boxed{A_k} \text{---} = \text{---} \Sigma_k^2 \text{---} \\ &= \Sigma_{k-1}^2 \begin{array}{c} \boxed{A^\dagger} \\ | \\ \boxed{A} \end{array} = \Sigma_k^2 \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

を満たし, Σ_k は正の実数が並び $\text{Tr} \Sigma_k^2 = 1$ となるランク $r_k \leq (d_1 + \dots + d_L)/2$ 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.

Rényi エントロピーによる Schmidt 分解の誤差評価 (Lem. 13) 直前で見たとように, 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

$$\rho_R = \text{Tr}_{\text{left}} \left(\begin{array}{c} \text{---} A_{\bullet} \text{---} \cdots \text{---} A_{\bullet} \text{---} A_{\bullet} \text{---} \cdots \text{---} A_{\bullet} \text{---} \\ \text{---} A_{\bullet}^{\dagger} \text{---} \cdots \text{---} A_{\bullet}^{\dagger} \text{---} A_{\bullet}^{\dagger} \text{---} \cdots \text{---} A_{\bullet}^{\dagger} \text{---} \end{array} \right) = \Sigma_k^2 \begin{array}{c} \text{---} A_{\bullet} \text{---} \cdots \text{---} A_{\bullet} \text{---} \\ \text{---} A_{\bullet}^{\dagger} \text{---} \cdots \text{---} A_{\bullet}^{\dagger} \text{---} \end{array}$$

となる。 ρ_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。右辺は von Neumann エントロピーなので、ボンド次元 D_k によってエントロピーの上限が決まる (cf. Cor. 72)。

$$S = H(\{(\sigma_k)_{\alpha}^2\}_{\alpha=1}^{D_k}) \leq \ln D_k.$$

一般にスピン系の熱力学極限でエンタングルメントエントロピーは発散するが、MPS はボンド次元を定めるとエントロピーに上限を設けることになる。よって素朴には系のサイズ L を大きくするたびにボンド次元も上方修正が必要である。しかし Sec. 1.4 で見たように、1 次元のギャップのある系では基底状態のエンタングルメントエントロピーは熱力学極限をとっても有限値に収束するので、系のサイズの更新のたびにボンド次元を大きくする必要がないと期待できる。より定量的な評価を次節で与える。

2.2.2 ボンド次元の削減による近似

Thm. 14 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を示唆している。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。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ほか、次元が無限大の線形代数は理論的にも扱いづらい。Thm. 10 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も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 OBC-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

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

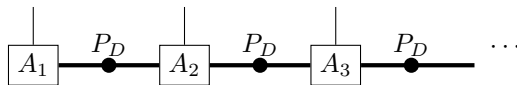
とする。ボンド次元 D の空間への射影

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

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. 10 (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

$$\epsilon_D(k) := \sum_{i=D+1}^{r_k} \sigma_i(k)^2$$

として導入する. ここで r_k は k 番目のボンド次元, $\sigma_i(k)$ はその i 番目に大きな特異値であり, Thm. 14 で導入した $\Sigma_k = \text{diag}(\sigma_1(k), \dots, \sigma_{r_k}(k))$ に対応する.

具体的に誤差を評価する.

$$\| |\psi\rangle - |\psi_D\rangle \|^2 = 1 + \langle \psi_D | \psi_D \rangle - 2 \text{Re} \langle \psi | \psi_D \rangle \leq 2|1 - \langle \psi | \psi_D \rangle|$$

第 2 項は

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

と表される. 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.*³ 左から右へと計算を進めていくことを踏まえると,

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

を定義すれば, $\langle \psi | \psi_D \rangle = Y_L$ 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 Lem. 16 直下で確認したように T_k 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 $\|A\|_{\text{tr}} := \text{Tr} \sqrt{A^\dagger A}$ (cf. appendix A.2.2) で誤差を評価すると見通しが良い.

$$\begin{aligned} |1 - \langle \psi | \psi_D \rangle| &= \left| \begin{array}{c} \text{---} T_1 \text{---} T_2 \text{---} T_3 \text{---} \dots \text{---} T_L \text{---} \\ \text{---} T_1 \text{---} T_2 \text{---} T_3 \text{---} \dots \text{---} T_L \text{---} \end{array} \right. \\ &\quad \left. - \begin{array}{c} \text{---} T_1 \text{---} T_2 \text{---} T_3 \text{---} \dots \text{---} T_L \text{---} \\ \text{---} P_D \text{---} P_D \text{---} P_D \text{---} \dots \text{---} \end{array} \right| \\ &= \|(1\text{st term}) - (2\text{nd term})\|_{\text{tr}} \end{aligned}$$

*³ ϵ_k の定義式に σ^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 1 項を $\prod_{k=1}^L T_k$ と表せば, TP 正写像 T_L によるトレースノルムの縮小性 Thm. 55 を用いることで

$$\begin{aligned}
(\text{LHS}) &\leq \|T_{L-1} \circ T_{L-2} \circ \cdots \circ T_1 - P_D Y_{L-1}\|_{\text{tr}} \\
&= \left\| \prod_{k=1}^{L-1} T_k - P_D \prod_{k=1}^{L-1} T_k + P_D \prod_{k=1}^{L-1} T_k - P_D Y_{L-1} \right\|_{\text{tr}} \\
&\leq \left\| \prod_{k=1}^{L-1} T_k - P_D \prod_{k=1}^{L-1} T_k \right\|_{\text{tr}} + \left\| P_D \prod_{k=1}^{L-1} T_k - P_D Y_{L-1} \right\|_{\text{tr}} \\
&\leq \left\| \prod_{k=1}^{L-1} T_k - P_D \prod_{k=1}^{L-1} T_k \right\|_{\text{tr}} + \|P_D\| \left\| \prod_{k=1}^{L-1} T_k - Y_{L-1} \right\|_{\text{tr}}
\end{aligned}$$

である. ただし, 最後の不等号では (A.2.6) を用いた. 第 2 項についてこの計算を再起的に行うことで,

$$|1 - \langle \psi | \psi_D \rangle| \leq \sum_{k=1}^{L-1} \|P_D\|^{L-1-k} \left\| \prod_{j=1}^k T_j - P_D \prod_{j=1}^k T_j \right\|_{\text{tr}}$$

を得る. トレースノルムは特異値の総和なのでノルム部分はボンドに現れる特異値のうち $D+1$ 番目以降の和で評価できる. 従って $\|P_D\| \leq 1$ を用いれば,

$$|1 - \langle \psi | \psi_D \rangle| \leq \sum_{k=1}^{L-1} \sum_{i>D} \sigma_i(k)^2 = \sum_{k=1}^{L-1} \epsilon_D(k)$$

と評価できる.

さて, MPS は各ボンドにて Schmidt 分解を行うことで構成したので Rényi エントロピーによる Schmidt ランクの評価 (Lem. 13) を適用できる. 誤差として系の長さに依存しない定数 ϵ により $\|\psi\rangle - |\psi_D\rangle\|^2 \leq \epsilon/L$ を満たすようなボンド次元 D を評価する.

$$\begin{aligned}
\|\psi\rangle - |\psi_D\rangle\|^2 &\leq 2L\epsilon_D \leq 2L \left(\frac{1-\alpha}{D} \right)^{(1-\alpha)/\alpha} \exp \left(\frac{1-\alpha}{\alpha} S_\alpha(|\psi\rangle\langle\psi|) \right) \\
&\leq \mathcal{O} \left(L \left(\frac{1-\alpha}{D} \right)^{(1-\alpha)/\alpha} \exp \left(\frac{1-\alpha}{\alpha^4 \Delta E} \right) \right)
\end{aligned}$$

なので, 定数 C により

$$D \geq (1-\alpha) \left(\frac{L^2}{\epsilon} \right)^{\alpha/(1-\alpha)} \exp \left(\frac{1}{\alpha^3 \Delta E} \right)$$

とすれば良い. よって 1 次元系の物理的な基底状態は MPS で L の多項式までのオーダーで効率的に近似できることが分かる.

本節を終える前に, von Neumann エントロピーによるエンタングルメントの面積則だけでは MPS の近似可能性を示すには不十分であることを指摘しておく. [20] では von Neumann エンタングルメントエントロピーの面積則を満たすが, MPS との誤差が $D \simeq \mathcal{O}(e^L)$ となる例が与えられている. さらに Rényi エントロピーの指数 α の値とスケーリングに応じて MPS による近似可能性が Tbl. 2.1 のようになることが示されている.

$S_\alpha \sim$	const	$\log L$	$L^\kappa (\kappa < 1)$	L
$S_{\alpha < 1}$	approximable			
$S \equiv S_1$				
$S_{\alpha > 1}$			inapproximable	

表 2.1: Rényi エンタングルメントエントロピーのスケールリングと MPS による近似可能性. [20] より抜粋. ‘undetermined’ とある部分はスケールリングだけでは MPS による近似可能性が決定できないことを意味する.

2.2.3 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

$$\begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{A_1} \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{A_2} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{A_1} \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{Z} \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{Y} \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{A_2} \\ \hline \end{array}$$

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

$$\cdots A_{k-1} A_k A_{k+1} \cdots \rightarrow \cdots Y_{k-2} A_{k-1} Z_{k-1} Y_{k-1} A_k Z_k Y_k A_{k+1} Z_{k+1} \cdots$$

と変形され, $Y_{k-1} A_k Z_k =: B_k$ 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ようになる.

Thm. 15: 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,

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

とすることで標準形 MPS

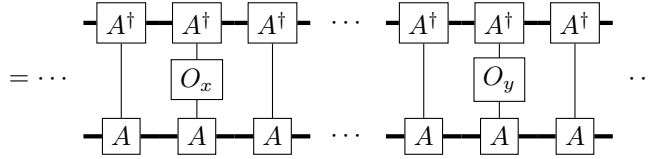
$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \cdots A_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle$$

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.

2.3 転送行列の特性

1 次元 gapped 系の基底状態を記述するという目的で MPS を用いる場合, Chap. 1 で掲げた性質を満たすような MPS テンソルに議論を限定したい. 例えば相関関数は

$$\langle O_x O_y \rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} \sum_{j_1, \dots, j_L} \langle i_1, \dots, i_L | A_{i_1, \dots, i_L}^* (O_x)_{i_x, j_x} (O_y)_{i_y, j_y} A_{j_1, \dots, j_L} | j_1, \dots, j_L \rangle$$

$$= \dots$$


$$(2.3.1)$$

のように書けるが, Thm. 5 で示したように指数関数的に減衰しなければならない. 転送行列に隔てられた相関関数の減衰は, 古典 1 次元 Ising 模型の厳密解を求める際に用いられた転送行列法の議論と酷似している. 1 次元 Ising 模型の転送行列の議論では, 非自明な演算子が作用することで計算に現れる 2 番目に大きな固有値が相関関数の減衰を支配していた.

本節ではこの背景を念頭に, 転送行列の性質を調べる. 明記しない限り本節の内容は境界条件に依存しない. 十分バルクの MPS を取り出すことでテンソルはサイトに依存しないと仮定する. 実際, この事実は次節で扱う並進対称な MPS (TI-MPS) の導出である程度正当化される.

2.3.1 転送行列を念頭においた性質の定義

今後の議論を円滑にするため, あらかじめ以下を示す.

Lem. 16: MPS の転送行列は CP 写像

MPS テンソル $A \in \mathbb{C}^D \otimes (\mathbb{C}^D)^* \otimes \mathbb{C}^d$ の転送行列 $T_A : \rho \mapsto T_A(\rho) = \sum_i (A^i)^\dagger \rho A^i$ は完全正値.

Prf.

任意の半正定値演算子 $\rho \geq 0$ とベクトル $|v\rangle$ に対し,

$$\begin{aligned} \langle v | (T_A \otimes I)(\rho) | v \rangle &= \sum_i \langle v | ((A^i)^\dagger \otimes I) \rho (A^i \otimes I) | v \rangle \\ &= \sum_i ((A^i \otimes I) | v \rangle)^\dagger \rho ((A^i \otimes I) | v \rangle) \geq 0 \end{aligned}$$

であるから, T_A は完全正値. □

これに加え OBC-MPS の右規格化条件 (2.2.1) と合わせると, 標準形では (各ブロックから構成される) 転送行列が CPTP (完全正値かつトレース保存) 写像であることが分かる. ただし以降では転送行列が TP 正写像であることしか使わない.

転送行列の絶対値最大の固有値に興味があるので, appendix A.3.2 で導入した線型写像の特性を応用する.

Def. 3: injective, normal, periodic MPS

MPS テンソル A が

injective: $\sum_i \text{Tr}\{A^i \rho\} |i\rangle = 0$ ならば $\rho = 0$ であること

normal: 転送行列 T_A が primitive (Def. 21) であること

periodic: 転送行列 T_A が既約 (Def. 20) だが primitive でないこと

injective, normal, periodic な MPS テンソルから生成される MPS をそれぞれ injective MPS, normal MPS, periodic MPS と呼ぶ.

写像が単射であることと (制限された空間からの) 逆写像が存在することは同値なので, 以下の定理が成り立つ.

Thm. 17: injective MPS テンソルと逆が存在は等価

MPS テンソル A が injective であることと, A の逆 C が存在して下図の意味で $\sum_i A^i \otimes C^i = \text{Id}$ を満たすことは同値である.

Prf.

■injective \implies 逆が存在 A^i は virtual な行列から physical なベクトルへの線型写像 $\text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{C}^d$ として単射である. したがって逆写像 $C : A(\text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})) \rightarrow \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ が存在して, 任意の $\rho \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ に対し $C \circ A(\rho) = \rho$ を満たす. これはまさしく主張における図式に他ならない.

■逆が存在 \implies injective

□

転送行列の間には (2.3.1) のように観測可能量を挟みたい. on-site な観測可能量であれば (2.3.1) の形で書けるが, 一般に演算子は複数サイトに跨り得る. MPS と同様にして特異値分解により

と書ける. これを一般化して, 行列積演算子を定義する.

Def. 4: MPO

テンソル $X : \mathbb{C}^D \otimes (\mathbb{C}^D)^* \otimes \mathbb{C}^d \otimes (\mathbb{C}^d)^*$ により

$$V_n(X) = \sum_{i_1, \dots, i_n; j_1, \dots, j_n} \text{Tr}[X^{i_1, j_1} \dots X^{i_n, j_n}] |i_1, \dots, i_n\rangle \langle j_1, \dots, j_n|$$

$$= \begin{array}{c} \text{---} \boxed{X} \text{---} \boxed{X} \text{---} \dots \text{---} \boxed{X} \text{---} \\ | \quad | \quad | \quad | \quad | \\ \text{---} \end{array}$$

と書かれる演算子を行列積演算子 (matrix product operator; MPO) と呼ぶ。

MPO の下に伸びる脚を上脚と合わせて physical な脚とすれば MPS と等価である。そのため以下全ての MPS に関する命題は MPO でも成り立つ。

2.3.2 MPS の blocking とテンソル積

appendix A.3.2 の議論から、既約正写像 T の絶対値最大の固有値は複素平面においてスペクトル半径を半径とする円周上に等間隔に分布し、そのスペクトルは $e^{2\pi i k/m}$ の形で書けた (cf. Prop. 64) ので、 T^m はスペクトル半径上にただ一つのスペクトル ρ_T^m を有する。一般にこの最大固有値 ρ_T^m は縮退するが、既約分解しなれば各ブロックで非縮退、すなわち primitive になる。この構成を念頭に置くと、転送行列を m 回作用させれば常に normal MPS に分解できる。

分解については次節に回し、本節では転送行列の再起的作用 T^m に対応する MPS テンソルを定義する。

Def. 5: blocking

MPS tensor B が

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

と表せるとき、 A の blocking であるという。

上述のように転送行列が既約だからといって、その累乗が既約とは限らない。しかし転送行列 T が primitive であれば、 k 回 blocking してもスペクトル半径上に固有値は ρ_T^k しかなく、固有ベクトルも T のスペクトル ρ_T の固有ベクトル $X > 0$ のままである。Thm. 63 (既約正写像のスペクトルに関する条件) と合わせて T^k は primitive であり、転送行列を与える MPS A は normal である。また定義から明らかに injective MPS テンソル A の blocking も injective である。

Cor. 18: blocking は injectivity, normality を保存

- 任意の injective MPS テンソルの blocking は injective
- 任意の normal MPS テンソルの blocking は normal

blocking した MPS の injectivity は

$$\Gamma_L : X \mapsto \sum_{i_1, \dots, i_L=1}^d \text{Tr}[X A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_L}] |i_1, \dots, i_L\rangle$$

が単射であることと等価である。したがって単射な逆写像 $\Gamma_L(\text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})) \rightarrow \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ が定義できるため blocking したテンソル $A^{i_1} \cdots A^{i_L}$ の virtual な脚が $\text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ を張る。逆に $\text{Span}\{A^{i_1} \cdots A^{i_L}\}_{i_1, \dots, i_L=1}^d = \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ のとき, $\Gamma_L(X) = 0$ ならば任意の i_1, \dots, i_L に対し $\text{Tr}[X A^{i_1} \cdots A^{i_L}] = 0$ である。適切に係数 $(c_{i_1, \dots, i_L})_{i_1, \dots, i_L=1}^d$ を選べば

The diagram shows a quantum circuit. At the top is a rectangular box labeled c . Below it, there is a horizontal line representing a quantum register. This line passes through several square gates labeled A . The first gate is connected to the box c by a vertical line. After the first gate, there is an ellipsis \dots , followed by another gate A , which is also connected to the box c by a vertical line. The circuit ends with a final gate A . To the right of the circuit, the expression $= X^\dagger$ is written.

となるように取れるが, このとき $\text{Tr}[XX^\dagger] = 0$ となり $X = 0$ が従う.

Lem. 19: MPS が injective \iff MPS が virtual な空間の完全系を張る

$$\Gamma_L \text{ が単射} \iff \text{Span}\{A^{i_1} \cdots A^{i_L}\}_{i_1, \dots, i_L=1}^d = \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C}) = \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$$

この補題により injective MPS テンソルの virtual な脚が $\text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ 全体を張るので、転送行列は既約になるだろう. 実際, 任意の非自明な射影

$$P = \begin{pmatrix} I_r & \\ & 0 \end{pmatrix}$$

を与えたとき, A^i として非対角成分を持つ行列を取ればある $X \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ (例えば単位行列) に対して

を実現できる. よって転送行列 T_A は既約であり, injective MPS A は normal または periodic である. もし A が periodic であると仮定すると, periodicity $m > 1$ によって T_A^m はスペクトル半径上に固有値 ρ_T^m のみを持つ. が, T_A の peripheral spectrum の固有ベクトルが全て ρ_T^m に対応するので縮退し, Thm. 63 の対偶から T_A^m は既約でない. これは injective MPS テンソルの blocking が injective であること (i.e. 転送行列が既約であること) と矛盾する. よって injective テンソル A は normal である.

逆に, Cor. 18 直下では MPS テンソルを blocking することで injective MPS を構成した. 何度も指摘しているように peripheral spectrum が非自明な場合, blocking しても injective にはならない. では normal MPS テンソルを blocking すれば injective MPS テンソルが得られるのではないか. 転送行列が primitive なので, Thm. 66 (primitive map の同値条件) によりある有限の $L_0 \in \mathbb{N}$ が存在して $T^{L_0} > 0$ となる. このような L_0 回の blocking によりもし $\text{Span}\{A^{i_1} \cdots A^{i_{L_0}} \mid 1 \leq i_1, \dots, i_{L_0} \leq d\} \subsetneq \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ であると仮定すると, ある非自明な射影 $P \neq 0, 1$ が存在して $T(P) = 0$ となり, $T^{L_0} > 0$ と矛盾する. よって $\text{Span}\{A^{i_1} \cdots A^{i_{L_0}} \mid 1 \leq i_1, \dots, i_{L_0} \leq d\} = \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$. すなわち有限な L_0 回の blocking により injective テンソルが得られる. ^{*4}

*4 virtual な脚の自由度が D^2 であるのに対し, physical な脚の自由度は d^L なので, 素朴には $d^L \gtrsim D^2$ すなわち $L \gtrsim 2 \log_d(D)$ 回の blocking で injective になると予想できる. ここでは具体的な回数には触れず $L_0 < \infty$ であることのみを示したが, Hilbert 空間の次元 d やボンド次元 D から求められる具体的な上限は [21] にて与えられている.

Prop. 20: injective \iff normal の blocking

任意の injective MPS テンソルは normal テンソルに比例する. 逆に任意の normal テンソルに対してある $L_0 \in \mathbb{N}$ が存在して, 任意の $L \geq L_0$ 回の blocking により injective テンソルが得られる. このような最小の L_0 を **injectivity length** と呼ぶ.

また右規格化条件 $\sum_i A^i A^{i\dagger} = I$ があるので, 単射な Γ_L に対しさらに MPS テンソルを繋げても virtual な行列空間を狭めることはない. すなわち L 回の blocking で injective ならそれ以上の blocking でも injective である.

Prop. 20 により normal テンソルの熱力学極限は injective になる. MPS により表される純粋状態の内積 $\langle V_L(A) | V_L(B) \rangle$ は異なるテンソル A, B から

$$\langle V_L(A) | V_L(B) \rangle = \begin{array}{c} \cdots - [A^\dagger] - [A^\dagger] - [A^\dagger] - \cdots \\ | \\ \cdots - [B] - [B] - [B] - \cdots \end{array}$$

と構成される. 右規格化条件によって

$$\left\| \begin{array}{c} | \\ [A] \\ | \end{array} \right\|^2 = \left[\begin{array}{c} [A^\dagger] \\ | \\ [A] \end{array} \right] = 1 = \left[\begin{array}{c} [B^\dagger] \\ | \\ [B] \end{array} \right] = \left\| \begin{array}{c} | \\ [B] \\ | \end{array} \right\|^2$$

と規格化されているので, Cauchy-Schwarz の不等式より

$$\left[\begin{array}{c} [A^\dagger] \\ | \\ [B] \end{array} \right] \leq 1$$

である. virtual な脚を開いたときの作用は非自明だが, 転送行列のスペクトル半径も 1 以下に押さえられることが下で示す命題からわかる. 大雑把に $B \neq A$ のときスペクトル半径が 1 未満であるとすれば, 熱力学極限で転送行列の blocking は 0 に収束し, MPS の内積も 0 となる. この直感の正当化が以下の定理である.

Prop. 21: normal MPS は熱力学極限で比例または直交 ([22] Lem A.2)

injectivity length が高々 L_0 の normal MPS テンソル A, B から作られる MPS テンソルは以下のいずれかを満たす.

- 熱力学極限で MPS が直交する. すなわち,

$$\frac{|\langle V_L(A) | V_L(B) \rangle|}{\|V_L(A)\| \|V_L(B)\|} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} 0$$

この場合, A, B は本質的に異なる (essentially different) と呼ばれる.

- 以下の等価な条件を満たす.

- ある $\alpha \in \mathbb{C}$ と可逆行列 X が存在して, $B^i = \alpha X A^i X^{-1}$ を満たし, この X は定数を除いて unique
- $\lambda \in \mathbb{C}$ が存在して, 任意の n で $V_n(A) = \lambda^n V_n(B)$ を満たす
- $n \geq 2L_0 + 1$ が存在して, ある $\lambda \in \mathbb{C}$ にて $V_n(A) = \lambda^n V_n(B)$

Prf.

適切な相似変換によって normal MPS テンソル A, B を規格化して左右の規格化条件 (2.4.3), (2.4.2) を満たすようにとる.

まず,

$$\langle V_L(A) | V_L(A) \rangle = \begin{array}{c} \cdots \text{---} A^\dagger \text{---} A^\dagger \text{---} A^\dagger \text{---} \cdots \\ | \\ \cdots \text{---} A \text{---} A \text{---} A \text{---} \cdots \end{array}$$

であり, T_A が primitive な TP 写像なのでこのスペクトルは $L \rightarrow \infty$ 極限で $\{0, 1\}$ に収束する. 特に固有値 1 は縮退せず, 固有ベクトルは単位行列. 同様にして

$$\langle V_L(A) | V_L(B) \rangle = \begin{array}{c} \cdots \text{---} A^\dagger \text{---} A^\dagger \text{---} A^\dagger \text{---} \cdots \\ | \\ \cdots \text{---} B \text{---} B \text{---} B \text{---} \cdots \end{array}$$

である. ここで, 転送行列の固有方程式

$$\begin{array}{c} \text{---} A^\dagger \text{---} \\ | \\ \text{---} B \text{---} \end{array} X = \lambda X$$

を考察する. T_A の不動点 X_A が正定値であることを用いると

$$\begin{aligned} |\lambda \text{Tr}[X \Sigma_A^2 X^\dagger]|^2 &= \left| \lambda \begin{array}{c} \Sigma_A \text{---} \\ | \\ \Sigma_A \text{---} X^\dagger \end{array} X \right|^2 = \left| \begin{array}{c} \Sigma_A \text{---} A^\dagger \text{---} X \\ | \\ \Sigma_A \text{---} X^\dagger \text{---} B \end{array} \right|^2 \\ &\leq \begin{array}{c} \Sigma_A \text{---} A^\dagger \text{---} X \\ | \\ \Sigma_A \text{---} A \text{---} X^\dagger \end{array} \begin{array}{c} \Sigma_A \text{---} X \text{---} B^\dagger \\ | \\ \Sigma_A \text{---} X^\dagger \text{---} B \end{array} = \begin{array}{c} \Sigma_A^2 \text{---} X \\ | \\ \Sigma_A^2 \text{---} X^\dagger \end{array} = |\text{Tr}[X \Sigma_A^2 X^\dagger]|^2 \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

である. 不等号では Cauchy-Schwarz の不等式を用いたほか, その次の等号では左右の規格化条件を使っている. A が normal であることから Σ_A^2 はフルランクなので $\text{Tr}[X \Sigma_A^2 X^\dagger] > 0$ であり, したがって $|\lambda| \leq 1$. $|\lambda| < 1$ の場合は熱力学極限で $\langle V_L(A) | V_L(B) \rangle \rightarrow 0$ となる.

$|\lambda| = 1$ の場合を考察する. (2.3.2) の Cauchy-Schwarz の不等号が等号になるので, あるスカラー $\alpha \in \mathbb{C}$ が存在して

$$\begin{array}{c} \text{---} A^\dagger \text{---} X \text{---} \\ | \\ \text{---} A \text{---} X^\dagger \end{array} = \alpha \begin{array}{c} \text{---} X \text{---} B^\dagger \text{---} \\ | \\ \text{---} X^\dagger \text{---} B \end{array} = \alpha^* \begin{array}{c} \text{---} X^\dagger \text{---} B \text{---} \\ | \\ \text{---} X \text{---} B^\dagger \end{array}$$

が成り立つ. テンソル B を接続して規格化条件を使うと

$$\lambda X = \begin{array}{c} \text{---} A^\dagger \text{---} X \\ | \\ \text{---} B \end{array} = \alpha \begin{array}{c} \text{---} X \text{---} B^\dagger \\ | \\ \text{---} B \end{array} = \alpha X$$

なので $\lambda^{-1}\alpha = 1$. 特に $|\alpha| = 1$ である.

$$\begin{array}{c} \text{---} A^\dagger \text{---} X \\ | \\ \text{---} A \text{---} X^\dagger \end{array} = \alpha^* \begin{array}{c} \text{---} A^\dagger \text{---} X \\ | \\ \text{---} X^\dagger \text{---} B \end{array} = \alpha^* \lambda X^\dagger X = X^\dagger X$$

で, primitive な転送行列 T_A の不動点が右規格化条件により単位行列で与えられていることから $X^\dagger X = I_D$. もしボンド次元が A, B で異なり $D_a < D_b$ となると仮定すると, A は $D_b - D_a$ 次元の零空間を持つが, これは A が normal である仮定に反する. よって $D_a = D_b$ であり, X はユニタリ. ゆえに $B^i = \alpha X A^i X^{-1}$ が成り立つ. X が定数を除いて unique であることを示す. もし同じ条件 $B^i = \alpha X' A^i X'^{-1}$ を満たす別の可逆行列 X' が存在するとする. すると $X'^{-1}X$ は任意の i に対して A^i , 特に injective MPS テンソル $(A^i)^{L_0}$ と可換である. injective MPS テンソルはボンド空間全体を張るので, Schur の補題より $X'^{-1}X$ は単位行列の定数倍に限られる.

任意の n で $V_n(A) = \lambda^n V_n(B)$ が成り立つことと $B^i = \alpha X A^i X^{-1}$ が成り立つことは

$$\text{---} X \text{---} A^{i_1} \text{---} X^\dagger \text{---} X \text{---} A^{i_2} \text{---} X^\dagger \text{---} = \text{---} X \text{---} A^{i_1} \text{---} A^{i_2} \text{---} X^\dagger \text{---}$$

から明らか. □

これを踏まえ, 上記のように熱力学極限で直交する normal MPS テンソルを「**本質的に異なる MPS テンソル**」と呼ぶ. 適切に規格化すると, 本質的に異なる normal MPS の熱力学極限 $\{\lim_{L \rightarrow \infty} |V_L(A)\rangle\}$ は MPS 空間の正規直交基底を与える.

blocking だけでなく, 異なる MPS テンソルのテンソル積をとっても normality と injectivity は保たれる. テンソル積は MPS テンソルが平行に並んでいる状況に対応する. これは独立な多体系がテンソル積で表されることと整合している.

$$\text{---} A \text{---} \otimes \text{---} B \text{---} = \text{---} \begin{array}{|c|} \hline B \\ \hline A \\ \hline \end{array} \text{---}$$

Prop. 22: テンソル積で normality, injectivity は保存

二つの normal MPS テンソルのテンソル積は normal である. また二つの injective MPS テンソルのテンソル積は injective である.

Prf.

■normal のテンソル積は normal normal tensor A, B のテンソル積 $A \otimes B$ の転送行列は $T_A \otimes T_B$ である. 任意の演算子 T のスペクトルを $\text{Spec}(T)$ と書くと, $\text{Spec}(T_A \otimes T_B) = \text{Spec}(T_A) \cdot \text{Spec}(T_B)$ である. よって $T_A \otimes T_B$ はスペクトル半径に等しい大きさの固有値がただ一つ存在する. 各々の最大固有値の固有ベクトルを X_A, X_B とすれば, 対応する固有ベクトルは $X_A \otimes X_B$ である. $X_A \otimes X_B$ は正定値かつ full rank なので, $T_A \otimes T_B$ は primitive である.

■injective のテンソル積は injective A, B が injective ならばそれぞれの逆 A^{-1}, B^{-1} が存在する.
 $A^{-1} \otimes B^{-1}$ は $A \otimes B$ の逆なので, $A \otimes B$ も injective である. \square

2.3.3 MPS の分解

転送行列は既約分解によって既約な正写像に直和分解できる. 既約な転送行列を与える MPS テンソルは normal または periodic なので, MPS そのものも normal MPS と periodic MPS の線型結合で表されるだろう. この期待を正当化するのが以下の命題である.

Prop. 23: MPS は normal と periodic の線型結合

任意の MPS $V_n(A)$ は normal MPS と periodic MPS の線型結合に分解できる.

$$V_n(A) = \sum_i \mu_i^n V_n(A_i)$$

ここに A_i はそれぞれ normal または periodic である.

Prf.

ボンド次元 D の帰納法で示す.

$D = 1$ の時, A_i は virtual な脚に関してスカラーなので 2 乗すると正になる. 転送行列の固有方程式は

$$\begin{array}{c} \boxed{A^\dagger} \\ | \\ \boxed{A} \end{array} X = \lambda X$$

の形であり, 固有値は $|\lambda| = |A|^2 > 0$ に限られる. よって転送行列のスペクトル半径が正で固有値が縮退しないので A_i は normal テンソルに比例する.

$D < D_0$ まで主張が正しいと仮定する. ボンド次元 D_0 の MPS テンソル A を考える. 転送行列 T_A が既約なら A は periodic または normal MPS テンソルに比例するので可約な場合を考えれば良い. T_A が可約なら, 非自明な射影 P が存在して $A_i P = P A_i P$ とできる. このとき $Q = \text{Id} - P$ を用いて $V_n(A) = V_n(PAP) + V_n(QAQ)$. PAP のボンド次元が $D = \text{rank } P$ になるので, 階数分解 (Prop. 42) によりある $X : \mathbb{C}^{D_0} \rightarrow \mathbb{C}^D$ と $Y : \mathbb{C}^D \rightarrow \mathbb{C}^{D_0}$ が存在して $P = YX$, $XY = \text{Id}_D$ とできる. 結果, 得られる MPS のボンド次元が $D < D_0$ になるので, 帰納法の仮定から主張が従う. \square

既約線型写像の peripheral spectrum は整数乗根で構成された (Prop. 64) ので, 転送行列を複数回かけるとスペクトル半径上の固有値は単一の値に定まる. この転送行列の blocking を既約分解すれば primitive な転送行列に分解できる.

Prop. 24: periodic MPS は blocking で normal の線型結合

A を periodicity K の periodic な MPS テンソルとする. K 回の blocking により $V_n(A)$ は K 個の本質的に異なる normal MPS テンソルに分解できる:

$$V_{Kn}(A) = \sum_{i=1}^K V_n(B_i)$$

ここに B_i は互いに本質的に異なる normal MPS テンソルで, K サイトに作用する. さらに $n \notin K\mathbb{N}$ に対して $V_n(A) = 0$.

Prf. cf. [23] Lem. 5

まず peripheral spectrum として $e^{2\pi i/K} \in U(1)$ を固有値とする固有ベクトル U をとる.

$$\begin{aligned} & \sum_i (A^i - \omega U A^i U^\dagger)^\dagger (A^i - \omega U A^i U^\dagger) \\ &= \begin{array}{c} \text{---} \boxed{A^\dagger} \text{---} \\ | \\ \text{---} \boxed{A} \text{---} \end{array} - \omega^* \begin{array}{c} \text{---} \boxed{U^\dagger} \text{---} \boxed{A^\dagger} \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \boxed{A} \text{---} \boxed{U} \text{---} \end{array} - \text{h.c.} + \begin{array}{c} \text{---} \boxed{U} \text{---} \boxed{A^\dagger} \text{---} \boxed{U^\dagger} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \boxed{U^\dagger} \text{---} \boxed{A} \text{---} \boxed{U} \text{---} \end{array} = 0 \end{aligned}$$

なので, $A^i - \omega U A^i U^\dagger = 0$ が任意の i で成り立つ. したがって

$$\begin{array}{c} | \\ \text{---} \boxed{A} \text{---} \boxed{U} \text{---} \end{array} = \omega \begin{array}{c} | \\ \text{---} \boxed{U} \text{---} \boxed{A} \text{---} \end{array}.$$

U のスペクトルは $\omega = e^{2\pi i/K}$ の累乗に限られるので U のスペクトル分解は $U = \sum_{k=1}^K \omega^k P_k$ と表せ, これを代入すると

$$\sum_k \omega^k A^i P_k = \sum_k \omega^{k+1} P_k A^i = \sum_k \omega^k P_{k-1} A^i$$

となる. 両辺左から P_m , 右から P_n をかけて移項すると $n = m + 1$ の場合だけが残るので, 項ごとに方程式が成立して $P_{k-1} A^i = A^i P_k$ が任意の i, k で成り立つ. このため転送行列 T_A を K 回かけた T_A^K に対して K 個の固有ベクトル P_k は固有値 1 の固定点すなわち injective MPS テンソル $(A^i)^K$ の転送行列の不動点になる. \square

この観察から直ちに次の命題を得る.

Cor. 25: blocking により normal テンソルの線型結合になる

任意の MPS テンソル A に対して $K \in \mathbb{N}$ が存在し, K 回の blocking により $V_{Kn}(A)$ は normal テンソルの線型結合に分解できる.

$$V_{Kn}(A) = \sum_{i=1}^M \mu_i^n V_n(B_i)$$

ここに B_i は互いに本質的に異なる normal MPS テンソルで, K サイトに作用するものである.

Prop. 21 直後で議論したように, 熱力学極限にて本質的に異なる normal MPS テンソルは正規直交基底を

張る. Cor. 25 の分解は基底を定めると一意である. この一意性をより強固に保証するのが以下の定理である.

Prop. 26

$\mu_1, \dots, \mu_r \in \mathbb{C}^\times$ と $\lambda_1, \dots, \lambda_s \in \mathbb{C}^\times$ が任意の $n \in \mathbb{N}$ で

$$\sum_{i=1}^r \mu_i^n = \sum_{j=1}^s \lambda_j^n$$

を満たすならば, $r = s$ であり, またある順列 p によって $\mu_i = \lambda_{p(i)}$ が成り立つ.

Prf. cf. [24] Lem. 9

s_k を n 変数 x_1, \dots, x_n の k 次多項式

$$s_k := x_1^k + \dots + x_n^k$$

とする. また

$$\tau_k := \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_k} x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_k}$$

で定義すると, Newton の恒等式 (Prop. 103) により

$$\begin{aligned} \tau_1 &= s_1, \\ \tau_k &= (-1)^{k-1} \frac{1}{k} (s_k - \tau_1 s_{k-1} + \dots + (-1)^{k-1} \tau_{k-1} s_1) \end{aligned}$$

とできるので, τ_1, \dots, τ_n を s_1, \dots, s_n の多項式として表せる.

新たに変数 X を用意して

$$f(X) := (X - x_1)(X - x_2) \dots (X - x_n)$$

とする.

$$f(X) = X^n - \tau_1 X^{n-1} + \dots + (-1)^n \tau_n$$

だが, f_μ を全ての i で $x_i = \mu_i$ とした式で, f_λ を $x_j = \lambda_j$ とした式で定義すると, 前段落での考察と仮定から f_μ, f_λ は X の多項式として等価になる. μ_i, λ_j は $f_\mu = f_\lambda = 0$ の解なので題意を満たす. \square

2.4 周期境界条件下における並進対称行列積状態

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には周期境界条件 (PBC: periodic boundary condition) が便利である. 本節では周期境界条件下で並進不変な MPS (TI-MPS: translation invariant MPS) について議論する.

2.4.1 TI-MPS の構成

状態の並進を $T|i_1, i_2, \dots, i_L\rangle = |i_L, i_1, i_2, i_3, \dots, i_{L-1}\rangle$ と定義する. 並進不変な状態 $|\psi\rangle = T|\psi\rangle$ について, Sec. 2.2.1 の構成を繰り返せば OBC-MPS の標準形

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle$$

を得られる. 両端のテンソルの位置を明示するために, これを $A_1^{i_1} A_2^{i_2} \dots A_L^{i_L}$ のように記述すると, 並進不変性により

$$\begin{aligned} \sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \dots A_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle &= \sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \dots A_L^{i_L} |i_L, \dots, i_{L-1}\rangle \\ &= \sum_{i_1, \dots, i_L} \text{Tr}[A_L^{i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \dots A_{L-1}^{i_{L-1}}] |i_L, \dots, i_{L-1}\rangle \end{aligned}$$

である. 状態の並進不変性から各サイトの Hilbert 空間は同型なので, i_k の走る値は同じ. よって一般に係数は任意の $k \in \mathbb{Z}$ について $k+L \sim k$ の同一視のもとで $\text{Tr}[A_{k+1}^{i_1} \dots A_{k+L}^{i_L}]$ と書き換えても等価である. ここで $\mathbf{i} = (i_1, i_2, \dots, i_L)$ として

$$B^{\mathbf{i}} := \frac{1}{L^{1/L}} \begin{pmatrix} 0 & A_1^{i_1} & & & \\ & 0 & A_2^{i_2} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & A_{L-1}^{i_{L-1}} \\ A_L^{i_L} & & & & 0 \end{pmatrix}$$

を定義すると, 行列積により

$$(B^{\mathbf{i}})^L = \frac{1}{L} \begin{pmatrix} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \dots A_L^{i_L} & & & \\ & A_2^{i_2} A_3^{i_3} \dots A_1^{i_1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & A_L^{i_L} A_1^{i_1} \dots A_{L-1}^{i_{L-1}} \end{pmatrix}$$

なのでトレースを取れば $\text{Tr}[(B^{\mathbf{i}})^L] = \text{Tr}[A_1^{i_1} A_2^{i_2} \dots A_L^{i_L}]$ となる. これによって

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{i}} \text{Tr}[(B^{\mathbf{i}})^L] |\mathbf{i}\rangle$$

すなわち全ての MPS テンソルが等しい MPS (translation invariant MPS: **TI-MPS**)

$$\begin{array}{c} | \\ \text{---} \boxed{B} \text{---} \boxed{B} \text{---} \dots \text{---} \boxed{B} \text{---} \boxed{B} \text{---} \\ | \end{array} \quad (2.4.1)$$

を用いて状態を記述できる. 両端で virtual な脚を曲げることで周期境界条件を表している.

OBC-MPS に標準形があったように, TI-MPS にも標準形を導入したい. 上述の定義で

$$(B^{\mathbf{i}})^{\dagger} B^{\mathbf{i}} = L^{-2/L} \begin{pmatrix} A_L^{i_L \dagger} A_L^{i_L} & & & \\ & A_1^{i_1 \dagger} A_1^{i_1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & A_{L-1}^{i_{L-1} \dagger} A_{L-1}^{i_{L-1}} \end{pmatrix} = L^{-2/L} I$$

$$B^i \begin{pmatrix} \Sigma_{L-1} & & & \\ & \Sigma_0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \Sigma_{L-2} \end{pmatrix} (B^i)^\dagger = L^{-2/L} \begin{pmatrix} A_L^\dagger \Sigma_{L-1} A_L & & & \\ & A_1^\dagger \Sigma_0 A_1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & A_{L-2}^\dagger \Sigma_{L-2} A_{L-2} \end{pmatrix}$$

となるので, 適切な規格化により左右の規格化条件が得られる. しかし, B^i は行列サイズが $\prod_{k=1}^L \text{rank } A^{i_k}$ という巨大なものであり, 系を効率的に記述できているとはいえないだろう. OBC-MPS の行列サイズが $\text{rank } A^{i_k}$ であったことを考えると, TI-MPS も同程度の行列サイズで記述できると期待される. すなわち, 標準形 MPS としては適切にブロック対角化した形として定義するのが良いだろう.*5 前節で議論したように転送行列の既約分解を念頭に置くと物理的な議論が簡単になる. ブロック対角化は一般に $c \in \mathbb{C}$, $Q \in \text{GL}(D, \mathbb{C})$ により $cQ^{-1}B^iQ$ で実現されるので, (2.4.1) は定数倍しかされず, 状態は変わらない. ここまでを踏まえ, TI-MPS の標準形を定義する.

Thm. 27: TI-MPS の標準形

TI-MPS テンソル $\{A^i\}_i$ は標準形として

$$A^i = \bigoplus_{\alpha} \rho_{\alpha} A_{(\alpha)}^i$$

と表せる. ただし, $\rho_{\alpha} > 0$, $A_{(\alpha)}^i$ は転送行列 $T_{A_{(\alpha)}} : \rho \mapsto \sum_i A_{(\alpha)}^i \rho A_{(\alpha)}^{i\dagger}$ が正写像として既約となる MPS テンソルであり, 右規格化条件

$$\sum_{i_k} A_{(\alpha)}^{i_k} (A_{(\alpha)}^{i_k})^\dagger = \text{---} \boxed{A_{(\alpha)}} \text{---} \boxed{A_{(\alpha)}^\dagger} \text{---} = \text{---} \begin{array}{c} \boxed{A_{(\alpha)}^\dagger} \\ | \\ \boxed{A_{(\alpha)}} \end{array} \text{---} = 1_{r_{k-1}} \quad (2.4.2)$$

および対角行列 $\Sigma_{(\alpha)}$ ($\text{Tr } \Sigma_{(\alpha)}^2 = 1$) による左規格化条件

$$\begin{aligned} \sum_{i_k} (A_{(\alpha)}^{i_k})^\dagger \Sigma_{(\alpha)}^2 A_{(\alpha)}^{i_k} &= \text{---} \boxed{A_{(\alpha)}^\dagger} \text{---} \bullet_{\Sigma_{(\alpha)}^2} \text{---} \boxed{A_{(\alpha)}} \text{---} = \text{---} \bullet_{\Sigma_{(\alpha)}^2} \text{---} \\ &= \Sigma_{(\alpha)}^2 \bullet \begin{array}{c} \boxed{A_{(\alpha)}^\dagger} \\ | \\ \boxed{A_{(\alpha)}} \end{array} = \Sigma_{(\alpha)}^2 \bullet \quad (2.4.3) \end{aligned}$$

を満たす.

Prf.

■右規格化条件を満たすブロック対角化 適切な規格化により転送行列 T_A のスペクトル半径を 1 にできる. また, T_A の不動点として $X \geq 0$ をとる. X が可逆行列のときは $B^i = X^{-1/2} A^i X^{1/2}$ とすれば, $T_B(I) = I$ となって右規格化条件を満たす.

X が不可逆の場合を考える. $X = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|$ と対角化して $\{|\alpha\rangle\}_{\alpha}$ が張る部分空間 R への射影を

*5 左規格化条件で現れる Σ_k が単位行列でない場合, $A_k^\dagger A_k \neq A_k A_k^\dagger$ なので一般に対角化不可能である. B^i は対角化不可能な行列 A_k を用いて構成されているので, 一般に対角化不可能.

$P_R = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|$ とする. もし $A^j |\beta\rangle \notin R$ なる β と j が存在すると仮定すると

$$\begin{aligned} 0 &\leq \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| - \lambda_{\beta} A^j |\beta\rangle\langle\beta| A^{j\dagger} = \sum_{\alpha} \sum_i \lambda_{\alpha} A^i |\alpha\rangle\langle\alpha| A^{i\dagger} - \lambda_{\beta} A^j |\beta\rangle\langle\beta| A^{j\dagger} \\ &= \sum_{(i,\alpha) \neq (j,\beta)} \lambda_{\alpha} A^i |\alpha\rangle\langle\alpha| A^{i\dagger} \end{aligned}$$

となって $X \geq 0$ の対角化に矛盾するので, $A^i P_R = P_R A^i P_R$ が成り立つ. TI-MPS による状態 $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} \text{Tr}_R[A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_L}] |i_1, \dots, i_L\rangle + \sum_{i_1, \dots, i_L} \text{Tr}_{R^\perp}[A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_L}] |i_1, \dots, i_L\rangle \quad (2.4.4)$$

と表せる.

$$\text{Tr}_R[A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_L}] = \text{Tr}[P_R A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_L} P_R] = \text{Tr}[P_R A^{i_1} P_R A^{i_2} P_R \dots P_R A^{i_L} P_R]$$

と書けるので, (2.4.4) 右辺第 1 項は $B_i = P_R A^i P_R$ による MPS である. $A^i P_{R^\perp} = P_{R^\perp} A^i P_{R^\perp} + P_R A^i P_{R^\perp}$ が成り立つので第 2 項は

$$\text{Tr}_{R^\perp}[A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_L}] = \text{Tr}[P_{R^\perp} A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_L} P_{R^\perp}] = \text{Tr}[P_{R^\perp} A^{i_1} P_{R^\perp} A^{i_2} P_{R^\perp} \dots P_{R^\perp} A^{i_L} P_{R^\perp}]$$

と変形ができて, $C_i = P_{R^\perp} A^i P_{R^\perp}$ による MPS である. この結果 $A^i = B^i \oplus C^i$ とブロック対角化できる. 再度規格化, 部分空間への制限を繰り返せば, 右規格化条件 (2.4.2) が成り立つまでブロック対角化できる.

■転送行列の不動点の一意性 上記のように右規格化条件を満たすまでブロック対角化した上で, 転送行列が不動点 $X \neq I$ を持つと仮定する. X はエルミート行列として良い.^a そこで $X = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|$ と対角化すると, $I - X/\lambda_1$ もまた不動点になる. しかしフルランクでないので, 前段落と同様にブロック対角化できてしまう. 結果, 転送行列の不動点は I に限るまでブロック対角化できる.

■左規格化条件 上記のようにブロック対角化したのち, 双対写像 $T_A^*(\rho) = \sum_i A^{i\dagger} \rho A^i$ の不動点 $\rho \geq 0$ がフルランクになるまで同様の手続きを繰り返す. $\rho = U \Sigma^2 U^\dagger$ と対角化して $B^i := U^\dagger A^i U$ と変数変換し, $\rho / \text{Tr}[\rho]$ を ρ と置き直せば, 左規格化条件 (2.4.3) が成り立つ. \square

^a 正写像はエルミート性を保存する Cor. 50 ので, 固有方程式 $T(X) = \lambda X$ のエルミート共役をとることで $T(X^\dagger) = \lambda^* X^\dagger$ が成り立つ. 固有ベクトル $X \neq I$ の固有値 λ が実 (今回は 1) ならエルミート行列 $X + X^\dagger \propto I$ も固有ベクトルになる.

2.4.2 TI-MPS の標準形の一意性

Thm. 15 で見たように OBC-MPS の標準形はユニタリ自由度を除いて一意に定まった. TI-MPS もバルクでは OBC-MPS と等価になると期待すれば, TI-MPS の標準形もユニタリ自由度を除いて一意に定まると考えられる. しかも並進普遍性があるのでユニタリは各ブロックで同一なので, 以下の定理の形で一意性が示されると期待される.

Thm. 28: TI-MPS の標準形の一意性

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} \text{Tr}[A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_L}] |i_1, \dots, i_L\rangle$$

は

- injectivity length L_0
- $L > 2L_0 + D^4$

を満たすボンド次元 D の標準形 TI-MPS とする. $|\psi\rangle$ のボンド次元 D の標準形 TI-MPS がこれとは別に

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} \text{Tr}[B^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_L}] |i_1, \dots, i_L\rangle$$

と与えられるとき, ユニタリ行列 U によって任意の i で $B^i = U A^i U^\dagger$ が成り立つ.

その有用性から **MPS の基本定理**とも呼ばれる.

Lem. 29

T, S は同じベクトル空間で定義された線型写像であり, ベクトル Y_1, \dots, Y_n として

- $T(Y_k) = S(Y_{k+1})$ for $k = 1, \dots, n-1$
- Y_1, \dots, Y_{n-1} は線型独立
- $Y_n = \sum_{k=1}^{n-1} \lambda_k Y_k$

を満たすものが存在すると仮定する. このとき, 方程式 $\lambda_1 x^{n-1} + \dots + \lambda_{n-1} x = 1$ の解 $x \neq 0$ により

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \lambda_1 x \\ \mu_2 &= \lambda_1 x^2 + \lambda_2 x \\ &\vdots \\ \mu_{n-1} &= \lambda_1 x^{n-1} + \dots + \lambda_{n-1} x = 1 \end{aligned}$$

を定義して $Y = \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k Y_k$ とすると, $Y \neq 0$ かつ $T(Y) = S(Y)/x$.

Prf.

具体的計算により

$$\begin{aligned} T(Y) &= \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k T(Y_k) = \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k S(Y_{k+1}) \\ &= S\left(\sum_{k=1}^{n-2} \mu_k Y_{k+1} + \sum_{k=1}^{n-1} \lambda_k Y_k\right) \quad \because \text{definition of } Y_n \\ &= S(\lambda_1 Y_1 + (\lambda_2 + \mu_1) Y_2 + \dots + (\lambda_{n-1} + \mu_{n-2}) Y_{n-1}) \\ &= S\left(\frac{\mu_1}{x} Y_1 + \frac{\mu_2}{x} Y_2 + \dots + \frac{\mu_{n-1}}{x} Y_{n-1}\right) = \frac{1}{x} S(Y). \end{aligned}$$

さらに $\mu_{n-1} = 1$ であることと Y_1, \dots, Y_{n-1} が線型独立であることから, $Y \neq 0$ が成り立つ. \square

Lem. 30

B, C が共に $n \times n$ 行列のとき, 方程式

$$W(C \otimes I) = (B \otimes I)W$$

の解空間は $XC = BX$ の解 S により $S \otimes \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ で与えられる.

Prf.

以下, \mathcal{S} を $XC = BX$ の解空間, \mathcal{W} を $W(C \otimes I) = (B \otimes I)W$ の解空間とする. 任意の $X \in \mathcal{S}$ と $Y \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対して

$$(X \otimes Y)(C \otimes I) = (XC) \otimes Y = (BX) \otimes Y = (B \otimes I)(X \otimes Y)$$

なので $\mathcal{S} \otimes \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \subseteq \mathcal{W}$. 逆に $W \in \mathcal{W}$ を任意に取って $\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ の基底 $\{E_{ij} \mid (E_{ij})_{k,l} = \delta_{i,k} \delta_{j,l}\}_{1 \leq i,j \leq n}$ により

$$W = \sum_{i,j=1}^n X_{ij} \otimes E_{ij} \quad (X_{ij} \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}))$$

と展開すると,

$$\begin{aligned} 0 &= W(C \otimes I) - (B \otimes I)W \\ &= \sum_{i,j=1}^n [(X_{ij} \otimes E_{ij})(C \otimes I) - (B \otimes I)(X_{ij} \otimes E_{ij})] \\ &= \sum_{i,j=1}^n (X_{ij}C - BX_{ij}) \otimes E_{ij} \end{aligned}$$

である. E_{ij} は線型独立なので $X_{ij} \in \mathcal{S}$. よって $\mathcal{W} \subseteq \mathcal{S} \otimes \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$. \square

Prf. Thm. 28 (標準形 TI-MPS の一意性)

まずボンド次元 D の TI-MPS からボンド次元 D^2 の OBC-MPS を構成する. TI-MPS テンソル A^i に対して,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{i_1, \dots, i_L} a_L^{i_1} (A^{i_2} \otimes I) \cdots (A^{i_L} \otimes I) a_R^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle \\ a_L^i &:= (A_{1,1}^i \quad A_{1,2}^i \quad \cdots \quad A_{1,D}^i \quad A_{2,1}^i \quad \cdots) \\ a_R^i &:= (A_{1,1}^i \quad A_{2,1}^i \quad \cdots \quad A_{D,1}^i \quad A_{1,2}^i \quad \cdots)^T \end{aligned}$$

と定義する. B を MPS テンソルとする状態についても同様に構成する. OBC-MPS の行列の一意性 (Thm. 15) により, $D^2 \times D^2$ 次元の可逆行列 W_i によって $W_i(B^i \otimes I) = (A^i \otimes I)W_{i+1}$ が成り立つ. 特に injectivity により端からの寄与を無視できる $L_0 \leq j \leq L - L_0$ の最低 D^4 サイトから W_1, \dots, W_{D^4} をとる.

さて, W_1, \dots, W_{n-1} が線型独立で $W_n = \sum_{k=1}^{n-1} \lambda_k W_k$ となるような n をとる. Lem. 29 のように μ_1, \dots, μ_{n-1} を定義して $W = \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k W_k$ とすると, $W \neq 0$ かつ $W(B^i \otimes I) = (A^i \otimes I)W/x$ が成り立つ. Lem. 30 より, $R \neq 0$ によって $RB^i = A^i R/x$ が成り立つ.

A の左の規格化条件から,

$$\Sigma^2 \begin{array}{c} \boxed{R^\dagger} \text{---} \boxed{B^\dagger} \text{---} \\ | \\ \boxed{R} \text{---} \boxed{B} \text{---} \end{array} = \frac{1}{|x|^2} \Sigma^2 \begin{array}{c} \boxed{A^\dagger} \text{---} \boxed{R^\dagger} \text{---} \\ | \\ \boxed{A} \text{---} \boxed{R} \text{---} \end{array} = \frac{1}{|x|^2} \Sigma^2 \begin{array}{c} \boxed{R^\dagger} \text{---} \\ | \\ \boxed{R} \text{---} \end{array}$$

となる. 最左辺で作用している B の転送行列は TP 写像なので, 両辺の脚をつなげて B の右規格化条件を用いることで $|x| = 1$ を得る. さらに B の右規格化条件から,

$$\begin{array}{c} \text{---} \boxed{A^\dagger} \text{---} \boxed{R^\dagger} \text{---} \\ | \\ \text{---} \boxed{A} \text{---} \boxed{R} \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \boxed{R^\dagger} \text{---} \boxed{B^\dagger} \text{---} \\ | \\ \text{---} \boxed{R} \text{---} \boxed{B} \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \boxed{R^\dagger} \text{---} \\ | \\ \text{---} \boxed{R} \text{---} \end{array}$$

だが, 転送行列 T_A の不動点は I に限るので $RR^\dagger = 1$ となり, R はユニタリ. □

この定理により前節 Sec. 2.3 の議論は十分バルクで境界条件によらず正当化される.

2.5 parent Hamiltonian

MPS は 1 次元 gapped スピン系の基底状態を効率的に表現するために導入した. したがって MPS を与えれば, それを基底状態とする gapped な Hamiltonian を構成できると期待される. 実際その期待は正しく, MPS は parent Hamiltonian と呼ばれる局所 Hamiltonian の基底状態として与えられる. 本節では MPS と parent Hamiltonian の 1:1 の関係性について議論する.

2.5.1 normal MPS の parent Hamiltonian の唯一性

開放端条件

開放端条件にて右標準形の normal MPS $|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} A^{i_1} \dots A^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle$ を与える. ブロッキングにより injective MPS $|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_M} B^{i_1} \dots B^{i_M} |i_1, \dots, i_M\rangle$ としたとき, $h_{i,i+1}$ を部分空間

$$\left\{ \sum_{i_j, i_{j+1}} \text{Tr}[X B^{i_j} B^{i_{j+1}}] |i_j, i_{j+1}\rangle \mid X \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C}) \right\}$$

への直交射影として与える. $H = \sum_{j=1}^{L-1} h_{j,j+1}$ を **parent Hamiltonian** という. 各項が射影なので $H \geq 0$ と gapped は自明.

Thm. 31: normal OBC parent Hamiltonian の基底状態の唯一性

上記のように構成した OBC parent Hamiltonian H の基底状態は $|\psi\rangle$ に限る.

Prf.

$X = 0$ のときは自明なので $X \neq 0$ を仮定する.

$$ECF = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{pmatrix} = |1\rangle\langle 1|, \quad GXH = I_{\text{rank } X} = \sum_{i=1}^{\text{rank } X} |i\rangle\langle i|$$

なる行列 E, F, G, H (特に G, H は正則) が常にとれる. $P_i := \sum_{k \neq 1, i} |k\rangle\langle k| + |1\rangle\langle 1| + |i\rangle\langle i|$ により $\sum_{i=1}^m |i\rangle\langle i| = \sum_{i=1}^m P_i |1\rangle\langle 1| P_i$ となるので, $R_i = G^{-1} P_i E$, $S_i = F P_i H^{-1}$ と取ればよい. \square

Lem. 35

$N \geq 3(b-1)(L_0+1)$ なら $\bigoplus_{j=1} \mathcal{G}_{N,j}$ は直和. すなわち, $w_j \in \mathcal{G}_{N,j}$ が $\sum_{j=1}^b w_j = 0$ を満たすとき, 全ての j で $w_j = 0$ が成り立つ.

Prf.

スピンを $3(b-1)$ 個のブロックに分け, 各ブロックが L_0+1 個以上のスピンを持つとする. $b=2$ から始めて b についての帰納法で示す.

$b=2$ のとき背理法を用いる. すなわち $X, Y \neq 0$ で

$$\sum_{i_1, i_2, i_3} \text{Tr} \left[B_{(1)}^{i_1} X B_{(1)}^{i_2} B_{(1)}^{i_3} \right] |i_1, i_2, i_3\rangle = \sum_{i_1, i_2, i_3} \text{Tr} \left[B_{(2)}^{i_1} Y B_{(2)}^{i_2} B_{(2)}^{i_3} \right] |i_1, i_2, i_3\rangle$$

となるものが存在すると仮定する. ここに $B_{(j)}$ は $A_{(j)}$ の長さ L_0+1 以上のブロッキングであり, 仮定により injective である. Lem. 34 と合わせると, 任意の行列 Z に対して

$$Z = \sum_i \sum_{i_1, i_2} \mu_{i_1}^i \rho_{i_2}^i B_{(1)}^{i_1} X B_{(1)}^{i_2}$$

を満たす複素数 $\mu_{i_1}^i, \rho_{i_2}^i$ が存在する. 同じ複素数を使って

$$W = \sum_i \sum_{i_1, i_2} \mu_{i_1}^i \rho_{i_2}^i B_{(2)}^{i_1} Y B_{(2)}^{i_2}$$

を定義すると, $\sum_{i_3} \text{Tr} \left[B_{(1)}^{i_3} Z \right] |i_3\rangle = \sum_{i_3} \text{Tr} \left[B_{(2)}^{i_3} W \right] |i_3\rangle$ が成り立つ. 左辺は Z を変えることで $\mathcal{G}_{L_0+1, j=1}$ を生成するので $\mathcal{G}_{L_0+1, j=1} \subset \mathcal{G}_{L_0+1, j=2}$ である. 逆も同様に成り立ち, $\mathcal{G}_{L_0+1, j=1} = \mathcal{G}_{L_0+1, j=2}$ となる.

ここで, Hamiltonian を $H_{\mathcal{G}_{L_0+1, j=1}} = H_{\mathcal{G}_{L_0+1, j=2}}$ とすると, normal TI-MPS の parent Hamiltonian の基底状態の一意性 (Thm. 32) により $|\phi_1\rangle = |\phi_2\rangle$ がただ一つの基底状態となって, $|\phi_j\rangle$ がそれぞれ異なるという仮定に矛盾.

b についての帰納法を進める.

$$\mathcal{G}_{3b(L_0+1), j} \ni w_j = \sum_{i_1, \dots, i_{3b}} \text{Tr} \left[B_{(j)}^{i_1} W_{(j)} \cdots B_{(j)}^{i_{3b}} \right] |i_1, \dots, i_{3b}\rangle$$

が $\sum_{j=1}^{b+1} w_j = 0$ を満たすとする. 全ての j で $W_{(j)} = 0$ となることを示したいので, 背理法の仮定として $W_{(j)} \neq 0$ なる j が存在するとする. 任意の j に対し

$$\tilde{w}_j = (\mathbf{1}_{[12]} \otimes h_{\mathcal{G}_{[3], j=b+1}} \otimes \mathbf{1}_{[4 \dots 3b]}) w_j$$

を定義すると,

$$\sum_{j=1}^b \tilde{w}_j = (\mathbf{1}_{[12]} \otimes h_{\mathcal{G}_{[3], j=b+1}} \otimes \mathbf{1}_{[4 \dots 3b]}) (-w_{b+1}) = 0.$$

帰納法の仮定により各 j について $\tilde{w}_j = 0$ である. 一方で \tilde{w}_j を直接計算すると

$$\tilde{w}_j = \sum_{i_1, \dots, i_{3b}} \text{Tr} \left[B_{(j)}^{i_1} W_{(j)} B_{(j)}^{i_2} X_{(j)}^{i_3} B_{(j)}^{i_4} \dots B_{(j)}^{i_{3b}} \right] |i_1, \dots, i_{3b}\rangle$$

なる $X_{(j)}^{i_3}$ が存在する. Thm. 32 より $B_{(j)}$ ($j \neq b+1$) から構成される MPS は基底状態にならないため, $X_{(j)}^{i_3} \neq 0$ である. さらに $B_{(j)}$ の injectivity と Lem. 34 より, $\mathbf{1} = \sum_i \sum_{i_1, i_2} \mu_{i_1}^i \rho_{i_2}^i B_{(j)}^{i_1} W_{(j)} B_{(j)}^{i_2}$ を満たす複素数 $\mu_{i_1}^i, \rho_{i_2}^i$ が存在する. よって任意の i_3 に対し

$$0 = \sum_{i_3, \dots, i_{3b}} \text{Tr} \left[X_{(j)}^{i_3} B_{(j)}^{i_4} \dots B_{(j)}^{i_{3b}} \right] |i_3, \dots, i_{3b}\rangle$$

となる. $B_{(j)}$ の injectivity により $X_{(j)}^{i_3} = 0$ が従い, 矛盾. □

Prf. Thm. 33

$0 = (h \otimes \mathbf{1}) |\phi\rangle = \sum_{j=1}^b (h \otimes \mathbf{1}) |\phi_j\rangle$ である. $(h \otimes \mathbf{1}) |\phi_j\rangle \in (\mathbb{C}^d)^{\otimes N} \otimes \mathcal{G}_{L-N, j}$. しかし Lem. 35 より, もし $(h \otimes \mathbf{1}) |\phi_j\rangle \neq 0$ ならば, この項は他と相殺できないので $\sum_{j=1}^b (h \otimes \mathbf{1}) |\phi_j\rangle = 0$ に矛盾する. よって $(h \otimes \mathbf{1}) |\phi_j\rangle = 0$ が全ての j について成り立ち, 各 $|\phi_j\rangle$ が H の基底状態であることが従う. □

第 3 章

1 次元トポロジカル相と分類

3.1 自明相と SSB 相 - 横磁場強磁性 Ising 模型

本稿で大きく扱う SPT 相との比較のため, まずは自明相および対称性を自発的に破る相 (SSB 相) を理解しなければならない. 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 Λ 各サイトにスピン $1/2$ 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. Hamiltonian は

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

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 σ_i^x の $+1$ 固有状態のテンソル積 $\bigotimes_i |\uparrow\rangle$ のみで縮退しない. 第 1 励起状態は一つのサイトのスピンを σ_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 $M_z = \sum_{i \in \Lambda_s} \sigma_i^z / N$ 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. ^{*1} 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 σ_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 σ_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 Jordan-Wigner 変換による解析解

$|h/J| = \infty$ で常磁性, $|h/J| = 0$ 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. [27] 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.

^{*1} on-site のユニタリで表される対称性演算子 $U = e^{i\alpha Q}$ ($Q = Q^\dagger$, $\alpha \in \mathbb{C}$) の秩序変数は Q と非可換な演算子 Φ を用いて $\langle [Q, \Phi] \rangle$ と構成できることが一般に知られている [26]. この模型の場合, 対称性は $U_X = \prod_i \sigma_i^x \propto \exp(\sum_i i\pi \sigma_i^x / 2)$ により生成されるので, σ_i^x と非可換な演算子として σ_i^z を秩序変数に取ればよい.

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

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

と書き直す。^{*2} $\sigma = 2s$ 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 $\sigma_j^x = (\sigma_j^+ + \sigma_j^-)/2 = (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{j-1}}(c_j^\dagger + c_j)$ の形で書けるので、Hamiltonian は

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

の 2 次形式になる。^{*3}

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、

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

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

^{*3}

$$H = \sum_{j \in \Lambda_s} \left(-J(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) - \mu \left(c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} \right) + \Delta(c_j c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j^\dagger) \right)$$

は Kitaev 鎖 [28] として知られる。

に値をとる. Hamiltonian の Fourier 空間での表現は

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

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

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

である. 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*4

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

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.

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

*4 $k = 0, \pi$ 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.

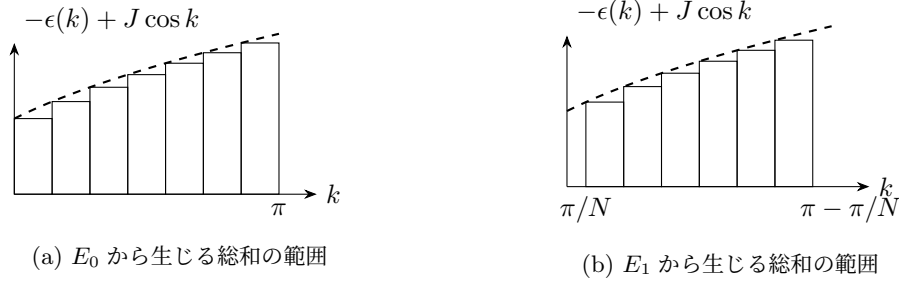


図 3.1: (3.1.1) の計算で生じる総和が表す面積領域

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. 3.1 に示す通りである. よって $L \rightarrow \infty$ の極限で

$$\begin{aligned} E_1 - E_0 &\rightarrow -2J + 2 \left(\frac{N}{2\pi} \int_0^\pi dk \epsilon(k) - \frac{N}{2\pi} \int_{\pi/N}^{\pi-\pi/N} dk \epsilon(k) \right) = -2J + \frac{N}{\pi} \left(\int_0^{\pi/N} + \int_{\pi-\pi/N}^\pi \right) dk \epsilon(k) \\ &\sim -2J + \frac{N}{\pi} \cdot \frac{\pi}{N} (\epsilon(0) + \epsilon(\pi)) = -2J + |J + h| + |J - h| \end{aligned}$$

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 $\hat{n}_0^\dagger |0\rangle$ 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.

3.2 Landau パラダイムによる相の分類

物性物理学においては, 対象物を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 [1], 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. 潜在的な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, 数理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.

対称性演算子は Hamiltonian と可換な演算子として定義される。対称性演算子どうしの和や積も Hamiltonian と可換なので、対称性演算子全体は代数をなす。この代数を \mathcal{C} で表したとき、対称性演算子は $a \in \mathcal{C}$ ごとに U_a と対応し、 \mathcal{C} の代数に合わせて $U_a U_b = U_{ab}$, $U_a + U_b = U_{a+b}$ を満たす。演算子は Hilbert 空間 \mathcal{H} 上の線形作用素なので $U_\bullet : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$ は準同型すなわち表現である。対称性の自発的破れ (SSB: spontaneous symmetry breaking) により相を分類する Landau パラダイムでは、一般に \mathcal{C} は群による代数 Vec_G である。Thm. 73 (群の線形表現のユニタリ化) により群の表現では常にユニタリ表現を取ることができるので、以下 U_g はユニタリとする。

対称性を自発的に破る相の基底状態 $|\text{SSB}\rangle$ は対称性のうち一部を守り一部を破るので、部分群 $H = \{h \in G \mid U_h |\text{SSB}\rangle \propto |\text{SSB}\rangle\} \subset G$ が定義できる。 $h \in H$ は任意の $g \in G$ を作用させた $g |\text{SSB}\rangle$ にも自明に作用することを要請すると、 $hg \in gH$ でなければならない。すなわち H は G の正規部分群に限られる。

相転移前後では物理量が不連続に変化する。適切な規格化によって対称性の高い相では期待値が 0、低い相では非ゼロの値を取る物理量 (秩序変数) $\mathbf{O} = (O_1, O_2, \dots, O_n)$ を与える。対称性変換によって $U_g \mathbf{O} U_g^{-1} =: \mathbf{O} D(g)$ と変換を受けるが、

$$\begin{aligned} U_g U_h \mathbf{O} U_h^{-1} U_g^{-1} &= U_g \mathbf{O} D(h) U_g^{-1} = U_g \mathbf{O} U_g^{-1} D(h) = \mathbf{O} D(g) D(h) \\ &= U_{gh} \mathbf{O} U_{gh}^{-1} = \mathbf{O} D(gh) \end{aligned}$$

なので \mathbf{O} は G の線形表現 D に従う。 n 個の秩序変数の入れ替えに対応する $D \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ と、その各成分が作用する Hilbert 空間内の演算子 $U_g \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ は可換であることに注意せよ。 D の既約分解は線形変換 $D \mapsto T D T^{-1}$ で与えられるので、基底状態の対称性を表す正規部分群 N , Hamiltonian H , 秩序変数 \mathbf{O} , 基底状態 $|\text{SSB}\rangle$ もそれぞれ T により変換することで、 D を既約表現としても一般性を失わない。そのため自発的に対称性を破る基底状態の分類は Hamiltonian の対称性 G , 基底状態の対称性 H , 秩序変数の既約表現 D の 3 つにより分類される。なお次の補題により G がコンパクト群なら正規部分群 H の情報は D に含めることができる。

Lem. 36

G をコンパクト群としたとき、

- 正規部分群 N
- G/N の既約表現のリフトの集合、すなわち $\pi : G \rightarrow G/N$ を通じて

$$S_N = \{\tilde{\rho} \circ \pi \mid \tilde{\rho} \in \text{Irr}(G/N)\}$$

は 1:1 に対応する。

ここで $S_N \subset \text{Irr}(G)$ に注意せよ。実際 $\tilde{\rho} \circ \pi$ が可約表現であると仮定すると、非自明な部分空間 W が存在して

$$\tilde{\rho}(gN)w = (\tilde{\rho} \circ \pi)(g)w \in W, \quad \forall g \in G, w \in W$$

が成り立つが、これは $\tilde{\rho}$ が既約であることと矛盾する。

Prf.

$\mathcal{N} = \{N \triangleleft G\}$ と $\mathcal{S} = \{S_N \mid N \in \mathcal{N}\}$ とし, $\Phi: \mathcal{N} \rightarrow \mathcal{S}$ を

$$\Phi(N) = \{\rho \in \text{Irr}(G) \mid N \subset \ker \rho\}$$

により, $\Psi: \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{N}$ を

$$\Psi(S) = \bigcap_{\rho \in S} \ker \rho$$

により定める. by definition で

$$\Psi(\Phi(N)) = \bigcap_{\rho \in \text{Irr}(G); N \subset \ker \rho} \ker \rho \supset N.$$

剰余群 $Q = G/N$ の正則表現 (Def. 28) D_{reg}^Q は忠実なので, これを G へリフトした表現 D は $\ker D = N$ を満たす. D を既約分解して

$$D \simeq \bigoplus_{\rho \in \text{Irr}(G)} m_\rho \rho$$

としたとき, $D(g) \neq \mathbf{1}$ ならば少なくとも一つの $\rho(g) \neq \mathbf{1}$ が存在するので $g \notin \bigcap_{\rho \in S} \ker \rho$. これにより $\Psi(\Phi(N)) \subset N$ である. よって $\Psi(\Phi(N)) = N$ が成り立つ. \square

以上により, Landau パラダイムによる相の分類問題は Hamiltonian の対称性の既約線形表現の分類問題に帰着する. 具体的な分類方法は appendix C.1.3 を参照せよ.

3.3 AKLT 模型

前節までは対称性の自発的破れにより相を分類した. 本章では対称性を自発的に破らないにも関わらず非自明な相分類が存在することを示す. その中でも物理的に理解が容易な例として, AKLT 模型 [29, 30] を紹介する.

1 次元格子 Λ_s 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

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

とする. 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, すなわち自明状態に似ている. しかしスピン 1 の模型であるにもかかわらず開放端条件では端にスピン 1/2 の自由度が現れる点でこれまでの理論と大きく異なっており, 注目に値する.

本節は主に [31] を参考にした。

3.3.1 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

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

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 つの点是对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。一般に隣接サイトの間でスピンシングレットを組み、さらにサイト内で線型操作をすることで得られる状態を valence bond solid (VBS) 状態と呼ぶ。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

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

により定義し、これにより

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

と書ける. スピン 1 の隣接 2 サイトの合成スピン (4 つのスピン 1/2 の合成スピン) は, スピン 1/2 シングレットが 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 [31, 32] に従う.

Lem. 37: 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.

Prf.

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

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

と書けて, 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

3.3.2 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 [33] 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 ε 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 $H_{\text{AKLT}} = \sum_{i \in \Lambda_s} P_{i,i+1}$ 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 $P_{i,j}^2 = P_{i,j}$ を踏まえると

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

ここに

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

とした. 距離が 2 以上離れた射影演算子は可換なので C_r は射影演算子であり, $C_r \geq 0$ が保証される.

$1 < l < L/2$ と $x = 1, 2, \dots, L$ に対して

$$h_{x,x+l} := \sum_{j=1}^l P_{x+j-1,x+j}$$

を与えると, これは $\{x, \dots, x+l\}$ 上の OBC AKLT 模型の Hamiltonian である. 特に

$$\sum_{x=1}^L h_{x,x+l} = l H_{\text{AKLT}}$$

が成り立つ.

$$\begin{aligned}
h_{x,x+l}^2 &= h_{x,x+l} + \sum_{j=1}^{l-1} (P_{x+j-1,x+j}P_{x+j,x+j+1} + P_{x+j,x+j+1}P_{x+j-1,x+j}) \\
&\quad + \sum_{r=2}^{l-1} \sum_{j=1}^{l-r} 2P_{x+j-1,x+j}P_{x+j+r-1,x+j+r}
\end{aligned}$$

であり, 右辺の後ろ 2 項を x でたしあげると

$$\begin{aligned}
\sum_{x=1}^L (P_{x+j-1,x+j}P_{x+j,x+j+1} + P_{x+j,x+j+1}P_{x+j-1,x+j}) &= \sum_{y=1}^L (P_{y,y+1}P_{y+1,y+2} + P_{y+1,y+2}P_{y,y+1}) = C_1 \\
\sum_{x=1}^L 2P_{x+j-1,x+j}P_{x+j+r-1,x+j+r} &= 2 \sum_{y=1}^L P_{y,y+1}P_{y+r,y+r+1} = C_r
\end{aligned}$$

であるから,

$$\sum_{x=1}^L h_{x,x+l}^2 = l H_{\text{AKLT}} + (l-1)C_1 + \sum_{r=1}^{l-1} (l-r)C_r$$

である. 両辺を $l-1$ で割ると

$$\begin{aligned}
\frac{1}{l-1} \sum_{x=1}^L h_{x,x+l}^2 &= \frac{1}{l-1} H_{\text{AKLT}} + H_{\text{AKLT}} + C_1 + \sum_{r=2}^{l-1} \frac{l-r}{l-1} C_r \\
&\leq \frac{1}{l-1} H_{\text{AKLT}} + H_{\text{AKLT}} + \sum_{r=1}^{L/2} C_r \quad \because \frac{l-r}{l-1} \leq 0 \text{ for } r \geq 2 \\
&= \frac{1}{l-1} H_{\text{AKLT}} + H_{\text{AKLT}}^2 \quad \because (3.3.2)
\end{aligned}$$

	α_i	α_{i+1}	合成スピン 1 の S^z 固有値	係数
$\begin{smallmatrix} 2 & & 1 \\ \uparrow & \uparrow \\ - & - \end{smallmatrix}$	2	1	+1	$-1/\sqrt{2} \times 1 = -1/\sqrt{2}$
$\begin{smallmatrix} 1 & & 2 \\ \downarrow & \downarrow \\ - & - \end{smallmatrix}$	1	2	-1	$1/\sqrt{2} \times 1 = 1/\sqrt{2}$
$\begin{smallmatrix} 1 & & 1 \\ \downarrow & \uparrow \\ - & - \end{smallmatrix}$	1	1	0	$1/\sqrt{2} \times 1/\sqrt{2} = 1/2$
$\begin{smallmatrix} 2 & & 2 \\ \uparrow & \downarrow \\ - & - \end{smallmatrix}$	2	2	0	$-1/\sqrt{2} \times 1/\sqrt{2} = -1/2$

表 3.1: ボンドの状態とスピン 1/2 の対称化・係数. 係数は $\alpha_i = 1$ の係数 $1/\sqrt{2}$ または $\alpha_i = 2$ の係数 $-1/\sqrt{2}$ と, スピン 1 を対称化する際に現れる (3.3.1) の係数を掛け合わせたものである.

である. したがって

$$H_{\text{AKLT}}^2 \geq \frac{1}{l-1} \sum_{x=1}^L h_{x,x+l}^2 - \frac{1}{l-1} H_{\text{AKLT}}.$$

ここで $h_{x,x+l}$ の第 1 励起状態のエネルギーを ε_l とすると $h_{x,x+l}^2 \geq \varepsilon_l h_{x,x+l}$ であるから,

$$H_{\text{AKLT}}^2 \geq \frac{1}{l-1} \varepsilon_l \sum_{x=1}^L h_{x,x+l} - \frac{1}{l-1} H_{\text{AKLT}} = \frac{l}{l-1} \left(\varepsilon_l - \frac{1}{l} \right) H_{\text{AKLT}}$$

である. $l = 5$ のとき $\varepsilon_5 \simeq 0.398451 > 1/l$ であることが数値的に確かめられており [33], AKLT 模型は励起ギャップを持つことが従う.

3.3.3 MPS による基底状態の表現

模型が励起ギャップを持つことが示されたので, 基底状態が行列積状態 (cf. Chap. 2) で表現できる. 各ボンド $(i, i+1)$ のスピン 1/2 シングレットには $|\uparrow\rangle_{i,R} |\downarrow\rangle_{i+1,L} / \sqrt{2}$ と $-\downarrow\rangle_{i,R} |\uparrow\rangle_{i+1,L} / \sqrt{2}$ の二つの項があるので, ボンド次元を 2 として前者を $\alpha_{i+1} = 1$, 後者を $\alpha_{i+1} = 2$ と表す. サイト i にて二つのシングレット α_i, α_{i+1} を対称化するにあたり, Tbl. 3.1 に示す 4 つの構成が考えられる. この係数を行列 $A_{\alpha, \alpha'=1,2}^{S^z=0, \pm 1}$ にまとめると

$$A^{+1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad A^0 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}, \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となるので, AKLT 状態の MPS は

$$|\text{AKLT}\rangle = \sum_{S_1^z, \dots, S_L^z} \text{tr} \left(A^{S_1^z} A^{S_2^z} \dots A^{S_L^z} \right) |S_1^z\rangle \otimes |S_2^z\rangle \otimes \dots \otimes |S_L^z\rangle$$

と表現できる.

3.3.4 基底状態における長距離秩序の不在と string order parameter

基底状態が単一で励起ギャップがあるため, 基底状態は模型の対称性を全て保ち, Thm. 5 により 2 点相関関数 $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ は指数関数的に減衰することが保証されている. 対称性を自発的に破る相では局所演算子が非ゼロ

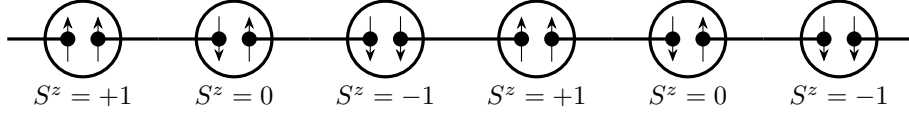


図 3.2: 基底状態における S^z 固有値の配位. ボンドの両側で $1/2$ スピンが反転するため, $S^z = +1$ 同士や $S^z = -1$ 同士が $S^z = 0$ を挟んでも隣接することはない.

の値を取る秩序変数となるため 2 点相関関数も有限値を持つ (長距離秩序がある) が, AKLT 模型の基底状態ではこのような長距離秩序は許されない.

ただし, 局所演算子ではない演算子によって長距離秩序を定めることが可能であることは特筆すべきである. 2 サイトの合成スピンの 2 にならないので, スピン $S^z = +1$ が 2 つ隣接したり $S^z = -1$ が 2 つ隣接したりすることはない. $S^z = 0$ を挟んでも $S^z = +1$ は連続しない (Fig. 3.2). つまり $S^z = 0$ を無視すると反強磁性的な秩序が存在することになる. この秩序は **string order parameter**

$$O_{i,j}^{\text{str}} := \left\langle S_i^z (-1)^{\sum_{k=i+1}^j S_k^z} S_j^z \right\rangle$$

により検出できる.

実際に AKLT 模型の基底状態において string order parameter を計算する. 転送行列は

$$\begin{aligned} \begin{array}{c} \text{---} A^* \text{---} \\ | \\ \text{---} A \text{---} \end{array} &= \sum_{S^z=0,\pm 1} A^{S^z} \otimes (A^{S^z})^* = \begin{pmatrix} 1/4 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/4 \end{pmatrix} \\ \begin{array}{c} \text{---} A^* \text{---} \\ | \\ \begin{array}{c} S^z \\ | \\ A \end{array} \end{array} &= \sum_{S^z=0,\pm 1} S^z A^{S^z} \otimes (A^{S^z})^* = \begin{pmatrix} 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{array}{c} \text{---} A^* \text{---} \\ | \\ \begin{array}{c} (-1)^{S^z} \\ | \\ A \end{array} \end{array} &= \sum_{S^z=0,\pm 1} (-1)^{S^z} A^{S^z} \otimes (A^{S^z})^* = \begin{pmatrix} 1/4 & -1/2 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と計算される. ただし計算の便益のため, 各行・各列は先頭から順に $(1, 1)$, $(2, 2)$, $(1, 2)$, $(2, 1)$ の成分に対応している. また Hermite 共役ではなく複素共役をとっているのは, 右に伸びた足をつなげたときにこれまでの記法

$$\begin{array}{c} \text{---} A^\dagger \text{---} \\ | \\ \text{---} A \text{---} \end{array} = \text{---} A \text{---} A^\dagger \text{---} = \sum_{S^z} A^{S^z} (A^{S^z})^\dagger$$

と整合させるためである。以上を踏まえると、

$$\langle O_{i,j}^{\text{str}} \rangle = - \frac{\text{Tr} \left[\begin{pmatrix} 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/4 & -1/2 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix}^{j-i-1} \begin{pmatrix} 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right]}{\text{Tr} \begin{pmatrix} 1/4 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/4 \end{pmatrix}^{j-i+1}} = -\frac{4}{9}$$

を得る。

3.3.5 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 相の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. 37 (AKLT 模型の基底状態の形状) により基底状態は

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

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 つずつ残っており、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で、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 模型は純粋にスピン 1 の系として定義されていた。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、より一般には模型を置く空間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。物理現象が秩序変数で検出できる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。

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、Chap. 5 で応用するクラスター模型を導入する。

1 次元格子 Λ 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 $i \in \Lambda_s$ 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。

クラスター模型を

$$H_{\text{cluster}} := - \sum_{i \in \Lambda_s} Z_{i-1} X_i Z_{i+1} \quad (3.4.1)$$

で定義する。各項は 2 乗すると 1 となるので固有値は ± 1 。また各項は互いに交換する。

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

従って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 $2^{|\Lambda_s|}$ であるのに対し、各項 ± 1 固有状態が張る空間の次元も $2^{|\Lambda_s|}$ 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く、したがって対称性も破らない。またエネルギーギャップは $\Delta E = 2$ 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 $\Lambda_s = \{1, 2, \dots, L\}$ 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、対称性による端への作用を考える。AKLT 模型では Hamiltonian が持つ $\text{SO}(3)$ 対称性の作用により端に現れる $1/2$ スピンは非自明な射影表現 (Def. 30) になっている。実際、 $\text{SO}(3)$ では π 回転操作を 2 回行くと恒等変換に一致するが、スピン $1/2$ の π 回転を 2 回行くと $e^{i\pi S^z} e^{i\pi S^z} = -1 \neq 1$ となる。非自明な乗数系に従う射影表現は必ず 2 次元以上 (Cor. 84 の対偶) なので、端に現れる自由度が縮退することが保証される。クラスター模型の場合も同様に、対称性の作用を考えよう。端のサイト番号が奇数のとき、 U_{odd} は X と作用し、 U_{even} は Z と作用するので、 $U_{\text{odd}} U_{\text{even}}$ と $U_{\text{even}} U_{\text{odd}}$ の作用は $XZ = -ZX$ となり交換しない。つまり端に現れる自由度は非自明な射影表現を与えているため、縮退が保証される。

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 AKLT 模型と同様の現象である。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。

クラスター模型が AKLT 模型と同様のトポロジカルネスを持つことは、string order parameter の存在からも確認できる。

$$O_{i,j}^{\text{loc}} := Z_i Z_j, \quad O_{i,j}^{\text{str}} := Z_i Z_{i+1} \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} X_k \right) Z_{j-1} Z_j$$

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

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

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

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

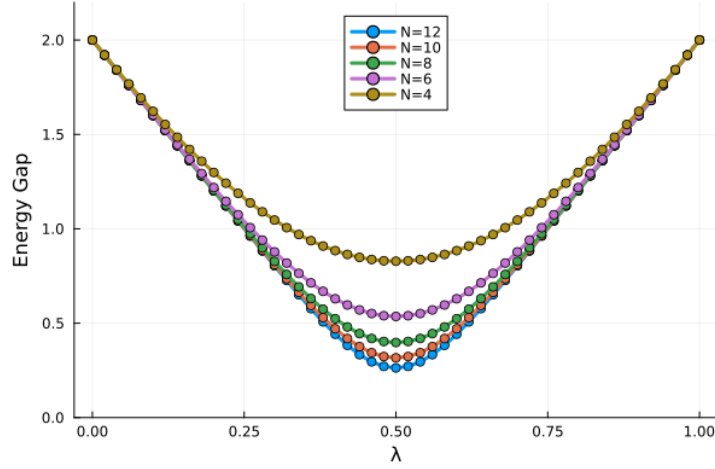


図 3.3: クラスター模型と自明な模型を連続的に繋ぐ Hamiltonian $H(\lambda)$ のギャップの λ 依存性. システムサイズ $L = 4, 6, \dots, 12$ の厳密対角化で求めた. システムサイズの増大に伴い $\lambda = 1/2$ 付近でギャップが閉じつつあることがわかる.

と, i, j の距離に依存しない. これは AKLT 模型における string order parameter と同様の振る舞いである.

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

$$H(\lambda) = -\lambda \sum_{i \in \Lambda_s} X_i + (1 - \lambda) H_{\text{cluster}}$$

を与える. $\lambda = 0$ で自明な Hamiltonian, $\lambda = 1$ 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っていると理解される. 開放端条件の縮退度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 Fig. 3.3 のようになり, $\lambda = 1/2$ にギャップレス点があることを示唆している.

3.4.1 非可逆対称性

クラスター模型 (3.4.1) は

$$X_j \rightarrow Z_{j-1} Z_{j+1}, \quad Z_{j-1} Z_{j+1} \rightarrow X_j$$

の変換でも不変である. もしこの変換がユニタリー変換 \tilde{U} で実現されると仮定すると,

$$\tilde{U} U_{\text{odd}} \tilde{U}^\dagger = \prod_{i \in \Lambda_s: \text{odd}} Z_{i-1} Z_{i+1} = 1$$

となり, ユニタリ変換の逆変換の存在に矛盾する. 具体的な変換は

$$\begin{aligned} TX_i T^{-1} &= X_{i+1}, & TZ_i T^{-1} &= Z_{i+1}, & T^L &= 1, \\ D^e &:= e^{2\pi i L/16} \frac{1 + U_{\text{even}}}{\sqrt{2}} \frac{1 - iX_L}{\sqrt{2}} \frac{1 - iZ_L Z_{L-2}}{\sqrt{2}} \dots \frac{1 - iZ_4 Z_2}{\sqrt{2}} \frac{1 - iX_2}{\sqrt{2}}, \\ D^o &:= e^{2\pi i L/16} \frac{1 + U_{\text{odd}}}{\sqrt{2}} \frac{1 - iX_{L-1}}{\sqrt{2}} \frac{1 - iZ_{L-1} Z_{L-3}}{\sqrt{2}} \dots \frac{1 - iZ_3 Z_1}{\sqrt{2}} \frac{1 - iX_1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

によって $D = TD^e D^o$ と構成できることが知られており [34, 35], それぞれ

$$\begin{aligned} TD^e &= D^o T, & TD &= DT, & DX_j &= Z_{j-1} Z_{j+1} D, & DZ_{j-1} Z_{j+1} &= X_j D \\ D^2 &= 1 + U_{\text{odd}} + U_{\text{even}} + U_{\text{odd}} U_{\text{even}}, & U_{\text{odd}} D &= D U_{\text{odd}} = U_{\text{even}} D = D U_{\text{even}} = D \end{aligned}$$

を満たす $\text{Rep}(D_8)$ の代数構造を組んでいる (cf. appendix C.1.4). さらに $U_{\text{odd}}, U_{\text{even}}$ の二つの対称性 $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ を破るような状態に作用すると 0 を返すため, 非可逆対称性と呼ばれる.

3.5 gapped なトポロジカル相の物理的定義

相転移は物理量の不連続な変化として定式化される. 縮退度は観測可能量の形で表すことは容易でないが, ここでは物理量として包含してしまおう. 相転移を定式化するには, まず二つの系, すなわち二つの Hamiltonian H_0, H_1 が同じ相に属するとはどういうことかを定義すると見通しが良い. 今我々は gapped な系に興味があるので, H_0, H_1 はともに励起ギャップがあると仮定する. 連続パラメーターの変化でこの二つの Hamiltonian を接続する Hamiltonian の族 $\{H_s\}_{0 \leq s \leq 1}$ を与える. この連続的なパラメーター変化の中で

- 物理量の不連続性が発生しない (特異点を持たない)
- 励起ギャップが閉じない

の両方を満たせば, H_0, H_1 は同じ相に属すると言っていいだろう.

経験的に, gapped Hamiltonian の相転移点では相関関数の冪減衰が認められる. Thm. 5 により gapped 系なら相関関数は指数減衰するので, 相転移点ではギャップレスになる. [36] ではこの経験を裏付ける事実として, $\{H_s\}$ が常に gapped なら, 任意の k -local な物理量 O の “時間発展” $O(s)$ が $(k+l)$ -local な物理量で s について滑らかに近似し続けられることが示されている. ここに l は相関関数の指数減衰の典型的な長さと同スケールであり, この手法は準断熱接続 (quasi-adiabatic continuation) として知られる. すなわち, $\{H_s\}_{0 \leq s \leq 1}$ が常に gapped なら, 任意の局所物理量 O の期待値 $\langle O \rangle_s$ は s について滑らかに変化し, 物理量の不連続性は発生しないと期待できる. そこで, gapped 相を以下のように定義する [37]. Fig. 3.4 青線も参照せよ.

Def. 6: gapped 相

gapped Hamiltonian H_0, H_1 が同じ相に属するとは, $s \in [0, 1]$ に関して連続的に変化する常に gapped な Hamiltonian の族 $\{H_s\}_{0 \leq s \leq 1}$ が存在し, $H_{s=0} = H_0, H_{s=1} = H_1$ を満たすことである.

具体的な相の記述に取り掛かる前に, gapped 相の定義と等価な概念として局所ユニタリ変換を導入する [37]. 局所ユニタリ変換を k -local な Hamiltonian $\{\tilde{H}(s)\}_{0 \leq s \leq 1}$ による時間発展

$$U(s) := \mathcal{T} \exp \left[-i \int_0^s dt \tilde{H}_t \right]$$

として定義する. 一般に \tilde{H}_s は Def. 6 で与えた H_s とは異なり, 準断熱接続により与えられる. 同じ gapped 相に属する Hamiltonian の間にはこうして局所ユニタリ変換を構成できる. 逆に, 二つの Hamiltonian H_0, H_1 が局所ユニタリ変換 $U(s)$ によって接続できるとき, H_0, H_1 は同じ gapped 相に属する. 実際, 間を接続する Hamiltonian の族を $H(s) = U(s) H_0 U^\dagger(s)$ で与えると, $U(s)$ は準断熱接続で構成されるので, $H(s)$ は常に gapped な k -local Hamiltonian である. したがって, (対称性を無視して) 同じ gapped 相に属することと局所ユニタリ変換で繋がられることは等価である.

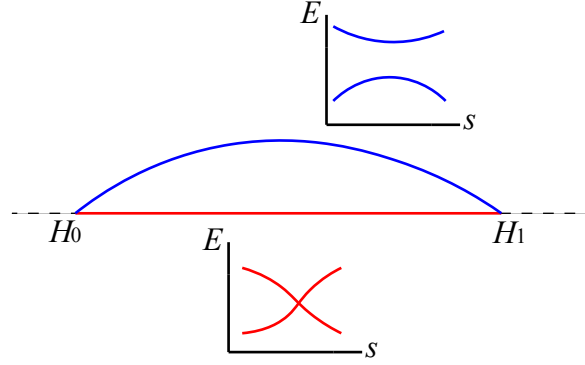


図 3.4: gapped Hamiltonian H_0, H_1 を繋ぐ経路. 青の経路では常に励起ギャップが閉じないため, H_0, H_1 は同じ相に属する. しかし対称性を制限すると (e.g. 破線の上に経路を制限すると) 必ず励起ギャップが閉じる点が存在する場合は, 対称性に保護されたトポロジカル相 (SPT 相) として異なる相に属する.

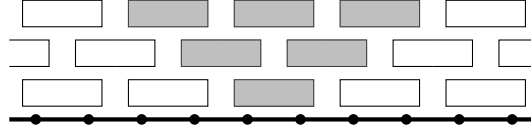


図 3.5: 局所ユニタリ変換の量子回路による近似. 各黒丸は格子サイトを表し, 四角は局所ユニタリ演算子を表す. 縦方向の積層 (深さ) は有限である. エンタングルメントは着色部のように局所的に伝搬し, 遠く離れたサイト間には伝搬しない.

強磁性横磁場 Ising 模型 (cf. Sec. 3.1) の常磁性相は自発的に対称性を破らず非自明なトポロジカルネスも持たないので, 自明相としたい. 基底状態が各サイトの状態の直積 (直積状態) で書けていたので, 直積状態と局所ユニタリ変換で繋がられる gapped Hamiltonian は自明相に属すると定義する. 局所ユニタリ変換は Fig. 3.5 のような深さ有限の局所量子回路として近似できる. 深さが有限である限りエンタングルメントは有限領域にしか伝播しないので, エンタングルメントの面積則は保存される. この事実をもとに, 自明相から局所ユニタリ変換で繋がられる相を **SRE** (short-range entangled) 相, 繋がられない相を **LRE** (long-range entangled) 相と呼ぶ.

3.5.1 対称性を課さない gapped 相の縮退度による分類

[38] では, 並進対称性のある周期境界条件下の 2-local Hamiltonian について, 基底状態の縮退度が等しい模型は同じ gapped 相に属することが示されている. 任意の k -local Hamiltonian は実空間くりこみによって 2-local Hamiltonian に変換できることを期待すれば, 台が有限な任意の gapped Hamiltonian は基底状態の縮退度によって分類されることになる.

まず H_p ($p = 0, 1$) を Hilbert 空間 $(\mathcal{H}_p)^{\otimes N} \cong (\mathbb{C}^{d_p})^{\otimes N}$ 上の gapped Hamiltonian とする. Hilbert 空間 $\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_{\text{path}}$ として, この上で模型を連続変形させることで, 異なる Hilbert 空間上の二つの模型であっても同じ gapped 相に属するかが検討できる.

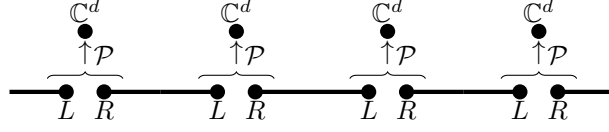


図 3.6: 最大エンタングル状態による MPS の構成. 黒丸を結んだ太線はボンド次元 D の最大エンタングル状態 $|\omega_D\rangle_{x,x+1}$ を表し, 物理的なサイトはエンタングルしていない L と R から写像 \mathcal{P} によって構成する.

AKLT 基底状態を参考に, 最大エンタングル状態

$$|\omega_D\rangle_{x,x+1} = \sum_{i=1}^D |i\rangle_{x,R} \otimes |i\rangle_{x+1,L}$$

を線型写像 $\mathcal{P} : \mathbb{C}^D \otimes \mathbb{C}^D \rightarrow \mathbb{C}^d$ で変換して MPS テンソルを構成する (Fig. 3.6). MPS テンソルも \mathcal{P} で表し, MPS を $|\mathcal{P}\rangle$ と書くことにする. \mathcal{P} の台を $(\ker \mathcal{P})^\perp = \mathcal{B}_1 \oplus \cdots \oplus \mathcal{B}_A$ と irreducible MPS になるようにブロック対角化すると, それぞれのブロックは D の有限な分割 $0 = \zeta_0 < \zeta_1 < \cdots < \zeta_A = D$ によって $\mathcal{B}_\alpha = \text{Span}\{|i\rangle_{x,L} |j\rangle_{x,R} \mid \zeta_{\alpha-1} < i, j \leq \zeta_\alpha\}$ と書けて, 特に $A = 1$ のとき $|\mathcal{P}\rangle$ は injective になる.*5

MPS $|\mathcal{P}\rangle$ の parent Hamiltonian は常に 2-local であると仮定し,

$$H = \sum_x h(x, x+1), \quad h := h(x, x+1) \geq 0$$

により与えると $\ker h = (\mathcal{P} \otimes \mathcal{P})(\mathbb{C}^D \otimes |\omega_D\rangle \otimes \mathbb{C}^D)$ と書ける. Thm. 33 (複数ブロックを持つ MPS の parent Hamiltonian は縮退) により H の基底状態空間は必ず A 重縮退する.

MPS の isometric form

MPS の適切な規格化のもと, 写像 \mathcal{P} の極分解 (Prop. 42) によって

$$\begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{\mathcal{P}} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{Q} \\ \hline \boxed{W} \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{c} \boxed{W} \\ \hline \boxed{W^\dagger} \end{array} = |, \quad 0 < \boxed{Q} \leq 1$$

とできる. 等長写像 W のみによる MPS $|W\rangle$ を isometric form という. $|W\rangle$ と $|\mathcal{P}\rangle$ をなめらかに繋ぐ MPS テンソルの族 $\{\mathcal{P}_s\}_{0 \leq s \leq 1}$ を

$$\begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{\mathcal{P}_s} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{Q_s} \\ \hline \boxed{W} \\ \hline \end{array}, \quad Q_s = sQ + (1-s) \cdot \mathbf{1}$$

*5 $\mathcal{P} = \sum_{i,\alpha,\beta} A_{\alpha\beta}^i |i\rangle_{x,L} \langle\alpha|_{x,L} \langle\beta|_{x,R}$ とすれば Chap. 2 の構成

$$\sum_{i_1, \dots, i_N} \text{tr}(A^{i_1} \cdots A^{i_N}) |i_1, \dots, i_N\rangle$$

に一致する. 本節の意味で \mathcal{P} が injective でないとき, \mathcal{P}^{-1} が非対角成分 $|i\rangle_{x,L} \langle j|_{x,R}$ ($\zeta_{\alpha-1} < i \leq \zeta_\alpha < j$) を台に持たないので, MPS テンソルは Chap. 2 の定義でいう injectivity を破る. 逆に \mathcal{P} が injective なら $|\mathcal{P}\rangle$ は $\ker \mathcal{P} = \{0\}$ なので MPS $|\mathcal{P}\rangle$ も injective になる.

で与えると, VBS 状態を生じる Hamiltonian のギャップの下限を与える [39] に基づく以下の議論により $|A\rangle$ は $|W\rangle$ と同じ gapped 相に属する.

まず $|A_0\rangle = |W\rangle$ の parent Hamiltonian $H_0 = \sum h_0(x, x+1)$ を与え, s 依存する Hamiltonian を

$$H_s := \sum_x h_s(x, x+1), \quad h_s(x, x+1) := (Q_s \otimes Q_s) h_0(Q_s^{-1} \otimes Q_s^{-1}) \geq 0$$

と定義すると, これは $|A_s\rangle$ の parent Hamiltonian になる. この gapped Hamiltonian の族 $\{H_s\}_{0 \leq s \leq 1}$ は s について連続的に変化し励起ギャップが閉じないことを示せば, isometric form $|W\rangle$ と $|A\rangle$ が同じ相に属するため $|W\rangle$ の分類問題に帰着できる. periodic MPS に分解して $A_s = \bigoplus_\alpha A_{s,\alpha}$ とすると, 各ブロック α ごとに転送行列 $E_{\alpha,s} := \sum_i A_{s,\alpha}^i \otimes \overline{A_{s,\alpha}^i}$ が定義できる. 転送行列のスペクトルの絶対値を, 重複を除いて $|\text{Spec } E_{\alpha,s}| = \{\lambda_{1,s,\alpha} > \lambda_{2,s,\alpha} > \dots\}$ とすると, $\lambda_{2,s,\alpha}/\lambda_{1,s,\alpha} < 1$ が常に成り立つ. λ_1 の縮退度を \mathcal{A} で与えているので, [39] の結果により s に依存しない上限 $1 > \tau_\alpha > \lambda_{2,s,\alpha}/\lambda_{1,s,\alpha}$ が存在する. $\alpha \neq \beta$ のとき,

$$\Omega_{\alpha,\beta}^p(s) := \sup_{X,Y \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})} \begin{array}{c} \text{---} \overbrace{\text{---} \text{---}}^p \text{---} \\ \text{---} \text{---} \end{array}$$

によって maximal overlap を定義する. ただし, 上下の状態は 1 に規格化している. 一つの MPS テンソルが作る状態空間を

$$\mathcal{S}_{\alpha,s} := \left\{ \text{---} \text{---} \mid X \in \text{Mat}_{D_\alpha \times D_\alpha}(\mathbb{C}) \right\}$$

で, 空間 \mathcal{X}, \mathcal{Y} 上の規格化した状態の maximal overlap を $\mathcal{O}(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ で書くと,

$$\Omega_{\alpha,\beta}^p(s) = \mathcal{O}(\mathcal{S}_{\alpha,s}^{\otimes p}, \mathcal{S}_{\beta,s}^{\otimes p}) \leq \mathcal{O}(\mathcal{S}_{\alpha,s}, \mathcal{S}_{\beta,s})^p.$$

さらに異なるブロックの直交性 $\mathcal{S}_{\alpha,0} \perp \mathcal{S}_{\beta,0}$ および $\mathcal{S}_{\mu,s} = Q_s \mathcal{S}_{\mu,0}$ ($\mu = \alpha, \beta$) により, Q_s^2 の 2×2 部分行列 $M = \pi Q_s^2 \pi^\dagger$ ($\pi = |0\rangle\langle v| + |1\rangle\langle w|$, $|v\rangle \in \mathcal{S}_{\alpha,0}$, $|w\rangle \in \mathcal{S}_{\beta,0}$) を用いて

$$\mathcal{O}(\mathcal{S}_{\alpha,s}, \mathcal{S}_{\beta,s}) \leq \sup_{\langle v|w\rangle=0} \frac{|\langle v|Q_s^2|w\rangle|}{\|Q_s|v\rangle\| \|Q_s|w\rangle\|} = \sup_{\langle v|w\rangle=0} \sqrt{\frac{|M_{12}|^2}{M_{11}M_{22}}}$$

が成り立つ. さて, $M > 0$ に対して

$$\frac{|M_{12}|^2}{M_{11}M_{22}} \leq 1 - \frac{\lambda_{\min}(M)}{\lambda_{\max}(M)} \leq 1 - \frac{\lambda_{\min}(Q_s^2)}{\lambda_{\max}(Q_s^2)} \leq 1 - \lambda_{\min}(Q^2) =: \kappa < 1$$

であり*6 $\Omega_{\alpha,\beta}^p(s) \leq \kappa^{p/2} < \kappa^p$ が従う. よってある p により

$$K^p(s) := \frac{4(\mathcal{A}-1)\kappa^p}{1-2(\mathcal{A}-1)\kappa^p} + \sum_{\alpha} D^2 \tau_{\alpha}^p \frac{1+D^2 \tau_{\alpha}^p}{1-D^2 \tau_{\alpha}^p} < 1/\sqrt{2}$$

および $2p$ サイトの系に制限したときの H_s のギャップ $\Delta_{2p}(s)$ を定義することで, [39] の結果, H_s のギャップの下限

$$\Delta(s) = \frac{1}{2} \Delta_{2p}(s) (1 - \sqrt{2} K^p(s))^2$$

が与えられる. 有限系ではギャップが有限なので右辺は正なので, H_s は s についての連続変化の間, 励起ギャップが閉じないことが示された.

基底状態が縮退しない場合

基底状態が縮退しない場合はテンソル \mathcal{P} が injective になり, W はユニタリにできる. ユニタリ変換全体の空間は連結なので, W を滑らかに単位行列へ変形できる. 変形の過程で常に isometric form の MPS を保つので, 縮退しない基底状態は全てボンド次元 D の最大エンタングル状態 $|\omega_D\rangle = |W=1\rangle$ にギャップを閉じることなく連続変形でき, 同じ gapped 相に属する. 異なるボンド次元の最大エンタングル状態を繋ぐ Hamiltonian は, 局所 Hamiltonian を

$$h^{\theta}(x, x+1) = \mathbf{1} - |\omega(\theta)\rangle\langle\omega(\theta)|_{x,x+1}, \quad |\omega(\theta)\rangle_{x,x+1} = \sqrt{\theta} |\omega_D\rangle_{x,x+1} + \sqrt{1-\theta} |\omega_{D'}\rangle_{x,x+1}$$

とすることで与えられる. すなわち縮退しない基底状態を与える理論は全て自明相に属する.

基底状態が縮退する場合

基底状態が縮退する場合は MPS テンソルを injective にとることができない. この場合 MPS のブロック対角化 $A = A_1 \oplus \cdots \oplus A_{\mathcal{A}}$ が非自明になる. それぞれのボンド次元を D_{α} として, 全ての α で $D_{\alpha} = 1$ となる場合とそれ以外に分けて議論する.

全ての $1 \leq \alpha \leq \mathcal{A}$ にて $D_{\alpha} = 1$ の場合, サイトごとの physical な Hilbert 空間におけるユニタリ変換を行うことで

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}_{\text{GHZ}} = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{A}} |\alpha\rangle_{x,\text{phys}} \langle\alpha|_{x,L} \langle\alpha|_{x,R}$$

の形に帰着できる. 具体的には, 各セクター α の各サイトにユニタリ変換を施すことにより, 全てのサイト

6 2×2 行列の固有値に関する不等式は以下のように証明できる. 正定値ならばエルミート行列なので $M_{12} = M_{21}^$ であり, また $\det M = \lambda_{\min}(M) \lambda_{\max}(M)$ なので

$$\frac{|M_{12}|^2}{M_{11} M_{22}} = \frac{M_{11} M_{22} - \lambda_{\min} \lambda_{\max}}{M_{11} M_{22}} = 1 - \frac{\lambda_{\min} \lambda_{\max}}{M_{11} M_{22}}$$

である. ここで, $\lambda_{\max}^2 \geq \det M \geq M_{11} M_{22}$ であり,

$$(1 \ 0)M \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = M_{11} > 0, \quad (0 \ 1)M \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = M_{22} > 0$$

なので右辺は正. 故に $\lambda_{\min} \lambda_{\max} / (M_{11} M_{22}) \geq \lambda_{\min} / \lambda_{\max}$ が成り立つ. 以上を組み合わせると 1 つ目の不等式が得られる. 二つ目の不等式は自明. 三つ目については, $0 < Q \leq 1$ と $Q_s = sQ + (1-s)\mathbf{1}$ から最大固有値が 1 以下であることにより導出される.



図 3.7: 縮退する基底状態に対する isometric form の構成. 破線で囲まれたのが 1 つのサイトを表す. GHZ 状態 (灰色) と最大エンタングル状態 (黒色) を α について直和をとって構成する.

で状態 $|\alpha\rangle$ を実現する. この操作を全ての α について行い, 直和をとることで \mathcal{P}_{GHZ} が得られる. ^{*7} 対応する Hamiltonian は

$$h(x, x+1) = \mathbf{1} - \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{A}} |\alpha\rangle\langle\alpha|_{x,\text{phys}} \otimes |\alpha\rangle\langle\alpha|_{x+1,\text{phys}}$$

である.

$D_\alpha \neq 1$ なるブロックに対しては, まずボンド 1 次元の GHZ 状態を組み, 残った $D_\alpha - 1$ 次元の最大エンタングル状態を組み合わせて基準となる MPS

$$|\mathcal{P}\rangle = \bigoplus_{\alpha=1}^{\mathcal{A}} \bigotimes_{x \in \Lambda_s} |\alpha, \alpha, \dots, \alpha\rangle_{x,\text{phys}} \otimes \bigoplus_{\alpha=1}^{\mathcal{A}} \bigotimes_{x \in \Lambda_s} |\omega_{D_\alpha-1}\rangle_{x,x+1}$$

を構成する (Fig. 3.7). 対応する写像は $\mathcal{P} = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|_L \langle\alpha|_R \otimes \mathbf{1}_{D_\alpha-1}$ で, Hamiltonian は

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|_{x,\text{phys}} \otimes (\mathbf{1} - |\omega_{D_\alpha-1}\rangle\langle\omega_{D_\alpha-1}|_{x,x+1})$$

で与えられる.

このような変換は縮退度が同じであれば常に可能である. 一方縮退度が異なる状態を繋げる場合, その過程で parent Hamiltonian の励起ギャップをまたぐ遷移が生じるため, 異なる gapped 相に属する. 基底状態が単一のときと合わせ, トポロジカル相は基底状態の縮退度によって分類される.

3.5.2 対称性の下での 1 次元トポロジカル相

上述 Sec. 3.5.1 により励起ギャップのある系の相分類は一見縮退度のみで決定されるように見えるが, 系に対称性を課すと描像が大きく変わる (Fig. 3.4 赤線). [40] では時間反転, パリティ, 並進対称性を破らない限り Haldane 相 (整数スピンの非自明な相) と自明相 (直積状態を基底状態とする Hamiltonian を含む相) は連続的に繋がれないことが指摘された. さらに [41] では, スピン 1 の Haldane 相が $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$, 時間反転, または (1 次元格子のリンクを中心とする) 空間反転対称性のいずれかを保つ限り自明相と連続的に繋がれず, またそのような対称性は上記の 3 つに限られることが示された. このように, 本来縮退度だけで分類できた gapped 相の Hamiltonian に対称性を課すことでより細かい相構造を示すという性質を踏まえ, 個別に以下のように定義する.

^{*7} 例えば縮退度が 2 の場合, 第 1 セクターの状態を全て $|\uparrow\rangle$ に, 第 2 セクターの状態を全て $|\downarrow\rangle$ に変換するユニタリ変換を各サイトに施すことで, GHZ 状態として Bell 状態を得られる. この操作の間ではセクターごとのユニタリ変換しか行っていないのでセクター内でギャップは閉じず, またセクター間での相互作用もないため, 操作全体を通してギャップは閉じない.

Def. 7: 対称性に保護されたトポロジカル相 (SPT 相)

基底状態が単一の gapped Hamiltonian H_0, H_1 が同じ対称性 C を有し, かつ C と励起ギャップを保つ連続的な変形で繋げられないとき, H_0, H_1 は対称性に保護されたトポロジカル相 (SPT 相) として異なる相に属するという.

なお, 対称性 C は群に限らないことに注意せよ. Sec. 3.4.1 で見たような, 群では表すことのできない非可逆対称性も含まれる.

また SPT 相は基底状態が単一の模型に対して定義されているが, 一般次元では基底状態が縮退している場合でも対称性によって相図が細分化される. その場合基底状態は LRE 状態であることが以下の背理法により示せる. 縮退する基底状態 $|\Phi_1\rangle, |\Phi_2\rangle$ が共に SRE 状態であり, かつ対称性を自発的に破らないと仮定する. Hamiltonian を自明な Hamiltonian に移す局所ユニタリ変換によって状態を $U|\Phi_1\rangle, U|\Phi_2\rangle$ へ移すと, これらは依然として直交する. 直積状態が直交しているならばいずれかのサイトにおける状態が直交しているため, 局所観測可能量の期待値が異なるが, これは対称性を自発的に破らない仮定に矛盾する.

現在我々が注目している 1 次元系に限っては gapped な基底状態は常に SRE なので, 対称性を破らずかつ縮退するような, 上記の意味でトポロジカルに非自明な相になることはない. よって **1 次元系における相の分類は, 対称性のうちの部分対称性を破るか, 残った対称性の SPT 相の組み合わせによって記述される.**

3.6 1 次元系の on-site かつ一様な対称性による相の分類

前節 Sec. 3.5 で議論したように, 系に対称性を課すことで gapped 相はより細かく分類される. 特に空間各点 (on-site) に一様に作用する内部対称性の場合, 場の理論との親和性から凝縮系物理学だけでなく高エネルギー物理学の分野でも盛んに研究されてきた.*8 自然と多くの文献において対称性とはこの種のものに限られている. 対称性作用の空間非一様性について扱う Chap. 5 に先立ち, 本節では相分類研究の中心的話題であった, 並進対称性と空間一様な on-site 対称性を持つ 1 次元 gapped 系の相分類についてレビューする. 本節の議論は [44] 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. 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. $A = \sum_i A^i |i\rangle$ は MPS テンソルで, A^i はボンド次元 D 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 を任意にとつて得られる集合を

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

とする. 任意の MPS テンソルは連結することで injective MPS の和になり (Cor. 25 and Prop. 20), また熱力学極限で異なる MPS は比例するか直交する (Prop. 21) ので, A をブロック対角化して 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.

*8 [42] やその引用文献を参照せよ. 空間対称性のもとでのトポロジカル相についても議論が盛んに行われており, [43] などで研究されている.

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 χ_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.

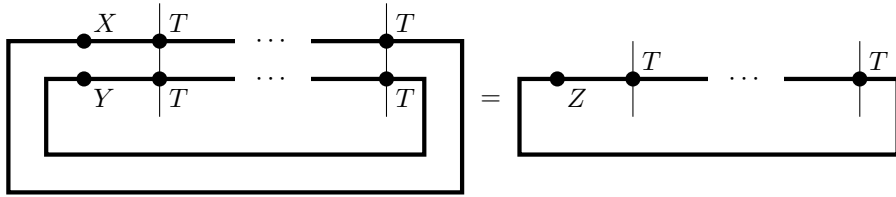
3.6.1 MPO の満たす代数

まずは基底状態に依存しないが, 基底状態への作用のデータに現れる, 対称性そのもののデータ (F -シンボル) を MPO から引き出す.

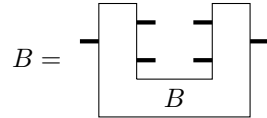
MPO が対称性を表すように, 任意の $X, Y \in \text{Mat}_{\chi \times \chi}(\mathbb{C})$, 任意の L に対して

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

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.*⁹ 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 Prop. 42 により $B = \sum_{\mu} W^{\mu} \otimes V^{\mu}$ と書ける.

$$B = \text{[U-shaped box labeled B]} = \text{[box labeled W]} \text{ [box labeled V]} = \sum_{\mu} \text{[box labeled } \mu \text{]} \text{ [box labeled } \mu \text{]}$$

μ 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, μ 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

$$W_{ab}^{c,\mu} = P_c W^{\mu} (P_a \otimes P_b) = c \text{ [box labeled } \mu \text{ with legs } a, b \text{ and } c]$$

*⁹ Chap. 2 では行列を黒丸で表したときはもっぱら対角行列を指していたが, ここでは X, Y, T いずれも対角に限らない一般のテンソルであることに注意.

のように表す. ランク分解は一意ではなく,

$$W_{ab}^{c,\mu} \rightarrow \sum_{\mu'} (Y_{ab}^c)_{\mu'}^\mu W_{ab}^{c,\mu'}, \quad V_{ab}^{c,\mu} \rightarrow \sum_{\mu'} (\hat{Y}_{ab}^c)_{\mu'}^\mu V_{ab}^{c,\mu'}$$

のゲージ変換自由度が残されている. ゲージ Y_{ab}^c は μ のボンドを足とする行列であり, a, b, c を定めるごとに行列として 1 つに定まる. \hat{Y}_{ab}^c は Y_{ab}^c の逆行列である. 上述の図で表せば

$$\begin{array}{c} \text{---} \boxed{W} \text{---} \\ \text{---} \boxed{V} \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} c \text{---} \boxed{W} \text{---} a \\ \text{---} b \text{---} \boxed{V} \text{---} c \end{array} \quad \begin{array}{c} \boxed{Y_{ab}^c} \text{---} \boxed{\hat{Y}_{ab}^c} \end{array} \quad (3.6.1)$$

に対応する.

a, b, c を指定して μ 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ない. 線型独立な $W_{ab}^{c,\mu}$ を与える μ の最大ラベル数を 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,

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

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

$$\begin{array}{c} \begin{array}{c} X \\ a \quad a \\ b \quad b \\ Y \end{array} \begin{array}{c} T \\ \vdots \\ T \end{array} \dots \begin{array}{c} T \\ \vdots \\ T \end{array} \\ \hline \end{array} = \sum_c \sum_{\mu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} \begin{array}{c} X_a \\ \mu \\ Y_b \end{array} \begin{array}{c} c \\ \vdots \\ c \end{array} T \dots \end{array}$$

とかけて, これが任意の X, Y と任意の長さで成り立つので, MPO テンソル T の合成は

$$\begin{array}{c} a \quad a \\ \vdots \\ a \quad a \\ b \quad b \\ \vdots \\ b \quad b \end{array} = \sum_{\mu} \begin{array}{c} a \\ b \end{array} \begin{array}{c} \mu \\ \vdots \\ \mu \end{array} \begin{array}{c} c \\ \vdots \\ c \end{array} \begin{array}{c} \mu \\ \vdots \\ \mu \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \end{array} \quad (3.6.2)$$

とできる. 特に $L = 1$ では

$$\begin{array}{c} a \\ \vdots \\ a \\ b \\ \vdots \\ b \end{array} = \sum_c \sum_{\mu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} a \\ b \end{array} \begin{array}{c} \mu \\ \vdots \\ \mu \end{array} \begin{array}{c} c \\ \vdots \\ c \end{array} \begin{array}{c} \mu \\ \vdots \\ \mu \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \end{array}$$

なので, $L = 2$ の (3.6.2) 左辺にこれを用いると

$$\begin{array}{c} a \quad a \\ \vdots \\ a \quad a \\ b \quad b \\ \vdots \\ b \quad b \end{array} = \sum_{c,d} \sum_{\mu,\nu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} a \\ b \end{array} \begin{array}{c} \mu \\ \vdots \\ \mu \end{array} \begin{array}{c} c \\ \vdots \\ c \end{array} \begin{array}{c} \mu \\ \vdots \\ \mu \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \end{array} \begin{array}{c} \nu \\ \vdots \\ \nu \end{array} \begin{array}{c} d \\ \vdots \\ d \end{array} \begin{array}{c} \nu \\ \vdots \\ \nu \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \end{array}$$

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,

$$\begin{aligned} \delta_{c,d} \sum_{\mu,\nu=1}^{N_{ab}^c} & \begin{array}{c} a \\ b \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \mu \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} c \\ c \end{array} \begin{array}{c} c \\ c \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \mu \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \end{array} \\ &= \sum_{\mu,\nu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} a \\ b \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \mu \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} c \\ c \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \mu \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \nu \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} d \\ d \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \nu \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \end{array} \end{aligned}$$

である. 残っている左右のテンソルは線型独立となるようにしていたので,

$$c \begin{array}{|c|} \hline \mu \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \nu \\ \hline \end{array} d = \underline{c} \delta_{c,d} \delta_{\mu,\nu} \quad (3.6.3)$$

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 (結合律) を要請する.

$$\begin{array}{c} \nu \\ \mu \\ \mu \\ \nu \end{array} = \begin{array}{c} \nu \\ \mu \\ \mu \\ \nu \end{array} \quad (3.6.4)$$

(3.6.3) を踏まえるとこれは自明だが, 左半分だけに着目すると,

$$d \begin{array}{|c|} \hline \nu \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} e \\ \mu \\ b \\ c \end{array} = \sum_{f,\chi,\eta} (F_{abc}^d)^{e\mu\nu}_{f\chi\eta} d \begin{array}{|c|} \hline \eta \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \\ c \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \chi \\ \hline \end{array} \quad (3.6.5)$$

のような変換の自由度が許される. (3.6.5) 右辺の係数は F -シンボルと呼ばれる. (3.6.4) 両辺の右半分についても同様の係数が現れるが, (3.6.3) を課すことで F -シンボルを打ち消すように調整されるので, 以降左半分から生じる F -シンボルのみを考えることにする. ボンド4本の結合の組み換えを考えると,

$$\begin{aligned} e \begin{array}{|c|} \hline \gamma \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} g \\ \beta \\ f \\ \alpha \\ c \\ d \end{array} &= \sum_{h,\lambda,\mu} (F_{abc}^g)^{f\alpha\beta}_{h\lambda\mu} e \begin{array}{|c|} \hline \gamma \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} g \\ \mu \\ h \\ \lambda \\ c \\ d \end{array} \\ &= \sum_{h,k,\lambda,\mu,\nu,\rho} (F_{abc}^g)^{f\alpha\beta}_{h\lambda\mu} (F_{ahd}^e)^{g\mu\gamma}_{k\nu\rho} e \begin{array}{|c|} \hline \rho \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \lambda \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} h \\ \nu \\ k \end{array} \\ &= \sum_{h,k,l,\lambda,\mu,\nu,\rho,\sigma,\tau} (F_{abc}^g)^{f\alpha\beta}_{h\lambda\mu} (F_{ahd}^e)^{g\mu\gamma}_{k\nu\rho} (F_{bcd}^k)^{h\lambda\nu}_{l\sigma\tau} e \begin{array}{|c|} \hline \rho \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \tau \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} h \\ l \\ \sigma \end{array} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \begin{array}{c} \text{Diagram 1: A box } \gamma \text{ with input } e \text{ and output } d. \text{ A line } g \text{ goes from } \gamma \text{ to a box } \beta. \text{ A line } f \text{ goes from } \beta \text{ to a box } \alpha. \text{ Box } \alpha \text{ has outputs } a \text{ and } b. \end{array} \\
&= \sum_{l, \sigma, \mu} (F_{fcd}^e)_{l\sigma\mu}^{g\beta\gamma} \begin{array}{c} \text{Diagram 2: A box } \mu \text{ with input } e \text{ and output } l. \text{ A line } f \text{ goes from } \mu \text{ to box } \alpha. \text{ Box } \alpha \text{ has outputs } a \text{ and } b. \text{ A box } \sigma \text{ has inputs } l \text{ and } \mu, \text{ and outputs } c \text{ and } d. \end{array} \\
&= \sum_{l, \sigma, \mu} (F_{fcd}^e)_{l\sigma\mu}^{g\beta\gamma} \begin{array}{c} \text{Diagram 3: A box } \mu \text{ with input } e \text{ and output } l. \text{ A line } f \text{ goes from } \mu \text{ to box } \alpha. \text{ Box } \alpha \text{ has outputs } a \text{ and } b. \text{ A box } \sigma \text{ has inputs } l \text{ and } \mu, \text{ and outputs } c \text{ and } d. \end{array} \\
&= \sum_{k, l, \sigma, \mu, \rho, \tau} (F_{fcd}^e)_{h\sigma\mu}^{g\beta\gamma} (F_{abl}^e)_{k\tau\rho}^{f\alpha\mu} \begin{array}{c} \text{Diagram 4: A box } \rho \text{ with input } e \text{ and output } k. \text{ A box } \tau \text{ has inputs } k \text{ and } \rho, \text{ and outputs } b \text{ and } c. \text{ A box } \sigma \text{ has inputs } l \text{ and } \tau, \text{ and outputs } c \text{ and } d. \end{array}
\end{aligned}$$

の 2 通りの変換がある. 互いの最左辺が同一なので最右辺も等価でなければならない. したがって F -シンボルは

$$\sum_{h, \lambda, \mu, \nu} (F_{abc}^g)_{h\lambda\mu}^{f\alpha\beta} (F_{ahd}^e)_{k\nu\rho}^{g\mu\gamma} (F_{bcd}^k)_{l\sigma\tau}^{h\lambda\nu} = \sum_{\mu} (F_{fcd}^e)_{h\sigma\mu}^{g\beta\gamma} (F_{abl}^e)_{k\tau\rho}^{f\alpha\mu} \quad (3.6.6)$$

の pentagon identity を満たさなければならない. ゲージ変換 (3.6.1) により F -シンボルも

$$(F_{abc}^d)_{f\chi\eta}^{e\mu\nu} \rightarrow (F_{abc}^d)_{f\chi'\eta'}^{e\mu'\nu'} (Y_{ab}^e)_{\mu'}^{\mu} (Y_{ec}^d)_{\nu'}^{\nu} (\hat{Y}_{bc}^f)_{\chi}^{\chi'} (\hat{Y}_{af}^d)_{\eta}^{\eta'} \quad (3.6.7)$$

と変更を受けるが, これはフュージョンテンソル単体の基底の変換に過ぎないため, 定義の式 (3.6.5) で得ようとしている情報ではない. そこで F -シンボルと言ったときは (3.6.7) によるゲージ変換を同一視した同値類を指すことにする.

3.6.2 MPO で対称な MPS

MPS が MPO で対称であるとは, 任意の長さ L に対して $\mathcal{A}_T^L \cdot \mathcal{S}_A^L = \mathcal{S}_A^L$ が成り立つことである. より具体的には, $X \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C}), B \in \text{Mat}_{\chi \times \chi}(\mathbb{C})$ から MPO \mathcal{A}_T^L と MPS \mathcal{S}_A^L を構成したとき, 常に $Y \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ が存在して

$$\begin{array}{c} \text{Diagram 1: A sequence of MPOs } B, T, \dots, T \text{ and MPSs } X, A, \dots, A. \end{array} = \begin{array}{c} \text{Diagram 2: A sequence of MPSs } Y, A, \dots, A. \end{array}$$

が成り立つことをいう. MPS とそのボンドを赤で, MPO とそのボンドを黒で描いている. Sec. 3.6.1 の議論をそのまま繰り返すことで, 3 脚のアクションテンソル $V_{ax}^{y,i} : \mathbb{C}^{\chi_a} \otimes \mathbb{C}^{D_x} \rightarrow \mathbb{C}^{D_y}$ と $\hat{V}_{ax}^{y,i} : \mathbb{C}^{D_x} \rightarrow \mathbb{C}^{\chi_a} \otimes \mathbb{C}^{D_y}$ が

$$\begin{array}{c} \text{Diagram 1: A box with input } a \text{ and output } x. \end{array} = \sum_{i, y} \begin{array}{c} \text{Diagram 2: A box with input } a \text{ and output } x, \text{ and internal indices } i, y. \end{array} \quad (3.6.8)$$

を満たすように構成される. a, x, y を決めるごとに線型独立なアクションテンソルが $M_{a,x}^y$ 個あるとすると, $i = 1, \dots, M_{a,x}^y$ を走る. a, x, y を決めるごとにゲージ変換

$$V_{ax}^{y,i} \rightarrow \sum_{i'} (X_{ax}^y)^{i,i'} V_{ax}^{y,i'}, \quad \hat{V}_{ax}^{y,i} \rightarrow \sum_{i'} (\hat{X}_{ax}^y)^{i,i'} \hat{V}_{ax}^{y,i'} \quad (3.6.9)$$

の自由度がある. (3.6.3) と同様にして

$$y \text{ --- } \boxed{i} \begin{array}{c} \text{--- } a \text{ ---} \\ \text{--- } x \text{ ---} \end{array} \boxed{j} \text{ --- } z = \text{--- } z \text{ --- } \delta_{i,j} \delta_{y,z}$$

が成り立つので, 結合律により L -シンボル

$$y \text{ --- } \boxed{i} \begin{array}{c} \text{--- } a \text{ ---} \\ \text{--- } b \text{ ---} \\ \text{--- } x \text{ ---} \end{array} \boxed{j} \text{ --- } z = \sum_{c,\mu,k} (L_{abx}^y)^{z,ij}_{c,k\mu} y \text{ --- } \boxed{k} \begin{array}{c} \text{--- } c \text{ ---} \\ \text{--- } \mu \text{ ---} \end{array} \boxed{\mu} \begin{array}{c} \text{--- } a \text{ ---} \\ \text{--- } b \text{ ---} \\ \text{--- } x \text{ ---} \end{array}$$

が定義される. 独立基底の個数を数えると,

$$\sum_z M_{a,z}^y M_{b,x}^z = \sum_c N_{ab}^c M_{c,x}^y \quad (3.6.10)$$

が成り立つ. F -シンボルと同様に 4 本のボンドの組み替えを考えることで, pentagon identity

$$\sum_{d,n,\eta,\chi} (L_{abt}^y)^{z,ij}_{d,n\eta} (L_{dcx}^y)^{t,nk}_{e,m\chi} (F_{abc}^e)^{d,\chi\eta}_{f,\nu\mu} = \sum_l (L_{bcx}^z)^{t,jk}_{f,l\mu} (L_{afx}^y)^{z,il}_{e,m\nu} \quad (3.6.11)$$

が要請される. ゲージ変換 (3.6.9) はやはりアクションテンソル単体の基底変換に過ぎないため, L -シンボルのゲージ変換

$$(L_{abx}^y)^{z,ij}_{c,k\mu} \rightarrow \sum_{i',j',k',\mu'} (X_{az}^y)^{i,i'}_{i'} (X_{bx}^z)^{j,j'}_{j'} (\hat{X}_{cx}^y)^{k,k'}_{k'} (\hat{Y}_{ab}^c)^{\mu,\mu'}_{\mu'} (L_{abx}^y)^{z,i'j'}_{c,k'\mu'} \quad (3.6.12)$$

を同一視した同値類を L -シンボルと呼ぶことにする.

3.6.3 分類

Hamiltonian の対称性を MPO の言葉で書き換える. 本節では周期境界条件における MPO (PBC MPO) で対称な系に興味があるので, 対称性の定義を以下のようにする.

Def. 8: MPO を用いた Hamiltonian の対称性

周期境界条件の Hamiltonian H と対称性 (fusion category) の表現である MPO $\{O_a \mid a \in \mathcal{C}\}$ をとる. $\forall a \in \mathcal{C}$ について $[H, O_a] = 0$ が成り立つとき, H は \mathcal{C} に対して対称であるという.

局所項のたしあわせで書かれる gapped な周期境界条件の Hamiltonian H_0, H_1 を考える. Defs. 6 and 7 の定義を念頭に,

- Hilbert 空間 $\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_{\text{path}}$ 上の局所項のたしあわせで書かれる gapped な周期境界条件の Hamiltonian $H(s)$ が存在して, $H(0) = H_0|_{\mathcal{H}_0^{\otimes L}}, H(1) = H_1|_{\mathcal{H}_1^{\otimes L}}$
- Hamiltonian の経路 $H(s)$ は \mathcal{C} の injective MPO 表現 $O_a = O_a^0 \oplus O_a^1 \oplus O_a^{\text{path}}$ と可換

を満たすことと読み替える.

同じ gapped 相における L -シンボルの不変性

分類にあたっては Hamiltonian を繋ぐ経路 $\{H_s\}_{0 \leq s \leq 1}$ の上でテンソル $A(s)$ の変形を考察することになる. すなわち $A(s)$ と $A(s + ds)$ の比較をしなければならない. まずは (3.6.8) および A_y が injective であり left inverse を持つことから以下の等式を与える.

$$\frac{A_y(s + ds)^{-1}}{A_x(s + ds)} = \sum_i \begin{array}{c} y \\ a \\ \boxed{i} \\ x \end{array} = \sum_i V_{a,x}^{y,i} \otimes \hat{V}_{a,x}^{y,i}$$

連続変形に伴って $V_{a,x}^{y,i}$ も連続変形され, 微小な s の変化によるアクションテンソルの変化を

$$\begin{array}{c} y \\ a \\ \boxed{i} \\ x \end{array} = \begin{array}{c} y \\ a \\ \boxed{i} \\ x \end{array} + ds \sum_{i'=1}^{M_{a,x}^y} (X_{ax}^y)_{i'}^i \begin{array}{c} y \\ a \\ \boxed{i'} \\ x \end{array}$$

と表す. MPO の結合性から新たに L' -シンボル

$$\begin{array}{c} y \\ a \\ \boxed{i} \\ z \\ \boxed{j} \\ x \end{array} = \sum_{c,\mu,k} (L'_{abx})_{c\mu k}^{zij} \begin{array}{c} y \\ a \\ \boxed{k} \\ c \\ \boxed{\mu} \\ b \\ x \end{array} \quad (3.6.13)$$

が導入される. 対称性はパス全体で固定しているのでフュージョンテンソルは s に依存しない. L' -シンボルは具体的に

$$(L'_{abx})_{c\mu k}^{zij} \mathbf{1}_y = \begin{array}{c} y \\ a \\ \boxed{i} \\ z \\ \boxed{j} \\ x \end{array} \begin{array}{c} a \\ b \\ \boxed{\mu} \\ c \\ \boxed{k} \\ y \end{array} \quad (3.6.14)$$

と書ける. 微分可能なアクションテンソルから構成されているので微分可能であり,

$$(L'_{abx})_{c\mu k}^{zij} = (L_{abx})_{c\mu k}^{zij} + (G_{abx}^y)_{c\mu k}^{zij} ds$$

とできる. (3.6.13) の ds に関する 1 次の寄与を調べる. 左辺からの 1 次の寄与は変分前のアクションテンソルによって

$$\sum_{i'} (X_{az}^y)_{i'}^i \begin{array}{c} y \\ a \\ \boxed{i'} \\ z \\ \boxed{j} \\ x \end{array} + \sum_{j'} (X_{bx}^z)_{j'}^j \begin{array}{c} y \\ a \\ \boxed{i} \\ z \\ \boxed{j'} \\ x \end{array}$$

と計算でき, 右辺からは

$$(\text{RHS}) = \sum_{c,\mu,k} (G_{abx}^y)_{c\mu k}^{zij} \begin{array}{c} y \\ a \\ \boxed{k} \\ c \\ \boxed{\mu} \\ b \\ x \end{array} + \sum_{c,\mu,k,k'} (X_{cx}^y)_{k'}^k (L_{abx}^y)_{c\mu k}^{zij} \begin{array}{c} y \\ a \\ \boxed{k'} \\ c \\ \boxed{\mu} \\ b \\ x \end{array}$$

が生じる. ここでアクションテンソルの定義から

$$\begin{array}{c} a \\ b \\ x \end{array} \begin{array}{c} \hat{i} \\ \boxed{j} \\ \hat{z} \end{array} y = \sum_{\hat{c}, \hat{\mu}, \hat{k}} [(L_{abx}^y)^{-1}]_{\hat{z}\hat{i}j}^{\hat{c}\hat{\mu}\hat{k}} \begin{array}{c} a \\ b \\ x \end{array} \begin{array}{c} \hat{\mu} \\ \boxed{\hat{k}} \\ \hat{c} \end{array} y$$

となるので, (3.6.14) の左辺は

$$(X_{bx}^z)_j^j \cdot \delta_i^i \delta_z^z \mathbf{1}_y + (X_{az}^y)_i^i \cdot \delta_j^j \delta_z^z \mathbf{1}_y,$$

右辺は

$$\begin{aligned} & \sum_{c,\mu,k,\hat{k}} [(L_{abx}^y)^{-1}]_{\hat{z}\hat{i}\hat{j}}^{c\mu\hat{k}} (X_{cx}^y)_k^k (L_{abx}^y)^{zij}_{c\mu k} \mathbf{1}_y + \sum_{c,\mu,k} [(L_{abx}^y)^{-1}]_{\hat{z}\hat{i}\hat{j}}^{\hat{z}\hat{i}\hat{j}} (G_{abx}^y)^{zij}_{c\mu k} \mathbf{1}_y \\ &= \sum_{c,\mu,k} [(L_{abx}^y)^{-1}]_{\hat{z}\hat{i}\hat{j}}^{c\mu\hat{k}} \left[\sum_{\hat{k}} (X_{cx}^y)_k^k (L_{abx}^y)^{zij}_{c\mu\hat{k}} + (G_{abx}^y)^{zij}_{c\mu k} \right] \mathbf{1}_y \end{aligned}$$

と計算できる. 両辺に $\sum_{\hat{z},\hat{i},\hat{j}} (L_{abx}^y)^{\hat{z}\hat{i}\hat{j}}_{c\mu k}$ を作用させると,

$$\sum_{\hat{z},\hat{i},\hat{j}} (L_{abx}^y)^{\hat{z}\hat{i}\hat{j}}_{c\mu k} \left[(X_{bx}^z)_j^j \delta_i^i \delta_z^z + (X_{az}^y)_i^i \delta_j^j \delta_z^z \right] \mathbf{1}_y = \left[\sum_{\hat{k}} (X_{cx}^y)_k^k (L_{abx}^y)^{zij}_{c\mu\hat{k}} + (G_{abx}^y)^{zij}_{c\mu k} \right] \mathbf{1}_y$$

が得られる. y のブロックの部分空間に制限して等式を整えると G の具体形が得られるので,

$$(L_{abx}^y)^{zij}_{c\mu k} = \sum_{\hat{i},\hat{j},\hat{k}} (L_{abx}^y)^{\hat{z}\hat{i}\hat{j}}_{c\mu\hat{k}} \left[\delta_i^i \delta_j^j \delta_k^k + (X_{bx}^z)_j^j \delta_i^i \delta_k^k + (X_{az}^y)_i^i \delta_j^j \delta_k^k - (X_{cx}^y)_k^k \delta_i^i \delta_j^j \right]$$

とまとめられる. L -シンボルのゲージ変換 (3.6.12) と比較すると, L' -シンボルは L -シンボルのゲージ変換であることがわかる. よって $0 \leq s \leq 1$ のパス全体にわたって L -シンボルはゲージ同値であり, 異なる L -シンボルを有する MPS は異なる相に属する.

同じ L -シンボルを与える MPS の接続

上述の通り, 異なる相にて L -シンボルは異なる. となれば, 同じ gapped 相では L -シンボルは同じであることを期待するのは自然だろう. gapped 相の定義 Defs. 6 and 7 を念頭に, 同じ L -シンボルを与える MPS の間に gapped な経路が存在することを示せば良い. まずは基底状態が縮退しない場合を考える.

ボンド次元を十分大きくとれば局所 Hilbert 空間 \mathcal{H}_p ($p = 0, 1$) を virtual な MPS テンソル A_p が生成する空間に包含できるので, $\mathcal{H} \cong \mathbb{C}^{D_p} \otimes \mathbb{C}^{D_p}$ と書けるとしても一般性を失わない. A_0 と A_1 を繋ぐ MPS テンソル $A(s)$ は physical な脚に $(\mathbb{C}^{D_0} \oplus \mathbb{C}^{D_1}) \otimes (\mathbb{C}^{D_0} \oplus \mathbb{C}^{D_1})$ の自由度を持ち, ボンド次元を $D = D_0 + D_1$ とする. $A(s)$ の行列要素を

$$A^{i,j}(s) = A^{i,j} W(s) \quad (3.6.15)$$

と書いて, 右辺をそれぞれ

$$W(s) := (1-s)\mathbf{1}_{D_0} + s\mathbf{1}_{D_1}, \quad A^{i,j} := \begin{cases} A_0^{i,j} & (1 \leq i, j \leq D_0) \\ A_1^{i-D_0, j-D_0} & (D_0 < i, j \leq D) \\ |i\rangle \langle j| & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

により与える. 明らかに $A(s)A(s)^\dagger = \mathbf{1}$ を満たす injective MPS テンソルである. この $A(s)$ はボンド次元 $\chi_a^0 + \chi_a^1$ の MPO による対称性

$$T_a = \begin{pmatrix} T_a^0 & T_a^{0,1} \\ T_a^{1,0} & T_a^1 \end{pmatrix}$$

による作用を受ける．非対角成分は

$$T_a^{0,1} A(s) = \begin{array}{c} T_a^{0,1} \\ a \text{ ---} \bullet \text{ ---} a \\ | \\ \text{---} \bullet \text{ ---} \\ | \\ A(s) \end{array} = \begin{array}{c} a \text{ ---} \boxed{0} \text{ ---} \text{---} \boxed{1} \text{ ---} a \\ | \quad \quad | \\ \text{---} \bullet \text{ ---} \quad \text{---} \bullet \text{ ---} \\ | \quad \quad | \\ A(s) \end{array}$$

により定義し, $T_a^{1,0}$ も同様に与える．図式の手前が Hilbert 空間 \mathcal{H}_0 の MPS に, 奥が \mathcal{H}_1 の MPS に対応し, $T_a^{0,1}$ はこの二つにまたがって作用している． $i = j$ の場合は (3.6.8) から変更はない． $T_a^{i,i}$ をアクションテンソルの作用 ((3.6.8) 右辺) に変換することで具体的な作用は

$$T_a A(s) = \left(\begin{array}{c} a \text{ ---} \boxed{0} \text{ ---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \boxed{1} \text{ ---} \end{array} \oplus \begin{array}{c} a \text{ ---} \boxed{1} \text{ ---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \boxed{0} \text{ ---} \end{array} \right) A(s) \left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \boxed{0} \text{ ---} a \\ \text{---} \text{---} \boxed{1} \text{ ---} a \end{array} \right)$$

と表せ, (3.6.8) を $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ で再現する．パス全体を通して対称性を固定しているので \mathcal{H}_0 と \mathcal{H}_1 で F -シンボルは常に等価である．したがってゲージ変換 (3.6.7) により $s \in [0, 1]$ にわたって $F_0 = F_1$ が成り立つようにできる．また L -シンボルは等価であることを仮定しているので, ゲージ変換 (3.6.12) によりパス全体で $L_0 = L_1$ が成り立つようにできる．このもとで T_a は代数 \mathcal{C} の表現を与えるので表現として well-defined である．

ここまで構成してきた $A(s)$ と $\{T_a\}$ が A_0 と A_1 を繋ぐ gapped な経路を与えることを確認する．

はじめに $T_a : \text{Mat}_{\chi \times \chi}(\mathbb{C}) \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$ を忠実に (virtual な脚から physical な脚への injective MPO に) できることを示す． T_a^0, T_a^1 はそれぞれ injective として良いので, $T_a^{0,1} \oplus T_a^{1,0}$ が injective であることを逆元の存在から示せば良い．physical な脚に $A(s), A(s)^\dagger$ を作用させると,

$$\begin{array}{c} A(s)^\dagger \\ \text{---} \bullet \text{ ---} \\ | \\ \text{---} \bullet \text{ ---} a \\ | \\ \text{---} \bullet \text{ ---} a \\ | \\ A(s) \end{array} = \left(\begin{array}{c} a \text{ ---} \boxed{0} \text{ ---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \boxed{1} \text{ ---} \end{array} \oplus \begin{array}{c} a \text{ ---} \boxed{1} \text{ ---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \boxed{0} \text{ ---} \end{array} \right) \otimes \left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \boxed{0} \text{ ---} a \\ \text{---} \text{---} \boxed{1} \text{ ---} a \end{array} \right) = T_a$$

であり, $(T_a^{0,1} \oplus T_a^{1,0})$ の逆が構成できるため injective であることが示された．(3.6.15) で定義した $A(s)$ は任意の $s \in (0, 1)$ で injective なので, parent Hamiltonian $H_{A(s)} =: H(s)$ は gapped か基底状態を $|A(s)\rangle$ しか持たない．局所 Hamiltonian は

$$S_s := \left\{ \sum_{i,j} \text{Tr}[A^i(s)A^j(s)X] |ij\rangle \mid X \in \text{Mat}_D(\mathbb{C}) \right\}$$

の直交補空間への射影 $H_s = \mathbf{1} - \Pi_{S_s}$ で与えられる． $W(s)\text{Mat}_D(\mathbb{C}) = \text{Mat}_D(\mathbb{C})$ なのでこの部分空間は

$$S_s = \left\{ \sum_{i,j} \text{Tr}[A^i W(s)A^j X] |ij\rangle \mid X \in \text{Mat}_D(\mathbb{C}) \right\} =: S'_s$$

と書き直せる． S'_s は任意の $s \in [0, 1]$ で D^2 次元である． $A(s)$ は $s = 0, 1$ でそれぞれ A_0, A_1 に一致するように構成しているので, gapped な経路 $H(s)$ が得られたことになる．

基底状態が縮退する場合は、この構成を各 injective ブロックごとに行えば良い。以上により、対称性を踏まえた gapped 相の分類は L -シンボルの同値類によって与えられることが示された。

Thm. 38: 対称性に基づく gapped 相の分類

gapped 相 $\iff L$ -シンボルの同値類

3.6.4 例: 対称性が群の場合

MPO の代数が有限群 G の場合を考える。フュージョンテンソルの作用には

$$\begin{array}{c} g \\ | \\ h \end{array} = \begin{array}{c} g \\ | \\ h \end{array} \begin{array}{c} \boxed{} \\ | \\ \boxed{} \end{array} \begin{array}{c} gh \\ | \\ gh \end{array} \begin{array}{c} \boxed{} \\ | \\ \boxed{} \end{array} \begin{array}{c} g \\ | \\ h \end{array}$$

を要請する。この設定により、対称性が一様に作用する G のユニタリ表現 $O_g = (u_g)^{\otimes L}$ ($g \in G$) で与えられる場合のトポロジカル相が完全に分類される。ブロックは 1 次元であり、フュージョンテンソルは自明で $N_{g,h}^k = \delta_{gh,k}$ である。 F -シンボルは

$$\begin{array}{c} gh \\ | \\ ghk \end{array} \begin{array}{c} \boxed{} \\ | \\ \boxed{} \end{array} \begin{array}{c} g \\ | \\ h \\ | \\ k \end{array} = \omega(g, h, k) \begin{array}{c} ghk \\ | \\ ghk \end{array} \begin{array}{c} \boxed{} \\ | \\ \boxed{} \end{array} \begin{array}{c} g \\ | \\ h \\ | \\ k \end{array}$$

の形で書くことができ、pentagon identity (3.6.6) は

$$\omega(g, h, k)\omega(g, hk, l)\omega(h, k, l) = \omega(gh, k, l)\omega(g, h, kl)$$

である。ゲージ $Y_{g,h}^{gh} =: \beta_{g,h}$ によって F -シンボルには

$$\omega(g, h, k) \sim \omega(g, h, k) \frac{\beta_{h,k}\beta_{g,hk}}{\beta_{gh,k}\beta_{g,h}}$$

の同一視が入る。この 2 本の式は 3 次の群コホモロジー (Def. 31) の定義そのものなので、 F -シンボルの同値類は $H^3(G, \mathbb{C}^*)$ によって分類される。

この MPO $\{O_g\}_{g \in G}$ の作用によって不変な MPS の張る部分空間 (基底状態空間) を考える。単位元は対称性操作を何もしないことに対応するため、 O_e の作用は自明でなければならず、 $M_{e,x}^y = \delta_{x,y}$ である。MPS の重複度は (3.6.10) により

$$\sum_z M_{g,z}^y M_{h,x}^z = M_{gh,x}^y$$

となるため、行列

$$M_g := \sum_{x,y} M_{g,x}^y |y\rangle \langle x|$$

は G の線形表現を組む。 M_g は可逆で、そのものも逆行列も行列要素 $M_{g,x}^y$ が非負整数なので、各行・各列にただ一つの 1 が存在する置換行列である。よって (3.6.8) の帰結として、 $g \in G$ と MPS block x を決めるごとに

$$\begin{array}{c} g \\ | \\ x \end{array} = \begin{array}{c} g \\ | \\ x \end{array} \begin{array}{c} \boxed{} \\ | \\ \boxed{} \end{array} \begin{array}{c} y \\ | \\ y \end{array} \begin{array}{c} \boxed{} \\ | \\ \boxed{} \end{array} \begin{array}{c} g \\ | \\ x \end{array}$$

$$\begin{array}{c}
 \text{Left side: } y \text{ (red line from left)} \\
 \text{Box 1: } h \text{ (black line from top), } g \text{ (black line to top)} \\
 \text{Box 2: } h \cdot x \text{ (red line from top), } x \text{ (red line from bottom)} \\
 \text{Right side: } y \text{ (red line from left)} \\
 \text{Box 3: } gh \text{ (black line from top), } g \text{ (black line to top), } h \text{ (black line to top)} \\
 \text{Box 4: } x \text{ (red line from bottom)}
 \end{array}
 = L_{g,h}^x$$
$$L_{h,k}^x L_{g,hk}^x = \omega(g, h, k) L_{g,h}^{k \cdot x} L_{gh,k}^x \quad (3.6.16)$$
$$L_{g,h}^x \rightarrow L_{g,h}^x \frac{\gamma_{g,h \cdot x} \gamma_{h,x}}{\gamma_{gh,x} \beta_{g,h}} \quad (3.6.17)$$

ここまでの議論をもとに、有限群 G のような on-site 対称性による 1 次元 SPT 相の分類を行う．対称性が on-site に実現できること、すなわち各サイトにおいて対称性の作用が対称性の結合則 (i.e. $U_g(U_h U_k) = (U_g U_h) U_k$) を厳密に満たすことを要請すると F -シンボルは自明にならないといけない．また SPT 相の基底状態は単一なので L -シンボル $L_{\bullet, \bullet}^x$ は x に依存しない． L -シンボルの pentagon identity (3.6.16) は

と書き直すことができ, L は群の射影表現の乗数系を組む (Cor. 83). (3.6.17) による同一視は等価な射影表現の乗数系の同一視に他ならない. 射影表現の分類は 2 次の群コホモロジー $H^2(G, U(1))$ によって与えられる (Thm. 85) ので, 以下の定理が得られる.

一様な on-site 対称性が有限群 G で与えられる 1 次元 SPT 相は, 2 次の群コホモロジー $H^2(G, \mathbb{C}^*)$ に
よって分類される.

$$\text{---} \boxed{B} \text{---} = e^{i\theta} \text{---} \boxed{X^\dagger} \text{---} \boxed{A} \text{---} \boxed{X} \text{---}$$
$$\begin{array}{c} | \\ \boxed{g} \\ \boxed{A} \\ \hline \end{array} = e^{i\theta_g} \begin{array}{c} | \\ \boxed{X_g^\dagger} \\ \boxed{A} \\ \boxed{X_g} \\ \hline \end{array}$$

81

残る. この端のテンソルは対称性操作 $g, h \in G$ によって生じたものであり, 対称操作自体は $g \cdot h = gh$ の群演算に従うので,

$$\begin{aligned}
 \text{---} \boxed{X_h^\dagger} \text{---} \boxed{X_g^\dagger} \text{---} \boxed{A^L} \text{---} \boxed{X_g} \text{---} \boxed{X_h} \text{---} &= \begin{array}{c} \boxed{g} \\ | \\ \boxed{h} \\ | \\ \boxed{A^L} \end{array} \text{---} = \begin{array}{c} \boxed{gh} \\ | \\ \boxed{A^L} \end{array} \text{---} \\
 &= \text{---} \boxed{X_{gh}^\dagger} \text{---} \boxed{A^L} \text{---} \boxed{X_{gh}} \text{---}
 \end{aligned}$$

が成り立つ. この関係式を満たすには, $X_g X_h = e^{i\phi(g,h)} X_{gh}$ の射影表現を組まなければならない. Sec. 3.3 で紹介した AKLT 模型や Sec. 3.4 のクラスター模型はいずれも周期境界条件では一意な基底状態を持つが, 開境界条件では端に自由度が現れて基底状態が縮退していた. これは乗数系が非自明な射影表現は表現空間が 2 次元以上である (Cor. 84) ことを反映している. 実際, AKLT 模型では端に $\text{SO}(3)$ 対称性の非自明な射影表現であるスピン $1/2$ が現れ, クラスター模型では端に $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ 対称性の非自明な射影表現が生じることを見た. 上記の考察は模型を配置する格子の形状により基底状態の性質が変わることをよく表している.

第 4 章

toric code 模型と X cube 模型

空間 2 次元以上のトポロジカル相において基底状態が対称性を守りつつ縮退するケースが知られ、トポロジカル秩序と呼ばれる。大きな特徴として基底状態からの準粒子励起がボゾンでもフェルミオンでもない統計性であるエニオン統計に従うことが挙げられる。代表的な模型に 2 次元の toric code 模型 [45] があるが、これを含め相の分類を議論する文脈で多く扱われるエニオン模型ではエニオンは単独で自由に運動することが帰結ないし仮定される。

一方で X cube 模型 [5] に代表されるフラクトン系では単一のエニオンが孤立して運動することが禁止される。エニオンはトポロジカル秩序に由来し、エニオンの運動が制限されることは部分系対称性と呼ばれる、作用が空間位置に依存する対称性と関係している。次章では作用が空間位置に依存する対称性を持つ 1 次元トポロジカル相の分類を議論するが、その動機づけとして X cube 模型を、さらにその基礎となる toric code 模型を紹介する。

4.1 toric code 模型

4.1.1 模型の定義

正方格子の各辺にスピン $1/2$ が配置されているとし、辺 e に配置されたスピンのパウリ行列を X_e, Y_e, Z_e で表す。Hamiltonian として

$$H_{\text{toric}} = - \sum_{v: \text{vertex}} A_v - \sum_{p: \text{plaquette}} B_p, \quad A_v = \text{---} \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} \text{---} X_e, \quad B_p = \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \bullet \\ \hline \end{array} Z_e$$

を用意する。すべての項は互いに可換なので同時固有状態を取ることができ、基底状態はすべての項の $+1$ 固有状態で与えられる。on-site な対称性はすべての辺 e に X_e を作用させる \mathbb{Z}_2 対称性と、すべての辺に Z_e を作用させる \mathbb{Z}_2 対称性の直積で与えられる。しかし基底状態にて秩序変数の期待値を計算すると

$$\langle \text{GS} | \prod_e X_e | \text{GS} \rangle = \langle \text{GS} | \prod_e Z_e | \text{GS} \rangle = 1$$

なので基底状態はこれらの対称性を破らない。ここで格子に上下両方向の周期境界条件を課す。すなわち種数 $g = 1$ のトーラス上に模型を定義する。状態によらない拘束条件 $\prod_c A_c = \prod_p B_p = 1$ から自由度を数えると、頂点数 V から 1 つ引いた数の A_v 、プラケット数 P から 1 つ引いた数の B_p が独立であり、辺の数 E と合わせ

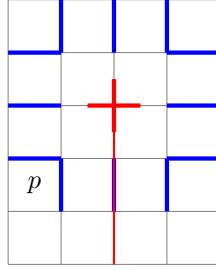


図 4.1: toric code 模型における励起の移動. 青線で表した't Hooft ループにより B_p タイプの励起を, Wilson line の片方の端点周囲を回すように移動させると, Wilson line と't Hooft ループが交差する点で位相 -1 を与える.

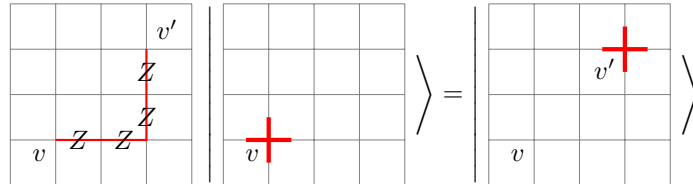
て基底状態空間の自由度は

$$\dim \mathcal{H}_{\text{ground state}} = 2^{E-(V-1)-(P-1)}$$

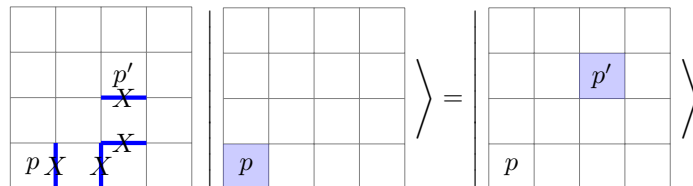
だけ存在する. 種数 g のトーラスにおける Euler 標数 $V - E + P = 2 - 2g$ を用いると 4 重縮退することがわかる.

4.1.2 準粒子励起

第一励起状態はいずれかの A_v または B_p の固有値が -1 になる状態である. 例えば $A_v = -1$ の励起を用意する. この第一励起状態に対して, 片方の端点を v とし, 正方格子のリンクをなぞる経路 γ 上に Z_e をかけ続ける Wilson line $\prod_{e \in \gamma} Z_e$ を作用させると, $A_v = -1$ の励起が γ のもう片方の端点に移動する.



この端点をつなげるとエネルギー固有値を変えない演算子 (Wilson loop) を得る. 同様にして $B_p = -1$ の励起は下のような't Hooft line で移動でき, 't Hooft line の端点をつなげた't Hooft ループもエネルギー固有値を変えない演算子となる.



基底状態からの遷移で励起を生成するには, A_v タイプの励起を二つ同時に生成するか, B_p タイプの励起を二つ同時に生成する必要がある. 両方のタイプを同時に生成して Fig. 4.1 のように移動させたとしよう. $B_p = -1$ タイプの励起を Wilson line の片方の端点周囲を回すように移動させると, Wilson line と't Hooft ループが交差する点で位相 -1 を与える. これはボゾンやフェルミオンでは生じない, エニオン統計性の一例である.

Wilson loop と't Hooft loop は共に Hamiltonian と可換なので系の対称性になっている。両方ともループを保つ限り対称性演算子のままであることに注目すると、熱力学極限の代わりに格子を稠密に取った場合、ループの滑らかな変形が許される。空間 2 次元以上のトポロジカル相の分類問題では、Wilson loop や't Hooft loop の滑らかな変形が許されることを前提に議論が進められることが多い。空間 d 次元系の対称性とは時空 $d+1$ 次元に作用しトポロジカルに変形可能な台を持つ演算子として定義する一般化対称性の文脈はこの議論に立脚している。

4.2 X cube 模型

前述のように、高次元トポロジカル相の分類問題にて、トポロジカル秩序を有する系の対称性演算子は、その台を滑らかに変形できることが暗黙裡に仮定される。しかし対称性をすべて守る基底状態が縮退したりエニオンが発生するというトポロジカル秩序特有の性質がありながらも、対称性演算子の台が滑らかに変形できないケースが存在する。その代表例が X cube 模型である。

4.2.1 模型の定義

空間 3 次元立方格子の辺上にスピン $1/2$ を配置する。Hamiltonian を

$$H_{XC} := - \sum_{c: \text{cube}} A_c - \sum_{\substack{v: \text{vertex} \\ \mu=x,y,z}} B_v^\mu, \quad A_c := \text{cube with red dots at vertices and midpoints of edges}, \quad B_v^\mu := \text{edge with blue dots at vertices and a red dot at midpoint, labeled with } \mu \text{ and } Z_e$$

とすると A_c, B_v^μ は全て可換かつ 2 乗で恒等演算子になるので、基底状態はすべての項の $+1$ 固有状態で与えられる。on-site の全領域にわたる対称性はすべての辺 e に X_e を作用させる \mathbb{Z}_2 対称性と、すべての辺に Z_e を作用させる \mathbb{Z}_2 対称性の直積で与えられるが、基底状態における秩序変数期待値は

$$\langle \text{GS} | \prod_e X_e | \text{GS} \rangle = \langle \text{GS} | \prod_e Z_e | \text{GS} \rangle = 1$$

なので基底状態はこれらの対称性を破らない。以下、3 方向に長さ L_1, L_2, L_3 の周期境界条件を課す。すなわち格子を 3-トーラス $S^1 \times S^1 \times S^1$ 上に定義する。基底状態の縮退度を数えるには、まず $A_c | \text{GS} \rangle = | \text{GS} \rangle$ の条件数がセルの数に一致して $L_1 L_2 L_3$ 個、 $B_v^\mu | \text{GS} \rangle = | \text{GS} \rangle$ の条件数が頂点の数の 3 倍に一致して $3L_1 L_2 L_3$ 個存在し、そのうちの拘束条件を数えれば良い。立方体演算子については

- $\prod_c A_c = 1$ が 1 つの拘束条件を与える
- $\prod_{c \in \text{cube in a membrane orthogonal to direction } \mu} A_c = 1$ がさらに $3(L_\mu - 1)$ 個の拘束条件を与える (最後の面の積はその他の積に全体の積をかけることで得られる)

頂点演算子については

- $B_v^x B_v^y B_v^z = 1$ が頂点数 $L_1 L_2 L_3$ 個の拘束条件を与える
- $\prod_{v \in xy \text{ plane}} B_v^z = 1$ がさらに L_3 個の拘束条件を与える
- $\prod_{v \in yz \text{ plane}} B_v^x = 1$ がさらに L_1 個の拘束条件を与える
- $\prod_{v \in zx \text{ plane}} B_v^y = 1$ がさらに $L_2 - 1$ 個の拘束条件を与える

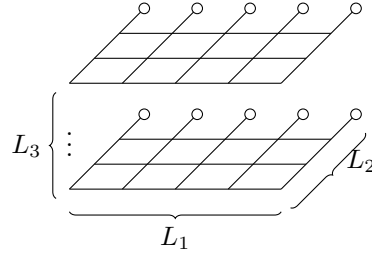


図 4.2: (4.2.1) の変形. $y \neq L_2$ における xz 平面中での B_v^y の積は 1 になるが, これを xy 平面と yz 平面中での B_v^z, B_v^x の積に書き換える.

となる. 最後の zx -面での積では Fig. 4.2 を参考に

$$\begin{aligned} \prod_{v \in \{y=L_2\}} B_v^y &= \prod_{v \in \{y=L_2\}} B_v^x B_v^z = \left(\prod_{1 \leq S_z \leq L_3} \prod_{v \in \{z=S_z\} \setminus \{y=L_2\}} B_v^z \right) \left(\prod_{1 \leq S_x \leq L_1} \prod_{v \in \{x=S_x\} \setminus \{y=L_2\}} B_v^x \right) \\ &= \prod_{1 \leq S_y \leq L_2-1} \prod_{v \in \{y=S_y\}} B_v^z B_v^x = \prod_{1 \leq S_y \leq L_2-1} \prod_{v \in \{y=S_y\}} B_v^y \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

が成り立つため, L_2 個目の拘束条件は他の拘束条件から導かれる. 以上をまとめて基底状態の縮退度は

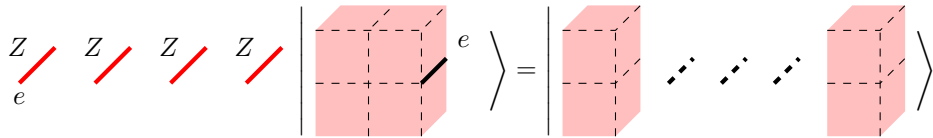
$$\begin{aligned} \log_2 \dim \mathcal{H}_{\text{GS}} &= 3L_1 L_2 L_3 - [L_1 L_2 L_3 - (1 + L_1 - 1 + L_2 - 1 + L_3 - 1)] \\ &\quad - [2L_1 L_2 L_3 - (L_1 L_2 L_3 + L_1 + L_2 + L_3 - 1)] \\ &= 2(L_1 + L_2 + L_3) - 3 \end{aligned}$$

である. *1

4.2.2 準粒子励起

準粒子励起は $A_c = -1$ のタイプと $B_v^u = -1$ のタイプに分けられる.

基底状態の一つの辺 e に対して Z_e を作用させると, その辺 e を含む 4 つの立方体で $A_c = -1$ の励起が発生する. 励起した B_c が隣接しているとき, 't Hooft line を作用させると



のように, 隣接する 2 つの立方体を同時に移動できる. Fig. 4.3 のように膜状に Z_e を作用させると, 膜の端に立方体励起が発生し, この膜が構成する長方形を変形するように立方体励起を移動できる. しかし単一の立方体励起はエネルギーロスなしで移動できず, 励起の運動には必ず二つ以上の立方体を同時に動かさなければならない.

*1 熱力学極限により縮退度が発散するために, 通常のトポロジカル秩序の解析で用いられる手法が適用できないことが多い. 本稿ではその点深入りしないが, トポロジカル相の分類においてほとんどの場合縮退度は定数で抑えられることが暗黙裡に仮定されている.

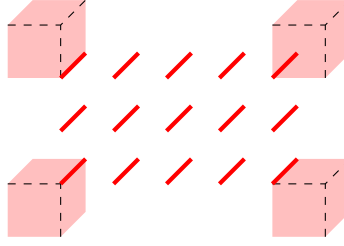


図 4.3: $A_c = -1$ の膜状励起. 端に現れる単一立方体はエネルギーロスなしで移動できず, 二つ以上の立方体を同時に動かさなければならない.

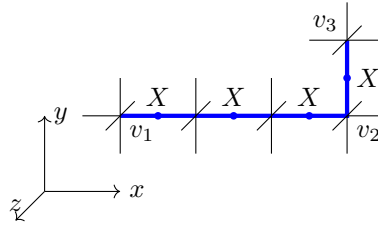


図 4.4: Wilson line と励起. 青線で表した Wilson line の各 link に X_l を作用させる. Wilson line の端点に加えて折れ曲がる点でも励起が発生する. 図では v_1 にて $\mu = y, z$ の, v_2 にて $\mu = x, y$ の, v_3 にて $\mu = x, z$ の励起が生じている.

基底状態の一つの辺について直線状に X_e を作用させると, 端点に $B_v^\mu = -1$ の励起が 2 つずつ発生する. この直線を伸ばす向きに励起を移動させることはできるが, Fig. 4.4 のように直線状の演算子を途中で折ると, 折れ曲がった部分で新たに励起が発生する.

toric code 模型では Wilson line や't Hooft line の台を滑らかに変形できたが, X cube 模型では変形のたびに励起が発生する. この機構の遠因として, X cube 模型の部分系対称性がある [5].

$$\prod_{e \parallel \mu \in \text{plane } S \text{ orthogonal to direction } \mu} Z_e, \quad \prod_{e \parallel \mu \in \text{line } \gamma \text{ along direction } \mu} X_e$$

前者は Fig. 4.3 に示した膜状の演算子を, 後者は折れない直線状の Wilson line をそれぞれ周期境界条件によってループさせたものである. 対称性演算子の台が空間の一部に制限されかつ変形できないことが大きな特徴である. 一般に部分系対称性を有するトポロジカル秩序は運動が制限されたエニオン (フラクトン) を生じることが知られている. 次章では部分系対称性に限らず作用が空間位置に依存する対称性を考察し, フラクトンを 1 次元 gapped 系で再現する.

第 5 章

多極子対称性下の SPT 相の分類

本章では空間位置に依存する対称性のもと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 [46, 47] に基づく。SymTFT や defect network を用いた分類の結果 [48–50] とも整合していることを付記しておく。

5.1 多極子対称性

電磁気学において、静電ポテンシャル ϕ の多重極展開は

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

と記述される。ここに $x = |\mathbf{x}|$ と $r = |\mathbf{r}|$ はベクトルの大きさ、 ρ は電荷密度、 P_n は n 次の Legendre 多項式、 θ 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

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

を得る。本稿の興味の対象に合わせて空間 1 次元格子 $\Lambda_s \subset \mathbb{Z}$ に議論を絞る。多極子電荷は

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

で表される。例えば $U(1)$ 変換により n 次多極子を保存する対称性 (rank n multipole symmetry) は $e^{i\theta Q_n}$ と書くことができ、そのもとで対称なボゾン系のもっとも簡単な Hamiltonian は

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



図 5.1: 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 [51, 52]. 実際, ボゾン系にて $\rho(x) = b_x^\dagger b_x$ なので

$$\begin{aligned}
 [H_n, Q_m] &= \sum_{x, y \in \Lambda_s} \left[\prod_{z=0}^n b_{y+z}^{(-1)^z \binom{n}{z}}, x^m b_x^\dagger b_x \right] + \text{h.c.} \\
 &= \sum_{y \in \Lambda_s} \sum_{z=0}^n b_y b_{y+1}^{-n} \cdots b_{y+z-1}^{(-1)^{z-1} \binom{n}{z-1}} \left[b_{y+z}^{(-1)^z \binom{n}{z}}, (y+z)^m b_{y+z}^\dagger b_{y+z} \right] b_{y+z+1}^{(-1)^{z+1} \binom{n}{z+1}} \cdots b_{y+n}^{(-1)^n \binom{n}{n}} + \text{h.c.} \\
 &= \sum_{y \in \Lambda_s} \sum_{z=0}^n (-1)^z \binom{n}{z} (y+z)^m b_y b_{y+1}^{-n} \cdots b_{y+n}^{(-1)^n \binom{n}{n}} + \text{h.c.} \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

となる. ただし, 最後の等号で以下の補題および $m < N$ 次多項式 f は $\Delta^N f = 0$ であることを用いた.

Lem. 40: 差分演算子の累乗と二項係数

任意の関数 $f: \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{C}$ に対して差分演算子 Δ を $\Delta f(k) := f(k+1) - f(k)$ と定義すると,

$$\Delta^N f(k) = \sum_{m=0}^N (-1)^{N-m} \binom{N}{m} f(k+m).$$

Prf.

並進演算子 T を $Tf(k) := f(k+1)$ と定義すると, $\Delta = T - 1$ である. 二項展開により

$$\begin{aligned}
 \Delta^N f(k) &= (T - 1)^N f(k) = \sum_{m=0}^N (-1)^{N-m} \binom{N}{m} T^m f(k) \\
 &= \sum_{m=0}^N (-1)^{N-m} \binom{N}{m} f(k+m).
 \end{aligned}$$

□

$n = 1$ の dipole symmetry では

$$H_1 = \sum_{x \in \Lambda_s} b_{x-1}^\dagger b_x^2 b_{x+1}^\dagger + \text{h.c.}$$

となるが, これにより生成されるダイナミクス $e^{iH_1 t}$ では Fig. 5.1 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 Sec. 4.2 で見た X cube 模型に代表されるフラクトン系に特有の現象である.

以下, 簡単のために対称性 G を有限可換群とし, 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 の直積で表せることを背景に, \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 Λ 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 $\{U_g^{(n)}\}_{g,n}$ 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ことから示される (Prop. 104). 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もっとも簡単な Hamiltonian をボゾン系で構成したのと同様に, qudit 系でも

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

とすれば, 総和の各項は 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す. $m \leq n$ 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,

$$\begin{aligned} H_n U_g^{(m)} &= \sum_{x \in \Lambda_s} \prod_{y=0}^{n+1} \left(Z_{x+y}^{(-1)^y \binom{n+1}{y}} X_{x+y}^{\binom{x+y+m-1}{m}} \right) \\ &= \sum_{x \in \Lambda_s} \prod_{y=0}^{n+1} \left(\omega^{(-1)^y \binom{x+y+m-1}{m} \binom{n+1}{y}} X_{x+y}^{\binom{x+y+m-1}{m}} Z_{x+y}^{(-1)^y \binom{n+1}{y}} \right) \\ &= \sum_{x \in \Lambda_s} \omega^{(-1)^{n+1} \sum_{y=0}^{n+1} (-1)^{n+1-y} \binom{n+1}{y} \binom{x+y+m-1}{m}} h_x U_g^{(m)} \end{aligned}$$

にて, $\binom{x+y+m-1}{m}$ はたかだか m 次の多項式なので Lem. 40 により $m < n+1$ なら ω の指数は 0 となるが, 一般に $m \geq n+1$ では位相因子が残って非可換になる.

5.2 MPS を用いた多極子 SPT 相の分類

一様な対称性が有限群の場合, 1 次元 SPT 相は (1+1) 次元 SPT 相は MPS によって分類できた (Sec. 3.6). 前節で導入した空間非一様に作用する対称性でも MPS の基本定理は依然として適用可能である. 本節では空間非一様に作用する対称性を生成する多極子対称性と並進対称性のもとの SPT 相の分類を与えた [47] の結果をレビューする. 多極子対称性は有限可換群 G から構成し, 手法は [46] によっている.

5.2.1 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 Λ の各点に配置する.

SPT 基底状態として injective MPS

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

をとり, 次数 r の多極子対称性

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

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 (Thm. 28) によって, あるユニタリ $X_g^{(0)}$ が存在して

$$\begin{array}{c} \boxed{g} \\ | \\ \text{---} \boxed{A^{(i)}} \text{---} \end{array} \doteq \text{---} \boxed{X_g^{(0)\dagger}} \boxed{A^{(i)}} \boxed{X_g^{(0)}} \text{---}$$

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. $r = 1$ の双極子対称性 $U_g^{(1)}$ による作用は

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

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,

$$\text{---} \boxed{X_g^{(0)\dagger}} \boxed{A^{(i)}} \text{---} = \text{---} \boxed{X_g^{(1)\dagger}} \boxed{A^{(x)}} \boxed{X_g^{(1)}} \text{---} \quad (5.2.1)$$

が成り立つ. 転送行列を用いた厳密な証明は appendix D.3.1 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 Tr の中身は $B_r(i) := \binom{i+r-1}{r}$ を用いて

$$\prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{B_r(i)} A (X_g^{(0)})^{B_r(i)} = \prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{-B_r(i-1)+B_r(i)} A = \prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{B_{r-1}(i)} A \quad (5.2.2)$$

と書ける。^{*1} 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。(5.2.1) 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, (5.2.2) 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

$$\prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{B_r(i)} A (X_g^{(0)})^{B_r(i)} \doteq \prod_i (X_g^{(r-1)\dagger})^{B_1(i)} A (X_g^{(r-1)})^{B_1(i)} = \prod_i (X_g^{(r-1)\dagger})^{B_0(i)} A = \prod_i X_g^{(r-1)\dagger} A$$

を得る. 基底状態が縮退を許さないことから

$$\begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{X_g^{(r-1)\dagger}} - \boxed{A^{(i)}} - \end{array} \doteq \begin{array}{c} | \\ \hline \boxed{X_g^{(r)\dagger}} - \boxed{A^{(x)}} - \boxed{X_g^{(r)}} - \end{array} \quad (5.2.3)$$

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 D.3.1 を参照せよ.

一様な on-site の対称性の下での SPT 相はバルクでは自明だが^{*}, 境界に非自明な自由度を有していた. 多極子 SPT 相でも非自明な自由度が現れる. L を任意にとって具体的に $U_g^{(k)} |\psi\rangle$ の作用を計算すると,

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

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.

^{*1} ここではバルクに対する作用を考えているので, 境界項 ($i = 1, L$ 付近) 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. [51] 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.

5.2.2 可換群多極子 SPT 相の分類

ゲージの交換関係の制限

一様な on-site 対称性の下での 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 (Sec. 3.4). $X_g^{(k)}$ は群元 $g \in G$ とランク $0 \leq k \leq r$ 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 $G^{\times(r+1)}$ 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, 全体系への作用 $U_g^{(k)}$ 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.*² 具体的には,

$$\begin{aligned} X_h^{(l)\dagger} X_g^{(k)\dagger} A \cdots A \prod_{m=0}^k (X_g^{(m)})^{B_{k-m}(L)} \prod_{n=0}^l (X_h^{(n)})^{B_{l-n}(L)} \\ = X_g^{(k)\dagger} X_h^{(l)\dagger} A \cdots A \prod_{n=0}^l (X_h^{(n)})^{B_{l-n}(L)} \prod_{m=0}^k (X_g^{(m)})^{B_{k-m}(L)} \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

を要請する.

G が有限可換群であることに注意して,

$$X_g^{(k)} X_h^{(l)} =: e^{i\theta_{g,h}(k,l)} X_h^{(l)} X_g^{(k)} \quad (5.2.5)$$

とおく. Prop. 91 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.*³ よって (5.2.4) を満たす θ 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

$$\exp \left[i \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l \theta_{g,h}(m,n) B_{k-m}(L) B_{l-n}(L) - i\theta_{g,h}(k,l) \right] = 1 \quad (5.2.6)$$

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. 41

(5.2.6) 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,

$$\theta_{g,h}(m,n) = \theta_{g,h}(m+1,n) + \theta_{g,h}(m,n+1) \quad (\text{for } m, n < r) \quad (5.2.7)$$

$$\theta_{g,h}(m,n) = 0 \quad (\text{for } m+n < r) \quad (5.2.8)$$

が共に成り立つことは同値.

証明は技術的なので appendix D.3.2 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. 5.1).

*² SPT 相の端で射影表現が生じると言ったとき, 一端のみに着目していたことに注意せよ. 二つの端を合わせると射影表現の位相が打ち消しあって全体として線形表現になる.

*³ 可換群 G の射影表現 V が ω を乗数系とすると, $g, h \in G$ に対して

$$V_g V_h (V_h V_g)^{-1} = \frac{\omega(g,h)}{\omega(h,g)} \cdot V_{gh} V_{hg}^{-1} = \frac{\omega(g,h)}{\omega(h,g)}$$

である. Prop. 91 の結果から右辺の分類は $H^2(G, U(1))$ に同型である.

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

表 5.1: $r = 3$ 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 (5.2.7) と (5.2.8) により決定される.

加えて, (5.2.5) にて再度ゲージを交換することで

$$e^{i\theta_{g,h}(k,l)} = e^{-i\theta_{h,g}(l,k)} \quad (5.2.9)$$

が成り立つ.

自由度のカウント

これにより Tbl. 5.1 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 $r = 3$ の場合を例に取るが, 一般の r でも同様の議論が可能である.

(5.2.8) 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 (5.2.7) 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 (5.2.9) により

$$\theta_{g,h}(0, 3) = -\theta_{h,g}(3, 0) \stackrel{(5.2.7)}{=} \theta_{h,g}(0, 3)$$

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, (5.2.7) 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. (5.2.9) を考慮すると

$$\theta_{g,h}(1, 3) = -\theta_{h,g}(3, 1) \stackrel{(5.2.7)}{=} -\theta_{h,g}(1, 3) - 2\theta_{h,g}(0, 3)$$

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,

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

となるため, $\theta_{g,h}(1, 3)$ の g, h に関する対称な成分が $\theta_{g,h}(0, 3)$ の自由度で完全に決定される. $\theta_{g,h}(2, 3)$ を決定すると, (5.2.7) により $\theta_{g,h}(3, 2)$ が決定され, (5.2.9) 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 の交換に関して本質的に対称. 最後に $\theta_{g,h}(3,3)$ を決定すると Tbl. 5.1 の全ての成分が決定される. (5.2.9) 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, $r = 3$ の多極子 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.

一般のランク r についても同様の議論が成り立ち,

- $\text{Span}\{\theta_{g,h}(k,l) \mid g, h \in G, 0 \leq k, l \leq r\} = \text{Span}\{\theta_{g,h}(k,r) \mid g, h \in G, 0 \leq k \leq r\}$
- $\theta_{g,h}(k,r)$ は $k+r$ が偶数のとき本質的に g, h 反対称, 奇数のとき本質的に g, h 対称

である.

自由度の代数による記述

$\{X_g^{(k)} \mid g \in G, 0 \leq k \leq r\}$ は並進対称性の作用を除けば内部対称性 $G^{\times(r+1)}$ の射影表現を組んでいるので, その乗数系は $H^2(G^{\times(r+1)}, U(1))$ で分類される. 直積群のコホモロジーは Künneth の公式により

$$H^2(G^{\times(r+1)}, U(1)) \cong (H^2(G, U(1)))^{\oplus(r+1)} \oplus (H^1(G, H^1(G, U(1))))^{\oplus \binom{r+1}{2}}$$

と分解されることが知られている. $H^2(G, U(1))$ は同ランクのゲージ同士の交換関係 $[X_g^{(k)}, X_h^{(k)}]$ から現れて Tbl. 5.1 の対角成分に対応し, 残りは非対角成分に対応する.

非対角成分 $\theta_{g,h}(k,l)$ ($k \neq l$) が本質的に g, h 対称なとき, 対角部分群 $G \leq G \times G$ の表現 $\{X_g^{(k)} X_g^{(l)} \mid g \in G\}$ の分だけ自由度が自明になる. 具体的には

$$\begin{aligned} X_g^{(k)} X_g^{(l)} X_h^{(k)} X_h^{(l)} &= e^{i\theta_{g,h}(l,l)} e^{i\theta_{g,h}(k,k)} e^{i(\theta_{g,h}(k,l) + \theta_{g,h}(l,k))} X_h^{(k)} X_h^{(l)} X_g^{(k)} X_g^{(l)} \\ &= e^{i\theta_{g,h}(l,l)} e^{i\theta_{g,h}(k,k)} e^{i(\theta_{g,h}(k,l) - \theta_{h,g}(k,l))} X_h^{(k)} X_h^{(l)} X_g^{(k)} X_g^{(l)} \end{aligned}$$

にて, $e^{i(\theta_{g,h}(k,l) - \theta_{h,g}(k,l))}$ がより低ランクの自由度のみで表される. 低ランクから順に自由度を決定していくと, 対角部分群の射影表現の乗数系は全て既出の自由度で決定される. 対角部分群の射影表現は 1-フレーバー G での分類 $H^2(G, U(1))$ で与えられるので, 本質的に g, h 対称な $\theta_{g,h}(k,l)$ の自由度は $H^1(G, H^1(G, U(1)))/H^2(G, U(1))$ で与えられる. 一方, 本質的に g, h 反対称な $\theta_{g,h}(k,l)$ は対称の自由度で割り直せばいいので,

$$\frac{H^1(G, H^1(G, U(1)))}{H^1(G, H^1(G, U(1)))/[H^2(G, U(1))]} \cong H^2(G, U(1))$$

で与えられる. まとめると, ランク r の多極子 SPT 相の分類は

$$\mathcal{C}^{(r)}(G) = \begin{cases} H^2(G, U(1)) \oplus \bigoplus_{i=0}^{r/2} \left(H^2(G, U(1)) \oplus \frac{H^1(G, H^1(G, U(1)))}{H^2(G, U(1))} \right) & (r : \text{even}) \\ \bigoplus_{i=0}^{(r+1)/2} \left(H^2(G, U(1)) \oplus \frac{H^1(G, H^1(G, U(1)))}{H^2(G, U(1))} \right) & (r : \text{odd}) \end{cases} \quad (5.2.10)$$

で与えられる. なお parent Hamiltonian (cf. Sec. 2.5) を構成できるので, 全ての相は空でない.

5.3 多極子 SPT 相の具体例

ランク r の多極子 SPT 相は \mathbb{Z}_N スピン系にて具体例を系統的に組むことができる [51, 52]. Z, X を \mathbb{Z}_N , Z, \mathcal{X} を \mathbb{Z}_M スピンの qudit とする. すなわち

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

これらは $G = \mathbb{Z}_N \times \mathbb{Z}_M$ の忠実な射影表現を構成する.

5.3.1 ランク $r = 2n + 1$ の多極子 SPT 相

$\eta \in \mathbb{Z}_N$ を用いた Hamiltonian として

$$a_j^{(2n+1, \eta)} = X_j \left(Z_{j-n-1} Z_{j-n}^{-\binom{2n+2}{1}} Z_{j-n+1}^{\binom{2n+2}{2}} \times \cdots \times Z_{j+n}^{-\binom{2n+2}{2n+1}} Z_{j+n+1}^{\binom{2n+2}{2n+2}} \right)^\eta = X_j \prod_{k=0}^{2n+2} Z_{j-(n+1)+k}^{(-1)^k \binom{2n+2}{k} \eta}$$

$$H_\eta^{(2n+1)} = - \sum_{j \in \Lambda_s} \left(a_j^{(2n+1, \eta)} + \text{h.c.} \right)$$

をとる. 任意の i, j で $a_i a_j = a_j a_i$ を満たすので同時対角化が可能で, 基底状態は $a_j^{(2n+1, \eta)} = 1$ を全ての j で満たす状態である. この Hamiltonian は $r = 2n + 1$ 以下のランクの多極子対称性

$$U^{(r_0)} := \prod_{i \in \Lambda_s} X_i^{\binom{i+r_0-1}{r_0}}$$

を持つ. Sec. 5.1 の計算を踏襲しているので可換性や対称性は同様に確かめられる.

長さ $L \gg r$ の open boundary condition を考える. a_1, a_2, \dots, a_{n+1} および a_{L-n}, \dots, a_L は Hamiltonian に現れず,

$$H_{\eta, \text{OBC}}^{(2n+1)} = - \sum_{j=n+2}^{L-n-1} \left(a_j^{(2n+1, \eta)} + \text{h.c.} \right)$$

となる. バルクにおける a_j の積は

$$\prod_{j \in \Lambda_s} \left(a_j^{(2n+1, \eta)} \right)^{\binom{j+r_0-1}{r_0}} \Bigg|_{x \in \text{bulk}} = X_x^{\binom{x+r_0-1}{r_0}}$$

となり, Z による作用が相殺する. Fig. 5.2 を参照. これを踏まえると

$$1 = \prod_{j=n+2}^{L-n-1} \left(a_j^{(r, \eta)} \right)^{\binom{j+r_0-1}{r_0}} =: \mathcal{L}_{r_0}^{\eta \dagger} U^{(r_0)} \mathcal{R}_{r_0}^{\eta \dagger}$$

と表すことができる. すなわちランク r_0 の多極子対称性の基底状態空間への作用は $U^{(r_0)} = \mathcal{L}_{r_0}^\eta \cdot \mathcal{R}_{r_0}^\eta$ のように台が離れた演算子の積へ分解される. \mathcal{L}_{r_0} を具体的に計算してランクごとに交換関係を見ると, 少なくとも低ランク ($r \leq 7$) では

$$\mathcal{L}_{r_1}^\eta \mathcal{L}_{r_2}^\eta = \exp \left[\frac{2\pi i}{N} \eta m_{r_1, r_2} \right] \mathcal{L}_{r_2}^\eta \mathcal{L}_{r_1}^\eta$$

の形で書けて, $n_{r_1, r_2} \in \mathbb{Z}$ が Tbl. 5.2 のように与えられる. (5.2.7), (5.2.8) を満たすことに注意せよ. $U^{(r_1)}$ と

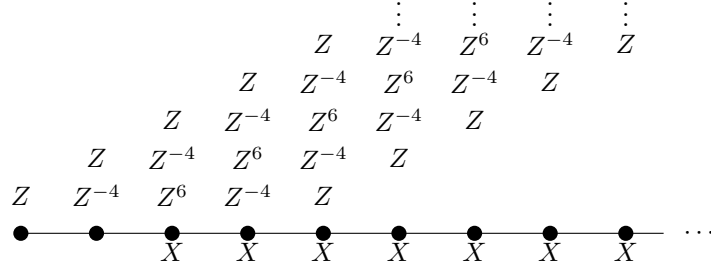


図 5.2: $r = 3, r_0 = 0$ における左端への a_j の作用. $x \geq 5 = r + 2$ では Z による作用が自明になる.

$r_1 \backslash r_2$	\cdots	$n-3$	$n-2$	$n-1$	n	$n+1$	$n+2$	$n+3$	$n+4$	\cdots
\vdots										\cdots
$n-3$									-1	\cdots
$n-2$								1	$\binom{3}{1}$	\cdots
$n-1$							-1	$-\binom{2}{1}$	$-\binom{3}{2}$	\cdots
n						1	1	1	1	\cdots
$n+1$					-1					
$n+2$				1	-1					
$n+3$			-1	$\binom{2}{1}$	-1					
$n+4$		1	$-\binom{3}{1}$	$\binom{3}{2}$	-1					
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots					

表 5.2: ランク $2n+1$ 多極子 SPT における非自明な交換関係の位相因子 n_{r_1, r_2}

$U^{(r_2)}$ は可換であることから,

$$\mathcal{R}_{r_1}^\eta \mathcal{R}_{r_2}^\eta = \exp \left[-\frac{2\pi i}{N} \eta n_{r_1, r_2} \right] \mathcal{R}_{r_2}^\eta \mathcal{R}_{r_1}^\eta$$

によって位相を相殺する. このようにトポロジカル相において線形表現で与えられた対称性演算子が部分系の射影表現へ分裂する性質は symmetry fractionalization として知られる [53]. 以上によりランク $2n+1$ の多極子 SPT 相の代表模型が与えられたことになるが, これはよく知られた結果

$$\frac{H^1(\mathbb{Z}_N, H^1(\mathbb{Z}_N, U(1)))}{H^2(\mathbb{Z}_N, U(1))} \cong \mathbb{Z}_N$$

と整合している.

5.3.2 ランク $r = 2n$ の多極子 SPT 相

$K = \gcd(N, M)$ と $\xi \in \mathbb{Z}_K$ により

$$\begin{aligned} a_j^{(2n, \xi)} &= X_{j+1}^\dagger \left(\tilde{Z}_{j-n} \tilde{Z}_{j-n+1}^{-(2n+1)} \tilde{Z}_{j-n+2}^{(2n+1)} \cdots \tilde{Z}_{j+n}^{(2n+1)} \tilde{Z}_{j+n+1}^{-(2n+1)} \right)^{M\xi} = X_{j+1}^\dagger \prod_{k=0}^{2n+1} \tilde{Z}_{j-n+k}^{(-1)^k \binom{2n+1}{k} M\xi} \\ \tilde{a}_j^{(2n, \xi)} &= \tilde{X}_j \left(Z_{j-n} Z_{j-n+1}^{-(2n+1)} Z_{j-n+2}^{(2n+1)} \cdots Z_{j+n}^{(2n+1)} Z_{j+n+1}^{-(2n+1)} \right)^{N\xi} = \tilde{X}_j \prod_{k=0}^{2n+1} Z_{j-n+k}^{(-1)^k \binom{2n+1}{k} N\xi} \\ H_\xi^{(2n)} &= - \sum_{j \in \Lambda_s} (a_{j, \xi} + \tilde{a}_{j, \xi} + \text{h.c.}) \end{aligned}$$

と定めると, $H_\xi^{(2n)}$ はランク $2n$ 以下の多極子対称性を有する commuting projector Hamiltonian である. 全く同様の計算により, 開放端条件下でランク r_0 の多極子対称性作用は

$$U^{(r_0)} = \prod_{i \in \Lambda_s} a_i^{\binom{i+r_0-1}{r_0}} = \mathcal{L}_{r_0}^\xi \cdot \mathcal{R}_{r_0}^\xi, \quad \tilde{U}^{(r_0)} = \prod_{i \in \Lambda_s} \tilde{a}_i^{\binom{i+r_0-1}{r_0}} = \tilde{\mathcal{L}}_{r_0}^\xi \cdot \tilde{\mathcal{R}}_{r_0}^\xi$$

と symmetry fractionalization を起こし, 具体的計算により少なくとも低ランク ($r \leq 6$) では

$$\mathcal{L}_0^\xi \tilde{\mathcal{L}}_r^\xi = \exp(-2\pi i \xi / K) \tilde{\mathcal{L}}_r^\xi \mathcal{L}_0^\xi, \quad \tilde{\mathcal{L}}_0^\xi \mathcal{L}_r^\xi = \exp(2\pi i \xi / K) \mathcal{L}_r^\xi \tilde{\mathcal{L}}_0^\xi$$

が確認できる. 以上により $\mathbb{Z}_{\gcd(N, M)}$ で分類されるランク $2n$ の多極子対称性による SPT 相の代表模型が与えられたことになるが, これはよく知られた結果

$$H^2(\mathbb{Z}_N \times \mathbb{Z}_M, U(1)) \cong \mathbb{Z}_{\gcd(N, M)}$$

と整合している.

以上の構成により Tbl. 5.1 でいうところの最右列に当たる自由度を全て実現できることがわかった. 具体的にランク r の多極子 SPT 模型を組む場合は, まず最低ランク r の多極子 SPT 模型を構成する. ランク $r+1$ に非自明な位相自由度が生じうるので, ランク $r+1$ の多極子 SPT 模型の位相を適切に fine tune して所望の自由度を与える. 以下, ランク $2r$ の自由度を決定するまでこの操作を繰り返せば, (5.2.10) で与えた分類に属する任意の多極子 SPT 相の代表模型を構成できる.

今後の展望

本研究に基づく今後の展望を述べる。第一にトポロジカル相の分類の近況と課題を掲げる。Chap. 5 の議論を拡張し, [44] の議論に基づき一般の非一様な対称性のもとでの 1 次元 gapped 系における分類が [50] にて行われた。非可逆対称性の場合も含めた包括的な分類になっている。さらに同じ論文で SymTFT の知見を用いて空間 2 次元の分類にも拡張されている。並進変換との交換が非自明な対称性については 2 次元以下の非一様な対称性のもとでのトポロジカル相の分類は完了したと言えるだろう。より高次元における分類は簡単な問題設定だが, 管見によれば空間 3 次元以上についてはエニオンの軌跡を自由に変形できる理想的なトポロジカル秩序でさえ分類が完了したとは言えないようである。空間 2 次元以上では回転変換との交換が非自明な対称性も考慮すべきだが, このような対称性についての議論はほとんどされていない。具体的な模型の構築さえ未開拓である。フェルミオン系への応用も興味深い。本稿で紹介した多極子対称性をフェルミオン系へそのまま適用すると, 局所 Hamiltonian において生成・消滅演算子の 2 乗以上の項が容易に現れるので, スピン系で扱ったような非自明な物理が現れにくい。空間非一様な対称性としてどのようなものを考察すべきか議論の余地がある。

研究の発展について第二の方向性として, 非自明な物理の探究が挙げられる。本稿ではトポロジカル相の分類に焦点を当てて議論したが, それぞれの相で生じる物理の完全な理解には程遠い。1 次元ではトポロジカル秩序が存在しないため基底状態の物理は単純だが, 励起に関しては未知の部分が多い。最も簡単な例として紹介した双極子対称性を有する場合でも, 孤立粒子の運動の禁止に伴い Hilbert 空間分割が生じて熱化の破れが発生することが知られている [54]。高次元系では基底状態の縮退が発生し LRE 相が生じるが, 空間非一様な対称性により X cube 模型 (Sec. 4.2) のようなシステムサイズに依存する縮退が顕著に現れる。くりこみ群の観点から見ると, 基底状態の縮退度という IR の性質が格子のサイズという UV の性質に依存しているので, UV/IR mixing と呼ばれる。熱力学極限の取り方によって非自明な影響を及ぼすため, 物性物理学における直感や期待を覆す現象が生じる可能性がある。

謝辞

まず本研究を進めるにあたり、多くの方々にご指導を賜りましたことを深く感謝申し上げます。多大なるご指導を賜りました指導教員の佐藤昌利教授に厚く御礼申し上げます。研究の遂行にあたり、共同研究者の戎弘実氏、Weiguang Cao 氏、Bo Han 氏の手厚いご指導がなければ、本研究を完成させることはできませんでした。心より御礼申し上げます。本修士論文の議論の要となっている MPS に関する知見のほとんどは塩崎謙助教から、トポロジカル相の分類に関する知見はその多くを同じ研究室の安藤貴政氏からご教示いただきました。深謝申し上げます。同期の皆様には学生生活を通して多くの支えと刺激をいただきました。感謝申し上げます。特に群の表現論に関する知識は重富友汰氏、原慧人、廣部佑真氏との議論を通して深めることができました。また基礎物理学研究所の高間俊至氏、小名木俊輝氏とは、トポロジカル場の理論ゼミを中心に日々の議論を通して多くの学びを得ることができました。最後に、家族や友人からの理解と援助がなければこの 2 年間の学生生活を乗り越えることはできませんでした。この場を借りて心より感謝申し上げます。

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 \mathbb{C} 上のベクトル空間を考える。本章は主に [16, 55] を元としている。

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. 42: 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。^{a b}

^a 特に適切なユニタリを間に挟んで C を半正定値行列 (Def. 16) にすることができる。具体的には、特異値分解 (Thm. 9) $M = U\Sigma V^\dagger$ の結果を用いて $B = UV^\dagger$, $C = V\Sigma V^\dagger$ とすればよい。この場合後述する議論から C が基底ベクトルの拡大を含み、 B が基底ベクトルの回転のみで構成されているので、複素数の極座標表示 $z = re^{i\theta}$ になぞらえて極分解とも呼ばれる。

^b B の代わりに $CC^\dagger = 1$ とすることもできる。

Prf.

M の列ベクトル $\{a_1, \dots, a_n\}$ は r 次元の線形部分空間 V に属する。 V の正規直交基底 $\{b_1, \dots, b_r\}$ をとると、各 a_j は

$$a_j = \sum_{k=1}^r b_k c_{kj}$$

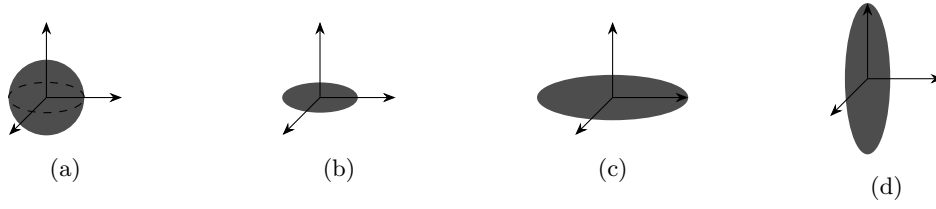


図 A.1: 線形変換 $A: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^m$ の幾何学的解釈. $n = m = 3, r = 2$ の場合を示す. (a) \mathbb{C}^n の単位球 B^n . 標準基底が表面に配置されている. (b) V によって B^n が r 次元球 B^r に潰される. (c) Σ によって r 次元球が r 次元楕円体に伸縮される. (d) U によって r 次元楕円体が \mathbb{C}^m に埋め込まれる.

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, VV^\dagger を対角化した行列 Σ は各成分が基底の長さの拡大・縮小を表す.

特異値分解より直感的な解釈として, \mathbb{C}^n 空間の単位球 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 の表面に配置され, A はこの球を \mathbb{C}^m 空間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 Σ によってこの r 次元球は各基底ベクトルの方向に Σ 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.

Def. 9: ノルム

ベクトル空間 V 上のノルムとは, 写像 $\|\cdot\|: V \rightarrow \mathbb{R}$ であって, 任意の $v, w \in V$ と $\alpha \in \mathbb{C}$ に対し以下を満たすものをいう.

非負性 $\|v\| \geq 0$ であり, 特に $\|v\| = 0$ ならば $v = 0$

斉次性 $\|\alpha v\| = |\alpha| \|v\|$

三角不等式 $\|v + w\| \leq \|v\| + \|w\|$

A.2.1 ベクトルノルム

ベクトル空間のノルムで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.

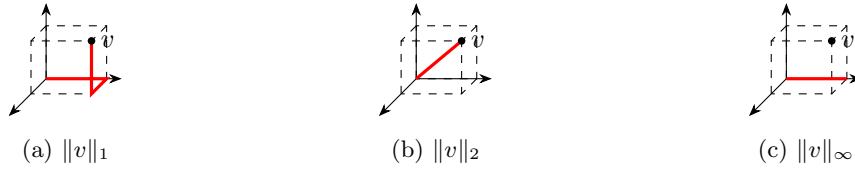


図 A.2: ノルムの幾何学的解釈

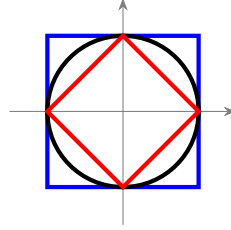


図 A.3: L_1 ノルム (赤), L_2 ノルム (黒), L_∞ ノルム (青) で定義される \mathbb{R}^2 上の半径 1 の円周

Def. 10: 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.

L_p ノルムは明らかにノルムの公理 (Def. 9) を満たす. 特に L_2 ノルムが Euclid 距離, L_1 ノルムが Manhattan 距離を与える. L_2 ノルムは $\|v\|_2 = \sqrt{v^\dagger v}$ と表すことができる. L_∞ 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. 本稿では明示しない限り L_2 ノルムを用い, $\|v\|$ と略記する. L_1, L_∞ 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.

内積と双対

Def. 11: 内積

ベクトル空間 V 上の内積とは, 写像 $(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ であって, 任意の $u, v, w \in V$ と $\alpha \in \mathbb{C}$ に対し以下を満たすものをいう.

双線形性 $(u + v, w) = (u, w) + (v, w)$, $(u, v + w) = (u, v) + (u, w)$

入れ替えが複素共役 $(v, u) = \overline{(u, v)}$

正定性 $(v, v) \geq 0$ であり, 特に $(v, v) = 0$ ならば $v = 0$

斉次性 $(u, \alpha v) = \alpha(u, v)$

内積が定義されたベクトル空間ではノルムを内積により $\|v\| := \sqrt{(v, v)}$ と定義できる. この定義によると, 中線定理

$$\|u - v\|^2 + \|u + v\|^2 = 2(\|u\|^2 + \|v\|^2)$$

が成り立つことが簡単に示せる. 逆にノルムを誘導する内積が存在する条件は上述の中線定理を満たすことであることが [56] にて示されている.

Thm. 43: 中線定理はノルムが内積から誘導されることの必要十分条件

内積 (\cdot, \cdot) が定義されたベクトル空間 V にて, ノルム $\|\cdot\|$ がこの内積から誘導されたものである必要十分条件は, このノルムが中線定理

$$\|u + v\|^2 + \|u - v\|^2 = 2(\|u\|^2 + \|v\|^2) \quad (\text{A.2.2})$$

を満たすことである. また中線定理を満たすノルム $\|\cdot\|$ を誘導する内積は一意に定まる.

Prf.

まず直ちに

$$(u + v, u + v) + (u - v, u - v) = 2(u, u) + 2(v, v)$$

を得るので, 内積から誘導されるノルムは中線定理を満たす. あとは (A.2.2) を満たすノルムが内積により誘導されることを示せば良い.

ノルム $\|\cdot\|$ が (A.2.2) を満たすとする. 演算 $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ を新たに

$$\operatorname{Re} \langle u, v \rangle := \frac{1}{4}(\|u + v\|^2 - \|u - v\|^2), \quad \langle u, v \rangle := \operatorname{Re} \langle u, v \rangle - i \operatorname{Re} \langle u, iv \rangle \quad (\text{A.2.3})$$

としたとき, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ が内積の公理 (双線形性, 入れ替えが複素共役, 正定値性, 斉次性) を満たすことを示せば良い. 中線定理の式 (A.2.2) にて $u \rightarrow u \pm v_1, v \rightarrow v_2$ と置いた式の引き算により

$$\begin{aligned} (\|u + v_1 + v_2\|^2 + \|u + v_1 - v_2\|^2) - (\|u - v_1 - v_2\|^2 + \|u - v_1 + v_2\|^2) \\ = 2(\|u + v_1\|^2 - \|u - v_1\|^2) \end{aligned}$$

となるので,

$$\operatorname{Re} \langle u, v_1 + v_2 \rangle + \operatorname{Re} \langle u, v_1 - v_2 \rangle = 2 \operatorname{Re} \langle u, v_1 \rangle. \quad (\text{A.2.4})$$

(A.2.3) にて $v = 0$ を入れると $\operatorname{Re} \langle u, 0 \rangle = 0$ が得られるので, (A.2.4) にて $v_1 = v_2$ とすることで $\operatorname{Re} \langle u, 2v \rangle = 2 \operatorname{Re} \langle u, v \rangle$ が成り立つ. 再度 (A.2.4) は,

$$\operatorname{Re} \langle u, v_1 + v_2 \rangle + \operatorname{Re} \langle u, v_1 - v_2 \rangle = \operatorname{Re} \langle u, 2v_1 \rangle$$

となり, $v_1 \rightarrow (v_1 + v_2)/2, v_2 \rightarrow (v_1 - v_2)/2$ と置き換えることで

$$\operatorname{Re} \langle u, v_1 \rangle + \operatorname{Re} \langle u, v_2 \rangle = \operatorname{Re} \langle u, v_1 + v_2 \rangle$$

が示される. (A.2.3) から直ちに, 第 2 引数に関する線形性

$$\langle u, v_1 \rangle + \langle u, v_2 \rangle = \langle u, v_1 + v_2 \rangle$$

を得る.

三角不等式により

$$||u \pm \alpha v|| - ||u \pm \beta v|| \leq ||(\alpha - \beta)v||$$

であり, $\beta \rightarrow \alpha$ の極限を取ることで $||u \pm \alpha v||$ は α に関して連続であることがわかる. よって (A.2.3) で定義される $\langle u, \alpha v \rangle$ も α に関して連続. $S := \{\alpha \in \mathbb{C} \mid \langle u, \alpha v \rangle = \alpha \langle u, v \rangle \ \forall u, v \in V\}$ とすると, まず自明に $1 \in S$ である. $\langle \cdot, \cdot \rangle$ の第 2 引数に関する線形性から $\alpha, \beta \in S$ ならば $\alpha \pm \beta \in S$ なので, $\mathbb{Z} \subseteq S$. $\beta \in S$ ならば $\langle u, v \rangle = \langle u, \beta(\beta^{-1}v) \rangle = \beta \langle u, \beta^{-1}v \rangle$ なので, 両辺 β^{-1} をかければ $\beta^{-1} \in S$ も成り立つ. 直ちに $\mathbb{Q} \subseteq S$. 上述の連続性から $\mathbb{R} \subseteq S$. (A.2.3) 第 2 式から

$$\langle u, iv \rangle = \operatorname{Re} \langle u, iv \rangle - i \operatorname{Re} \langle u, iv \rangle = i(\operatorname{Re} \langle u, v \rangle - i \operatorname{Re} \langle u, iv \rangle) = i \langle u, v \rangle$$

なので $i \in S$. 以上より $\mathbb{C} \subseteq S$ が示され, 第 2 引数に関する斉次性が成り立つ.

(A.2.3) 第 1 式により

$$\operatorname{Re} \langle iu, iv \rangle = \operatorname{Re} \langle u, v \rangle = \operatorname{Re} \langle v, u \rangle$$

なので, この結果を組みあせて

$$\operatorname{Re} \langle u, iv \rangle = \operatorname{Re} \langle iu, iiv \rangle = -\operatorname{Re} \langle iu, v \rangle = -\operatorname{Re} \langle v, iu \rangle$$

すなわち $\langle u, v \rangle = \overline{\langle v, u \rangle}$ が成り立つ.

最後に, (A.2.3) で

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \langle v, v \rangle &= \frac{1}{4}(\|v + v\|^2 - \|v - v\|^2) = \|v\|^2 \\ \operatorname{Re} \langle v, iv \rangle &= \frac{1}{4}(\|v + iv\|^2 - \|v - iv\|^2) = 0 \end{aligned}$$

により $\langle v, v \rangle = \|v\|^2$ が成り立つ. 以上で $\langle \cdot, \cdot \rangle$ が内積の公理を全て満たすことが示された. \square

単位ベクトル $(1, 0, 0, \dots), (0, 1, 0, \dots)$ を用いて L_p ノルムによる中線定理を計算すると,

$$0 = \|(1, -1)\|_p^2 + \|(1, 1)\|_p^2 - 2(\|(1, 0)\|_p^2 + \|(0, 1)\|_p^2) = 2^{2/p} + 2^{2/p} - 4$$

なので, L_p ノルムと整合する内積は $p = 2$ のときにのみ存在する. 上記証明での構成から, L_2 ノルムに対応する内積は

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(u, v) &= \frac{1}{4}((u+v)^\dagger(u+v) - (u-v)^\dagger(u-v)) = \frac{1}{2}(u^\dagger v + v^\dagger u) \\ (u, v) &= \operatorname{Re}(u, v) - i \operatorname{Re}(u, iv) = u^\dagger v \end{aligned}$$

で, 通常の内積であることがわかる.

有限次元ベクトル空間 V の内積 $(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ は $V \cong V^*$ を念頭に $V^* \times V \rightarrow \mathbb{C}$ の双対性を表すことができた. 双対性に基づいて V^* 上のノルムを以下のように与えることができる.

Def. 12: 双対ノルム

ノルムを $\|\cdot\|$ とするベクトル空間 V の双対空間 V^* 上のノルム (双対ノルム) を

$$\|f\|_* := \sup_{v \in V; \|v\|=1} |f(v)|$$

と定義する.^a

^a 定義式右辺のノルムは L_2 に限らなくても良い.

V のノルムを L_2 ノルムにとったときこの定義が $V \cong V^*$ のノルムと整合的であることは, $w \in V$ の双対を f_w としたとき

$$\|f_w\|_* = \sup_{v \in V} \left| \frac{f_w(v)}{\|v\|_2} \right| = \sup_{v \in V} \left| \frac{(w, v)}{\|v\|_2} \right| = \left| \frac{(w, w)}{\|w\|_2} \right| = \|w\|_2$$

からわかる. L_2 ノルムの代わりに L_∞ ノルムの双対ノルムを計算してみると,

$$\sup_{v \in V; \|v\|_\infty=1} |f_w(v)| = \sup_{v \in V; \max_i |v_i|=1} \left| \sum_i w_i v_i \right|$$

である. Fig. A.3 のように $\|v\|_\infty = 1$ の単位円は超立方体の表面であり, w との内積を最大にする v は各成分が $w_i = \text{sgn}(v_i)$ とすれば良い. このとき $\|f_w\|_* = \sum_i |w_i| = \|w\|_1$ となるので, L_∞ ノルムの双対ノルムは L_1 ノルムであることがわかる.

A.2.2 行列ノルム

本稿で用いるのは以下の 3 つである.

Def. 13: 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.^a

^a トレースノルムの三角不等式は非自明だが, (A.2.7) により示せる. それ以外でノルムの公理 Def. 9 を満たすことは straightforward に示せる.

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,

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

	誘導ノルム	Frobenius ノルム	トレースノルム
定義	$\sup_{\ v\ =1} \ Av\ $	$\sqrt{A^\dagger A}$	$\text{Tr} \sqrt{A^\dagger A}$
σ 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

が成り立つ。Frobenius ノルムは

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

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 なので、

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

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。3 種のベクトルノルム間の不等式 (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。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。

内積と双対

Thm. 43(ノルムによる内積の誘導と中線定理の等価性) を踏まえ上記 3 つの行列ノルムの中線定理を調べると、

$$\begin{aligned}
& \left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|^2 + \left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|^2 - 2 \left(\left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right\|^2 + \left\| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|^2 \right) \\
&= 1 + 1 - 2(1 + 1) \neq 0 \\
& \|A + B\|_F^2 + \|A - B\|_F^2 - 2(\|A\|_F^2 + \|B\|_F^2) \\
&= \text{Tr}[(A^\dagger + B^\dagger)(A + B)] + \text{Tr}[(A^\dagger - B^\dagger)(A - B)] - 2\text{Tr}(A^\dagger A) + 2\text{Tr}(B^\dagger B) = 0 \\
& \left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|_{\text{tr}}^2 + \left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|_{\text{tr}}^2 - 2 \left(\left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right\|_{\text{tr}}^2 + \left\| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|_{\text{tr}}^2 \right) \\
&= (1 + 1)^2 + (1 + 1)^2 - 2(1^2 + 1^2) \neq 0
\end{aligned}$$

なので、Frobenius ノルムのみが内積から誘導されるノルムである。Thm. 43 の証明の構成法に従い、

$$\begin{aligned}
\text{Re}(A, B) &:= \frac{1}{4}(\|A + B\|_F^2 - \|A - B\|_F^2) = \frac{1}{2} \text{Tr}(A^\dagger B + B^\dagger A) \\
(A, B) &:= \text{Re}(A, B) - i \text{Re}(A, iB) = \text{Tr}(A^\dagger B)
\end{aligned}$$

が内積となる。

Def. 14: 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.

ベクトルの余弦定理同様,

$$\|A - B\|_F^2 = \|A\|_F^2 + \|B\|_F^2 - 2 \text{Re} \langle A, B \rangle_{HS}$$

なので, 特に A と B のノルムを固定すると $\text{Re} \langle A, B \rangle_{HS}$ は A と B の間の “角度の小ささ” に相当する.

ベクトルの内積から双対ノルムを定義したように, 行列の内積から双対ノルムを定義したい. 双対ノルムの定義式では内積の上限を求めるので, 一般に Hilbert-Schmidt 内積の上限を評価する不等式が欲しい. 導出の直感的な方針を概説する. $A = U_A \Sigma_A V_A^\dagger$, $B = U_B \Sigma_B V_B^\dagger$ と特異値分解したとき,

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

なので, ユニタリ行列をまとめて $A = \Sigma_A$, $B = U_A^\dagger U_B \Sigma_B V_B^\dagger V_A = U \Sigma_B V^\dagger$ としても一般性を失わない. これまでと同様, 特異値は降順に $\Sigma_A = \text{diag}(\sigma_1(A), \sigma_2(A), \dots)$, $\Sigma_B = \text{diag}(\sigma_1(B), \sigma_2(B), \dots)$ とする.

$$|\langle A, B \rangle_{HS}| = \left| \sum_i \sigma_i(A) B_{ii} \right| \quad (\text{A.2.5})$$

であり, この値を最大にするには大きい $\sigma_1(A)$ に大きい B の成分を対応させるのが良い. はじめに最大の $\sigma_1(A)$ に対応する B_{11} を最大に取る.

$$|B_{11}| = |\langle e_1, B e_1 \rangle| \leq \|e_1\| \|B e_1\| \leq \|B\| = \sigma_1(B)$$

であり, 等号成立条件は e_1 が $\sigma_1(B)$ に対応する特異ベクトルに平行なことである. 続く $\sigma_2(A)$ に対応する B_{22} も同様に $|B_{22}| \leq \|e_2\| \|B e_2\|$ を通して最大化できるが, $e_2 \in \text{Span}\{e_1\}^\perp$ であることに注意すると, e_2 が $\sigma_2(B)$ に対応する特異ベクトルに平行なときに最大値を達成する. この議論を続けることで, (A.2.5) は

$$|\langle A, B \rangle_{HS}| \leq \sum_i |\sigma_i(A) B_{ii}| \leq \sum_i \sigma_i(A) \sigma_i(B)$$

と評価される. 等号成立は

1. $\sigma_i(A) B_{ii}$ の符号が全ての i で同じ
2. e_i が $\sigma_i(B)$ に対応する特異ベクトルに平行

を共に満たす場合である. 2 番目の条件は U, V が標準基底を不変にするユニタリ行列すなわち単位行列であることを意味し, $U_A^\dagger U_B = V_B^\dagger V_A = I$ である. ここまでの直感的な議論は以下のようにまとめられる.

Thm. 44: von Neumann のトレース不等式 [57]

$m \times n$ 行列 A, B の特異値をそれぞれ降順に $\sigma(A) = (\sigma_1(A), \sigma_2(A), \dots)$, $\sigma(B) = (\sigma_1(B), \sigma_2(B), \dots)$

とする。このとき

$$|\mathrm{Tr}(A^\dagger B)| \leq \sum_i \sigma_i(A) \sigma_i(B)$$

が成り立つ。等号成立条件は A と B が同じ特異ベクトルを持つとき、すなわち特異値分解 $A = U_A \Sigma_A V_A^\dagger$, $B = U_B \Sigma_B V_B^\dagger$ において $U_A = e^{i\theta} U_B$, $V_A = e^{i\phi} V_B$ と表せること [58, 59].

不等式に関する精密・厳密な証明は [60] が有名だが、上記の方針を精密に実現したに過ぎない。

この不等式を念頭に、各ノルムの双対ノルムを計算する。Frobenius ノルムの双対ノルムは

$$\|A\|_{F*} := \sup_{B; \|B\|_F=1} |\mathrm{Tr}(B^\dagger A)| = \frac{1}{\|A\|_F} \sup_{\tilde{A}; \|\tilde{A}\|_F=1} |\mathrm{Tr}(\tilde{A}^\dagger A)|$$

であり、右辺の最大値は $\tilde{A} = A$ のときに

$$|\mathrm{Tr}(A^\dagger A)| = \sum_i \sigma_i(A)^2 = \|A\|_F^2$$

で達成される。よって Frobenius ノルムの双対ノルムは Frobenius ノルム。誘導ノルムの双対ノルムは von Neumann のトレース不等式 (Thm. 44) により

$$\|A\|_* := \sup_{B; \|B\|=1} |\mathrm{Tr}(B^\dagger A)| \leq \sup_{B; \|B\|=1} \sum_i \sigma_i(B) \sigma_i(A)$$

と評価される。 B は最大特異値を 1 として A と特異ベクトルを共有する行列を取れば良いので、 $A = U \Sigma V^\dagger$ に対して右辺を最大にするには $B = UV^\dagger$ とすれば上限かつ等号成立。このとき右辺は $\|A\|_{\mathrm{tr}}$ に一致するので、誘導ノルムの双対ノルムはトレースノルムであることがわかる。逆にトレースノルムの双対は

$$\|A\|_{\mathrm{tr}*} := \sup_{B; \|B\|_{\mathrm{tr}}=1} |\mathrm{Tr}(B^\dagger A)| \leq \sup_{B; \|B\|_{\mathrm{tr}}=1} \sum_i \sigma_i(B) \sigma_i(A) = \sigma_1(A) = \|A\|$$

と計算される。

Cor. 45: 誘導ノルムとトレースノルムは双対

誘導ノルムとトレースノルムは互いに双対ノルム。

A.2.3 演算子ノルム

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. 15: 演算子ノルム

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

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

と定義する。

A.2.4 ノルムに関する公式

本稿で登場するノルムの計算に有用な公式を導出する。まずはじめに、誘導ノルム・演算子ノルムに関する以下の性質を示す。

Cor. 46: 誘導ノルム・演算子ノルム中の積

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。

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

$$\|T(A)\| \leq \|T\|\|A\|$$

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

$$\|T_1 T_2\| \leq \|T_1\|\|T_2\|$$

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 式も同じ解釈が可能。第 3 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 1 式は

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

から得られる。第 2 式も同様。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 3 式を得る。第 4 式も同様に示される。 □

以下の不等式評価は頻繁に登場するが, von Neumann のトレース不等式 Thm. 44 を用いると直ちに導ける。

Prop. 47: 行列積トレースの上限

$A \in \text{Mat}_{m \times n}(\mathbb{C}), B \in \text{Mat}_{n \times m}(\mathbb{C})$ に対し,

$$|\text{Tr } AB| \leq \|A\|_{tr} \|B\|. \quad (\text{A.2.6})$$

等号成立は $A = U\sqrt{A^\dagger A}$ を極分解として $B = U^\dagger$ の時。

Prf.

von Neumann のトレース不等式 Thm. 44 より

$$|\text{Tr } AB| \leq \sum_i \sigma_i(A) \sigma_i(B) \leq \sum_i \sigma_i(A) \sigma_1(B) = \|A\|_{tr} \|B\|.$$

等号成立は A, B^\dagger の特異ベクトルが一致し、かつ B の全ての固有値が最大固有値に等しいときに成り立つ。すなわち $A = U\Sigma V^\dagger$ に対して $B = (U\sigma_1(B)V^\dagger)^\dagger = \|B\|VU^\dagger$ のとき。 \square

これによりトレースノルムの変分表示が可能になる。

Cor. 48: トレースノルムの変分表示

行列 $A \in \text{Mat}_{m \times n}(\mathbb{C})$ に対し、

$$\|A\|_{tr} = \sup_{B \in \text{Mat}_{n \times m}(\mathbb{C}); \|B\|=1} |\text{Tr } AB|.$$

トレースノルムが誘導ノルムの双対ノルムであること (cf. appendix A.2.2) と合わせると、トレースノルムの三角不等式が得られる。

$$\begin{aligned} \|A+B\|_{tr} &= \sup_{\|C\|=1} |\text{Tr}(A+B)C| \\ &\leq \sup_{\|C\|=1} |\text{Tr } AC| + \sup_{\|C\|=1} |\text{Tr } BC| = \|A\|_{tr} + \|B\|_{tr} \end{aligned} \quad (\text{A.2.7})$$

A.3 正写像

Def. 16: 半正定値・正定値行列

正方行列 $A \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ が

半正定値: $(v, Av) \geq 0 \ \forall v \in \mathbb{C}^n$

正定値: $(v, Av) > 0 \ \forall v \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$

特に、 A が半正定値行列であることを $A \geq 0$, 正定値行列であることを $A > 0$ と表す。

定義から直ちに半正定値行列は全ての固有値が非負のエルミート行列であることがわかる。

Def. 17: 正写像

線形変換 $T: \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ が半正定値性を保存する、すなわち

$$A \geq 0 \implies T(A) \geq 0$$

ならば、 T は正写像であるという。特に任意の $A \geq 0$, $A \neq 0$ なる行列に対して $T(A) > 0$ が成り立つとき、 T は真に正であると言って $T > 0$ と表す。また任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して正写像 T と n 次元恒等演算子のテンソル積 $T \otimes I_n$ もまた正写像であるとき、 T は完全正値写像 (completely positive map: CP map) であるという。

半正定値行列は正方行列に対して定義されるので、正写像は正方行列を正方行列に移す変換である。さらに、以下の補題によって正写像はエルミート共役を保存する。

Lem. 49

任意の正方行列は半正定値行列の線型結合として表される。

Prf.

$A \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ はエルミート行列の線型結合 $A = (A + A^\dagger)/2 + i(A - A^\dagger)/2i$ に分解できる。さらにエルミート行列 $H \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ は対角化によって

$$H = U \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) U^\dagger = \sum_{k: \lambda_k \geq 0} \lambda_k (u_k u_k^\dagger) - \sum_{k: \lambda_k < 0} |\lambda_k| (u_k u_k^\dagger)$$

と表される。 □

Cor. 50: 正写像はエルミート保存

正写像 $T : \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ は任意の $A \in \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C})$ について

$$T(A^\dagger) = T(A)^\dagger$$

を満たす。

Prf.

$A \in \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C})$ に対し, A を半正定値行列 A_i の線型結合として $A = \sum_i c_i A_i$ と表す。 $T(A_i) \geq 0$ はエルミート行列なので,

$$T(A^\dagger) = T\left(\sum_i c_i^* A_i\right) = \sum_i c_i^* T(A_i) = \left(\sum_i c_i T(A_i)\right)^\dagger = T(A)^\dagger$$

となる。 □

A.3.1 トレースノルムの縮小性**Def. 18: 双対写像**

正方行列の間の線型写像 $T : \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ の双対写像 $T^* : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C})$ を,

$$\forall X \in \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C}), Y \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}), \quad \text{Tr}[YT(X)] = \text{Tr}[T^*(Y)X]$$

により定義する。^a

^a ベクトル空間 V, W 間の写像 $T : V \rightarrow W$ をとる。 V, W それぞれの双対空間を V^*, W^* としたとき,

$$\begin{array}{ccc} T^* : & W^* & \rightarrow & V^* \\ & \Downarrow & & \Downarrow \\ & f & \mapsto & f \circ T \end{array}$$

を一般に T の双対写像という。上記の定義は $(X, Y) := \text{Tr}[XY]$ によって双対空間を対応させたときの随伴写像に他ならない。通常の Hilbert-Schmidt 内積により双対空間を対応させるのではないため、一般に $T^\dagger \neq T^*$ である。例えば

$T : \text{Mat}_2(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_2(\mathbb{C})$ を

$$T(X) = AX, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

と定めると, $\text{Tr}[T^*(X)Y] = \text{Tr}[XT(Y)] = \text{Tr}[XAY]$ より双対写像は $T^*(X) = XA$ で定まる. 一方 Hilbert-Schmidt 随伴は

$$\text{Tr}[(T^\dagger(X))^\dagger Y]_{HS} = \langle T^\dagger(X), Y \rangle_{HS} \stackrel{\text{def}}{=} \langle X, T(Y) \rangle_{HS} = \text{Tr}[X^\dagger AY] = \text{Tr}[(A^\dagger X)^\dagger Y]$$

より $T^\dagger(X) = A^\dagger X \neq T^*(X)$ となる.

双対写像を導入することで, トレースや Hilbert-Schmidt 内積の中の行列に対する線型写像の作用を“剥がす”ことができる. 例えばトレースノルムの変分表示 (Cor. 48) に適用すると, 以下の不等式を得る.

Lem. 51: トレースノルムの縮小性 1

$T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して, 任意の $X \in \text{Mat}_m(\mathbb{C})$ について

$$\|T(X)\|_{tr} \leq \|T^*\| \|X\|_{tr}$$

が成り立つ.

Prf.

トレースノルムの変分表示 (Cor. 48) を用いて

$$\begin{aligned} \|T(X)\|_{tr} &= \max_{\substack{U \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|U\|=1}} |\text{Tr}[UT(X)]| \\ &= \max_{\substack{U \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|U\|=1}} |\text{Tr}[T^*(U)X]| \\ &= \max_{\substack{U \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|U\|=1}} |\text{Tr}[(T^*(U))^\dagger X]| \\ &\leq \max_{\substack{U \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|U\|=1}} \|T^*(U)\| \|X\|_{tr} = \|T^*\| \|X\|_{tr}. \end{aligned}$$

□

右辺で得られた $\|T^*\|$ をさらに評価したい. というのも, 行列の誘導ノルム $\|A\|$ は $A^\dagger A$ の固有値から最大特異値を簡単に計算できるのに対し, 線型写像のノルム, しかも T の双対のノルムは計算が難しいからである.

行列の誘導ノルムがトレースノルムの双対であることを思い出すと,

$$\begin{aligned}
\|T^*\| &= \sup_{\substack{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|X\|=1}} \|T^*(X)\| \\
&= \sup_{\substack{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|X\|=1}} \sup_{\substack{Y \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \\ \|Y\|_{tr}=1}} |\text{Tr}[YT^*(X)]| \\
&= \sup_{\substack{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|X\|=1}} \sup_{\substack{Y \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \\ \|Y\|_{tr}=1}} |\text{Tr}[T(Y)X]| \\
&\leq \sup_{\substack{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|X\|=1}} \sup_{\substack{Y \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \\ \|Y\|_{tr}=1}} \sum_i \sigma_i(T(Y)) \sigma_i(X) \\
&\leq \sup_{\substack{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|X\|=1}} \sup_{\substack{Y \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \\ \|Y\|_{tr}=1}} \|T(Y)\|_{tr} \|X\| = \sup_{\substack{Y \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \\ \|Y\|_{tr}=1}} \|T(Y)\|_{tr}
\end{aligned}$$

と変形できる. 第 1 の不等号は von Neumann のトレース不等式 (Thm. 44), 第 2 の不等号は $\sigma_i(X) \leq \|X\|$ を用いた.

さて, もし上限を与える Y が半正定値なら最右辺は $T(Y)$ のトレースに一致する. 加えて T がトレース不変な正写像であれば $\|T(Y)\|_{tr} = \text{Tr}[T(Y)] = \text{Tr} Y = \|Y\|_{tr} = 1$ となるので, $\|T^*\| \leq 1$ となる. しかし, Y が半正定値であるとは限らないので, この議論は不十分である. とはいえ, T がトレース不変な (**TP**: trace preserving) 正写像であるという条件を加えることによって不等式評価の方針が見えることは示唆的である. 途中式に $\sup_X \sup_Y |\text{Tr}[T(Y)X]|$ が現れていた. もしここで $X \in \mathbb{C}I$ と特定できればトレース不変性からこの値は 1 と評価できる. すなわち, $\|T^*(X)\|$ の最大を与える X が $\mathbb{C}I$ に属することを示せばよい.

観察として, エルミート行列 X が $\|X\| \leq 1$ を満たすとき,

$$-I \leq X \leq I$$

が成り立つことに注目する. ^{*1} 正写像 T はこの不等式を保存し, $-T(I) \leq T(X) \leq T(I)$ が成り立つ. 最大特異値の比較により,

$$\|T(X)\| \leq \|T(I)\|$$

である. この導出方法は X がエルミートな場合にしか適用できないが, より一般に $X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ で上記のノルム不等式が成り立てば演算子ノルム $\|T\| := \sup_{\|X\|=1} \|T(X)\|$ は $\|T(I)\|$ に等しいと期待される. 実際, X はエルミートに限らなくてもこの評価が正しいことが知られている.

Thm. 52: Russo-Dye の定理

正写像 T に対して $\|T\| = \|T(I)\|$.

証明に先立ち以下の補題を示す.

Lem. 53

$$\|A\| \leq 1 \iff \begin{pmatrix} I & A \\ A^\dagger & I \end{pmatrix} \geq 0$$

^{*1} 行列の不等式 $A \leq B$ は $B - A \geq 0$ で定義する.

Prf. Lem. 53

特異値分解を $A = U\Sigma V^\dagger$ と書くと,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} I & A \\ A^\dagger & I \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & \Sigma \\ \Sigma & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^\dagger & 0 \\ 0 & V^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} \bigoplus_i \begin{pmatrix} 1 & \sigma_i \\ \sigma_i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^\dagger & 0 \\ 0 & V^\dagger \end{pmatrix} \end{aligned}$$

なので固有値は $\{1 \pm \sigma_i\}$ である. よって $\begin{pmatrix} I & A \\ A^\dagger & I \end{pmatrix} \geq 0 \iff \sigma_1 = \|A\| \leq 1$. □

Prf. Thm. 52

■ $T(I) = I \implies \|T\| = 1$ 一般のユニタリ行列 $U \in U(n)$ を射影 P_i により

$$U = \sum_i e^{i\theta_i} P_i$$

と固有値分解する. $\sum_i P_i = 1$ に注意して

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} I & T(U) \\ T(U)^\dagger & I \end{pmatrix} &= \sum_i \begin{pmatrix} T(P_i) & e^{i\theta_i} T(P_i) \\ e^{-i\theta_i} T(P_i) & T(P_i) \end{pmatrix} \\ &= \sum_i \begin{pmatrix} 1 & e^{i\theta_i} \\ e^{-i\theta_i} & 1 \end{pmatrix} \otimes T(P_i). \end{aligned}$$

右辺について任意の $a, b \in \mathbb{C}$ に対し

$$\det \begin{pmatrix} 1 & e^{i\theta_i} \\ e^{-i\theta_i} & 1 \end{pmatrix} = 0, \quad \text{Tr} \begin{pmatrix} 1 & e^{i\theta_i} \\ e^{-i\theta_i} & 1 \end{pmatrix} = 2$$

なので, 固有値は $0, 2$ であり, 半正定値行列である. Lem. 53 より $\|T(U)\| \leq 1$.

一般に $\|A\| = 1$ なる行列 A を固有値分解して $A = U\Sigma V^\dagger$ と書くと, $\sigma_i(A) = \cos \theta_i$ なる θ_i が存在する.

$$A = \frac{1}{2} U \text{diag} \left(\frac{e^{i\theta_i} + e^{-i\theta_i}}{2} \right) V^\dagger = \frac{1}{2} (U \text{diag}(e^{i\theta_i}) V^\dagger + U \text{diag}(e^{-i\theta_i}) V^\dagger)$$

なので,

$$\begin{aligned} \|T(A)\| &= \sup_{\|A\|=1} \|T(A)\| \\ &= \left\| \frac{1}{2} T(U \text{diag}(e^{i\theta_i}) V^\dagger) + \frac{1}{2} T(U \text{diag}(e^{-i\theta_i}) V^\dagger) \right\| \leq 1 \end{aligned}$$

$T(I) = I$ ならば $\|T(I)\| = \|I\| = 1$ なので, $\|T\| = 1$.

■ $T(I) > 0$ の場合 $T'(A) := T(I)^{-1/2} T(A) T(I)^{-1/2}$ と定めると $T'(I) = I$. 従って

$$\begin{aligned} \|T(A)\| &= \|T(I)^{1/2} T'(A) T(I)^{1/2}\| \\ &\leq \|T(I)\|^{1/2} \|T'(A)\| \|T(I)\|^{1/2} \\ &= \|T(I)\| \|T'(A)\| \leq \|T(I)\| \|T'\| \|A\| = \|T(I)\| \|A\| \end{aligned}$$

よって $\|T\| = \sup_{A \neq 0} \|T(A)\|/\|A\| \leq \|T(I)\|$. 上限を導く際 $A = I$ とすれば等号が成り立つので, $\|T\| = \|T(I)\|$. \square

我々はトレースノルムの縮小性 (Lem. 51) に端を発して $\|T^*\|$ の評価を目指していた. Russo-Dye の定理 (Thm. 52) を適用するために, T^* が正写像であることが必要である.

Cor. 54: 正写像の双対も正写像

$T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ が正写像であれば, その双対写像 $T^* : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_m(\mathbb{C})$ も正写像である.

Prf.

$X \geq 0$ とする. 任意の $v \in \mathbb{C}^m$ に対して,

$$\langle v | T^*(X) | v \rangle = \text{Tr}[T^*(X) |v\rangle\langle v|] = \text{Tr}[XT(|v\rangle\langle v|)]$$

である. 右辺 $|v\rangle\langle v|$ は射影なので半正定値, X も半正定値なので, 右辺は常に非負. \square

ここまでの議論によって, トレース不変な正写像によりトレースノルムが縮小されることが導かれる.

Thm. 55: TP 正写像によるトレースノルムの縮小性

正写像 $T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ がトレースを保存するなら $\|T(X)\|_{tr} \leq \|X\|_{tr}$.

Prf.

Cor. 54 により T^* にも Russo-Dye の定理 (Thm. 52) が適用でき, $\|T^*\| = \|T^*(I)\|$ である. 行列の誘導ノルムはトレースノルムの双対ノルム (Cor. 45) であるから,

$$\|T^*\| = \sup_{\|Y\|_{tr} \leq 1} |\text{Tr}[Y^\dagger T^*(I)]| = \sup_{\|Y\|_{tr} \leq 1} |\text{Tr}[IT(Y^\dagger)]|$$

だが, T がトレースを保存するならば右辺は $\sup |\text{Tr}(Y)^*| = 1$ に等しい. Lem. 51 (トレースノルムの縮小性 1) により題意を得る. \square

A.3.2 既約正写像のスペクトル

本稿にて正写像は主に MPS から構成される転送行列の表示に用いられる. 特に 2 点相関関数の漸近的振る舞いを議論する際, 同じ転送行列を何回も作用させる. 古典 Ising 模型の厳密解では転送行列を無限回作用させる極限を取ることで最大固有値の寄与のみが残った. MPS から構成される転送行列でも同様の振る舞いが期待される.

行列同様, 正写像についても固有方程式を考察することで, 線型空間の基底に依存しない性質を抽出できると期待される. 固有方程式は $T(X) = \lambda X$ の形で与えられるため, $\lambda - T$ が可逆でないことを固有値 λ の定義とできる.

Def. 19: スペクトル集合・スペクトル半径

線形変換 $T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対して,

スペクトル集合: $\text{Spec}(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \lambda - T \text{ is not invertible}\}$

スペクトル半径: $\rho_T := \sup_{\lambda \in \text{Spec}(T)} |\lambda|$

と定義する.

特に T が正写像であれば半正定値行列を半正定値行列に変換するので, 固有ベクトルに半正定値行列 X があれば対応するスペクトル λ は非負実数になる: もし対応するスペクトル λ が負または虚数であれば, 任意のベクトル v に対して $(v, T(X)v) = \lambda(v, Xv) \notin \mathbb{R}_{\geq 0}$ となって半正定値性に矛盾する.

TP 写像に限るとスペクトル半径が制限される.

Lem. 56: スペクトルは双対写像のスペクトル

正線形写像 T とその双対写像 T^* のスペクトルは一致する.

Prf.

$\ker(T - \lambda) \neq \{0\}$ のとき $\text{Im}(T - \lambda)^\perp \neq \{0\}$. すなわちある $B \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ が存在して任意の $A \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し

$$0 = \text{Tr}[B(T - \lambda)(A)] = \text{Tr}[(T^* - \lambda)(B)A]$$

なので $\ker(T^* - \lambda) \neq 0$. したがって $\lambda \in \text{Spec}(T)$ ならば $\lambda \in \text{Spec}(T^*)$ が得られる. $T^{**} = T$ なので, T と T^* のスペクトルは一致する. \square

Lem. 57: TP 写像のスペクトル半径は 1

正線形 TP 写像のスペクトル半径は 1.

Prf.

まず任意の $A \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し

$$\text{Tr}[A] = \text{Tr}[T(A)] = \text{Tr}[AT^*(I)]$$

なので $T^*(I) = I$. Russo-Dye の定理 (Thm. 52) により $\|T^*\| = \|T^*(I)\| = 1$. したがって T^* のスペクトル半径は 1 である. Lem. 56 より T のスペクトル半径も 1. \square

続く議論のため, 半正定値行列 A に対する Perron-Frobenius の定理で直感を醸成しておく. 正規直交固有基底 $\{|v_i\rangle\}$ を選び, 固有値の大きい順に (固有値 λ_i が $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$ となるように) 並べる. Fig. A.4 のように, A による変換によって最大固有値に対応する固有ベクトル方向が支配的になる. 極端には, $\lim_{n \rightarrow \infty} A^n / \|A^n\|$ は最大固有値に対応する固有ベクトルが張る部分空間への射影になる. 途中の変換を観察すると, 固有ベクトル以外のベクトルは最大固有値に対応する v_1 方向へ傾く. すなわち, 原点を頂点として v_1 方向に伸びる凸円錐が, A による変換で鋭くなっていく.

最大固有値が縮退している場合凸円錐が 1 次元に潰れなくなるので, このような事例を排除したい. このよ

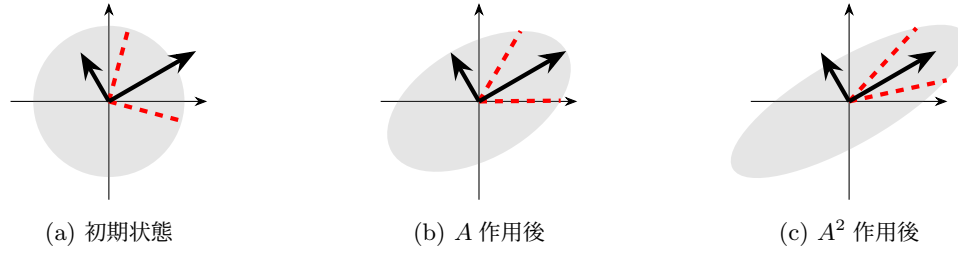


図 A.4: 半正定値行列 A による \mathbb{R}^2 上単位円の変換. 太い黒矢印が固有ベクトルと固有値を表し, 赤破線は最大固有値の固有ベクトル方向を主軸とする凸円錐の表面を表す. 初期状態に A を作用すると最大固有値に対応する主軸へとつぶれていく.

うな状況では 2 次元以上の空間が残るため, 基底の張り替えによって最大固有値の固有ベクトルに $v = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix}$ ($\alpha \in \mathbb{C}$) のようにいずれかの成分が 0 になるような固有ベクトルを選べる. 行列の作用を成分ごとに観察すると,

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}\alpha \\ A_{21}\alpha \end{pmatrix}$$

だが, v が固有ベクトルである仮定から $A_{21}\alpha = 0$ が成り立つ. このような上三角行列は射影 $P_2 = \text{diag}(0, 1)$ により $AP_2\mathbb{C}^2 \subseteq P_2\mathbb{C}^2$ を満たす. 対偶を取れば, 非自明な射影が存在しなければ最大固有値は非縮退となり, 凸円錐は 1 次元に潰れるだろう. この射影の有無は群の表現における可約・既約の概念 (cf. appendix C.1.2) を想起させる.

本稿に直接関係しないため証明は省くが, 上記の議論は以下の定理にまとめられる.

Thm. 58: Perron-Frobenius の定理

半正定値行列 A がある $m \in \mathbb{N}$ で $A^m > 0$ となるとする. このとき A の絶対値最大の固有値は正の実数であり, その対応する固有空間は 1 次元で, すべての成分が正の固有ベクトルを持つ.

同様の議論を正写像 T についても適用する. ベクトル空間における円錐のアナロジーから, 行列空間における凸円錐 \mathcal{K} は

- $X \in \mathcal{K}, \alpha \geq 0$ ならば $\alpha X \in \mathcal{K}$
- $X, Y \in \mathcal{K}$ ならば $X + Y \in \mathcal{K}$
- $X \in \mathcal{K}$ かつ $-X \in \mathcal{K}$ ならば $X = 0$

を満たす集合として定義できる. 半正定値行列全体の集合 \mathcal{K}_{psd} は凸円錐を成しており, $T(\mathcal{K}_{\text{psd}}) \subseteq \mathcal{K}_{\text{psd}}$ となわち円錐の角度は広がらない. 半正定値行列とのアナロジーから, 少々飛躍はあるが,

- 凸円錐の “中心軸” は固有ベクトル
- 凸円錐の “中心軸” に対応する固有値が絶対値最大
- T が既約なら最大固有値は非縮退

であることが期待される. この直感を厳密にするのが Krein-Rutman の定理である.

はじめに, 正写像の可約・既約性を定義する.

Def. 20: 正写像の可約・既約

正線形写像 T に対し非自明な射影 $P \neq 0, I$ であって

$$P\rho P = \rho \implies T(P\rho P) \subseteq PT(\rho)P$$

を満たすものが存在するとき, T は可約であるという. 可約でない T は既約であるという.

この定義を使いやすいよう変形した同値な条件を以下に示す.

Lem. 59: 既約な正写像と等価な条件

線形正写像 $T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し, 以下は同値.

1. T は既約
2. 任意の $0 \neq A \geq 0$ に対し $(I + T)^{n-1}(A) > 0$
3. 任意の $0 \neq A, B \geq 0$ で $\langle A, B \rangle_{\text{HS}} = 0$ となるものに対し, $k \in \{1, \dots, n-1\}$ によって $\text{Tr}[BT^k(A)] > 0$ が成り立つ

Prf.

■item 1 \implies item 2 $A > 0$ なら $(I + T)(A) > 0$ なので, A には 0 固有値があると仮定して良い. 任意の $v \in \mathbb{C}^n$ に対し

$$\langle v, (I + T)(A)v \rangle = \langle v, Av \rangle + \langle v, T(A)v \rangle$$

なので, $\ker(I + T)(A) \subseteq \ker A$. この等号が成り立つと仮定すると, $\text{supp } A := (\ker A)^\perp = \text{supp}(A + T(A))$ なので $\text{supp } T(A) \subseteq \text{supp}(A)$ である. よって P を $\text{supp } A$ への射影とすることで $T(P\text{Mat}_{n \times n}(P)) \subseteq P\text{Mat}_{n \times n}(P)$ が成り立つ. T は既約としているので $P = I$ であり, このとき A に 0 固有値はなく, 仮定に矛盾する. したがって $\ker(I + T)(A) \subsetneq \ker A$ であり, $\ker(I + T)$ の作用によってランクが真に増大する. 高々 $n-1$ 回繰り返せばフルランクになるので, $(I + T)^{n-1}(A) > 0$.

■item 2 \implies item 3 任意の $X \geq 0$ と $Y > 0$ をとると, ともにエルミート行列なので,

$$\langle X, Y \rangle_{\text{HS}} = \text{Tr}[XY] = \text{Tr}[\sqrt{X}^\dagger Y \sqrt{X}] > 0 \quad (\text{A.3.1})$$

となる. よって $X = (I + T)^{n-1}(A)$, $Y = B$ とすれば

$$0 < \langle B, (I + T)^{n-1}(A) \rangle_{\text{HS}} = \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n-1}{k} \langle B, T^k(A) \rangle_{\text{HS}} = \sum_{k=1}^{n-1} \binom{n-1}{k} \langle B, T^k(A) \rangle_{\text{HS}}.$$

右辺各項は非負なので, いずれかの $k \in \{1, \dots, n-1\}$ に対し $\langle B, T^k(A) \rangle_{\text{HS}} > 0$ が成り立つ.

■item 3 \implies item 1 射影 $P \neq 0, I$ が $T(P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P) \subseteq P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P$ を満たすと仮定すると, 任意の $k \in \mathbb{N}$ に対し

$$\text{Tr}[(I - P)T^k(P)] = 0$$

なので $A = I - P, B = P$ とすれば対偶が示される. □

また技術的な補題として以下を与える.

Lem. 60: 既約正写像により正定値は正定値へ移る

既約な正写像 T に対し, 任意の $X > 0$ に対して $T(X) > 0$.

Prf.

はじめに $T(1) > 0$ を背理法でしめす. $T(1)$ が 0 固有値を含むと仮定すると, ある非ゼロ $v \in \mathbb{C}^n$ が存在して $T(1)v = 0$. このような固有空間への射影行列 P は $P \leq 1$ を満たすので $T(P) \leq T(1) \in P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P$ が成り立つ. よってある $\lambda > 0$ に対し $T(1) \leq \lambda P$ だが, T は既約なので $P = I$ となり, 矛盾. よって $T(1) > 0$.

任意の $X > 0$ に対し, ある $a > 0$ が存在して $X \geq aI$ とできるので, $T(X) \geq aT(1) > 0$. \square

以上の準備により, Perron-Frobenius の定理 (Thm. 58) の正写像における対応物である, 有限次元における Krein-Rutman の定理を示す.

Thm. 61: 有限次元における Krein-Rutman の定理

T を既約な正写像とする. 半正定値行列全体の集合 \mathcal{K}_{psd} において

$$r : \mathcal{K}_{\text{psd}} \rightarrow \mathbb{R}, \quad r(X) := \sup\{\lambda \geq 0 \mid T(X) \geq \lambda X\}$$

とその上限

$$r := \sup_{X \in \mathcal{K}_{\text{psd}}} r(X)$$

を定義したとき,

1. 上限 r を実現する Z は正定値 $Z > 0$
2. $T(Z) = rZ$
3. $\lambda = r$ なる固有空間は縮退しない
4. $r = \rho_T$ (スペクトル半径)
5. T 固有値 λ が正で固有ベクトル Y が半正定値のとき, $\lambda = r$

Prf.

■item 1 $a > 0$ に対して $r(aX) = ar(X)$ なので $\text{Tr}(X) = 1$ としても一般性を失わない. $S = \{X \in \mathcal{K}_{\text{psd}} \mid \text{Tr}(X) = 1\}$ はコンパクトなので, $r|_S$ が連続なら S 上で最大値を取る.

$X > 0$ なら $T(X) > 0$ (Lem. 60) なので,

$$r(X) = \|T(X)^{-1/2}XT(X)^{-1/2}\|^{-1}$$

とでき, 正定値行列空間 $\{X \in \mathcal{K}_{\text{psd}} \mid X > 0\}$ 上で連続. Lem. 59 を念頭に構成される

$$N := (1 + T)^{n-1}S = \{(1 + T)^{n-1}(X) > 0 \mid X \in \mathcal{K}_{\text{psd}}, \text{Tr}(X) = 1\}$$

は正定値行列空間のコンパクト部分集合なので, $r|_N$ は $Z \in N$ で最大値を取る.

$X \in S, Y = (1 + T)^{n-1}(X) \in N$ をとる. $r(X)$ の定義により $T(X) - r(X)X \geq 0$ なので

$$(T - r(X))(Y) = (T - r(X))(1 + T)^{n-1}(X) = (1 + T)^{n-1}(T - r(X))(X) \geq 0. \quad (\text{A.3.2})$$

よって $T(Y) \geq r(X)Y$. 一方で $r(Y)$ の定義と照合すると, $\forall X \in S$ で $r(Y) \geq r(X)$. よって

$$r \geq \max_{Y \in N} r(Y) \geq \sup_{X \in S} r(X) = \sup_{X \in \mathcal{K}_{\text{psd}}} r(X) = r$$

より $r = \max_{Y \in N} r(Y)$ が成り立つ. 最大値を与える N の元を Z とすることで, $Z > 0$ で上限 $r = r(Z)$ が実現されることが示された.

■item 2 $r = r(Z)$ を与える $Z > 0$ について $T(Z) - rZ \neq 0$ を仮定する. $W = (1 + T)^{n-1}(Z)$ とすると Lem. 59 (既約線型写像と等価な条件) により

$$T(W) - rW = (1 + T)^{n-1}(T(Z) - rZ) > 0$$

だが, (A.3.2) 以下の議論を等号なしで繰り返すことで $r(W) > r(Z) = r$ となり, これは r の最大性に矛盾. よって $T(Z) = rZ$.

■item 3 Z に比例しない別の固有ベクトル Z' によって $T(Z') = rZ'$ が成り立つとする. $r \in \mathbb{R}$ なので Z' はエルミート行列として良い. ^a $Z^{-1/2}Z'Z^{-1/2}$ のスペクトル分解を

$$Z^{-1/2}Z'Z^{-1/2} = \sum_{a=1}^n \lambda_a P_a, \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$$

とすれば,

$$\lambda_1 - Z^{-1/2}Z'Z^{-1/2} = \sum_{a=2}^n (\lambda_1 - \lambda_a) P_a \geq 0$$

は P_1 成分を含まないのでフルランクではない. よって $\lambda_1 Z - Z'$ もフルランクではないが, Lem. 59 の帰結である

$$0 < (1 + T)^{n-1}(\lambda_1 Z - Z') = (1 + r)^{n-1}(\lambda_1 Z - Z')$$

に矛盾.

■item 4

$$\tilde{T}(A) := \frac{1}{r} Z^{-1/2} T(Z^{1/2} A Z^{1/2}) Z^{-1/2}$$

は $\tilde{T}(I) = I$ を満たす正写像である. Russo-Dye の定理 (Thm. 52) により $\|\tilde{T}\| = 1$. T の固有方程式を $T(A) = \alpha A$ とすると,

$$\tilde{T}(Z^{-1/2} A Z^{-1/2}) = \frac{\alpha}{r} Z^{-1/2} A Z^{-1/2}$$

なので, $1 = \|\tilde{T}\| \geq |\alpha|/r$. すなわち $r \geq \rho_T$ だが, $A = Z$ のとき $\alpha = r$ なので $r = \rho_T$.

■item 5 Lem. 56 より r は双対写像 T^* の正定値行列 X' を固有ベクトルとするスペクトルでもあるので,

$$r \text{Tr}[X'Y] = \text{Tr}[T^*(X')Y] = \text{Tr}[X'T(Y)] = \lambda \text{Tr}[X'Y].$$

(A.3.1) で見たように $\text{Tr}[X'Y] > 0$ なので $\lambda = r$. □

^a T の実固有値の固有ベクトルを A としたとき, $A + A^\dagger$ も同じ固有値の固有ベクトル.

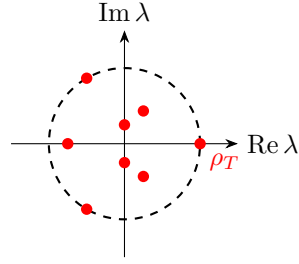


図 A.5: 既約正線型写像のスペクトルの分布

ここまでの結果を踏まえ、正写像のスペクトルの性質をまとめておく。本節冒頭 Cor. 50 で見たように正写像はエルミート性を保存する。したがって $T(X) = \lambda X$ の固有方程式両辺のエルミート共役をとることで

$$T(X^\dagger) = \lambda^* X^\dagger$$

が成り立ち、固有値の複素共役も固有値になる。Krein-Rutman の定理 (Thm. 61) と合わせると、固有値の分布は Fig. A.5 のようになる。右端の赤点で表した $\lambda = \rho_T$ の固有値は縮退せず、固有ベクトルは正定値行列である。

本稿では MPS による転送行列が正写像であることを利用する。MPS は物理的に等価でも virtual な足にゲージを与えた異なる表現を持つが、ゲージ変換でスペクトルの性質は変わってほしくない。これを念頭に、相似変換が既約性を保存することを示す。

Prop. 62: 相似変換は既約性を保存

$T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ を既約な正線形写像とする。任意の $c > 0$, 可逆行列 $C \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し,

$$T'(O) := cC^{-1}T(COC^\dagger)(C^\dagger)^{-1} = c$$

も既約な正線形写像である。

Prf.

T' が射影 $Q \neq 0$ によって $T'(Q\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})Q) \subseteq Q\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})Q$ を満たすとする。すなわち

$$\begin{aligned} Q\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})Q &\supseteq cC^{-1}T(CQ\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})QC^\dagger)(C^\dagger)^{-1} \\ &= cC^{-1}T(CQC^\dagger\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})CQC^\dagger)(C^\dagger)^{-1} \\ &= cC^{-1}T(P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P)(C^\dagger)^{-1}. \end{aligned}$$

ここに、 P は $\text{supp } CQC^\dagger$ への射影である。可逆行列はランクを変えないので

$$\text{rank}_{X \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})} T(PXP) \leq \text{rank } Q$$

だが、 T は既約かつ $Q \neq 0$ なので $P = Q = I$ に限られる。よって T' も既約。 □

Krein-Rutman の定理は次の意味で逆を持つ。

Thm. 63: スペクトルと既約性の同値条件

$T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ をスペクトル半径 ρ_T の正線型写像とする。以下は同値。

1. T は既約
2. スペクトル半径は縮退しない固有値で, 対応する左右固有ベクトルは正定値 (i.e. $T(X) = \rho_T X > 0, T^*(Y) = \rho_T Y > 0$)

Prf.

■1. \Rightarrow 2. Krein-Rutman の定理 (Thm. 61) そのもの。

■2. \Rightarrow 1. 相似変換として Prop. 62 でいうところの $c = 1/\rho_T, C = Y^{-1/2}$ をとる。このとき

$$T'(\sqrt{Y}X\sqrt{Y}) = \frac{1}{\rho_T} Y^{1/2} T(Y^{-1/2} \sqrt{Y}X\sqrt{Y} Y^{-1/2}) Y^{1/2} = \sqrt{Y}X\sqrt{Y} > 0$$

を得る。Thm. 61 item 5 よりスペクトル半径が 1 であり, さらに任意の $A \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し

$$\text{Tr}[T'(A)] = \frac{1}{\rho_T} \text{Tr}[YT(Y^{-1/2}AY^{-1/2})] = \frac{1}{\rho_T} \text{Tr}[T^*(Y)Y^{-1/2}AY^{-1/2}] = \text{Tr}[A]$$

により T' は TP 写像。また相似変換が既約性を保存するため (Prop. 62) T' の最大固有値 1 は変わらず縮退しない。ここで T' が可約, すなわち射影 $P \neq 0, I$ が存在して $T'(P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P) \subseteq P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P$ を満たすとする。密度行列全体の集合を $\mathcal{D} := \{\rho \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \mid \rho \geq 0, \text{Tr} \rho = 1\}$ とする。 T' は TP なので $T'|_{P\mathcal{D}P} : P\mathcal{D}P \rightarrow P\mathcal{D}P$ が定義できる。定義域・値域ともにコンパクトなので Brouwer の不動点定理より $\rho_0 \in P\mathcal{D}P$ s.t. $T'(\rho_0) = \rho_0$ が存在するが, $0 < \sqrt{Y}X\sqrt{Y} \neq \rho_0 \in P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P$ なのでスペクトル半径 1 の固有値が縮退して仮定に矛盾する。 \square

peripheral spectrum

Fig. A.5 で表したように $\lambda = \rho_T$ となる固有値は縮退しないが, スペクトル半径上には他の固有値が存在しうる。このような固有値は凸円錐の回転や反転を含んだ変換に対応する。 T を何度作用させても $\lambda = \rho_T$ の固有値と同じ大きさを持つため, T^n の $n \rightarrow \infty$ 極限でも寄与が残る。このようなスペクトル $S = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \lambda \in \text{Spec}(T), |\lambda| = \rho_T\}$ を **peripheral spectrum** という。正写像を適切に規格化することで $\rho_T = 1$ とすれば, S は単位円周上に配置できる。Thm. 61 より 1 は必ず S に入る。もし S の任意の元が有理数 k/m によって $e^{2\pi i k/m}$ の形で表せれば, T^m を考えることでスペクトル半径上の固有値が 1 のみになって扱いやすい。代償として既約性が失われるが, 再度既約分解すれば上述の議論を適用できる。しかし指数が無理数によって表される場合は peripheral spectrum の寄与を除去できない。実際にはこの懸念は解消されることが以下の定理により示される。

Prop. 64: Peripheral spectrum は整数乗根

$T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ を既約で $T(I) = I$ となる正線形写像で, Schwarz の不等式

$$\forall X \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}), \quad T(X^\dagger X) \geq T(X^\dagger)T(X) \quad (\text{A.3.3})$$

を満たすとする. peripheral spectrum はある $m \in \{1, \dots, d^2\}$ により $S = \{\rho_T e^{2\pi i k/m} \mid k \in \mathbb{Z}_m\}$ の形で表される.

証明にあたり, 以下の補題を示す.

Lem. 65: Schwarz の不等式の等号成立条件

T が Schwarz の不等式 (A.3.3) を満たし, さらにある $X \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ にて

$$T(X^\dagger X) = T(X^\dagger)T(X), \quad T(XX^\dagger) = T(X)T(X^\dagger)$$

を満たすとき, 任意の $Y \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し

$$T(X^\dagger Y) = T(X^\dagger)T(Y), \quad T(YX^\dagger) = T(Y)T(X^\dagger)$$

が成り立つ.

Prf. Lem. 65

$t \in \mathbb{R}$ に対して

$$f(t) := T((X + tY)^\dagger(X + tY)) - T(X + tY)^\dagger T(X + tY)$$

とおく. Schwarz の不等式より $f(t) \geq 0$. 展開すると

$$\begin{aligned} f(t) &= T(X^\dagger X) - T(X^\dagger)T(X) \\ &\quad + t(T(X^\dagger Y) - T(X^\dagger)T(Y) + T(Y^\dagger X) - T(Y^\dagger)T(X)) \\ &\quad + t^2(T(Y^\dagger Y) - T(Y^\dagger)T(Y)). \end{aligned}$$

第 1 項は仮定より 0, 第 3 項は Schwarz の不等式より半正定値なので, 任意の $t \in \mathbb{R}$ で $f(t) \geq 0$ を満たすためには第 2 項の係数が 0 でなければならない.^a

$$T(X^\dagger Y) - T(X^\dagger)T(Y) + T(Y^\dagger X) - T(Y^\dagger)T(X) = 0.$$

t を it に置き換えても $f(it) \geq 0$ でなければならず, このとき 1 次の係数が

$$i(T(X^\dagger Y) - T(X^\dagger)T(Y) - T(Y^\dagger X) + T(Y^\dagger)T(X)) = 0$$

となる. 上記の和と差から題意を得る. □

^a より直接的には, 任意のベクトル v を用意して $\langle v, f(t)v \rangle \geq 0$ を満たすことから.

Prf. Prop. 64

$\lambda \in S$ を固有値とする固有ベクトル $U \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ をとる. Schwarz の不等式は $U^\dagger U \leq T(U^\dagger U)$ である. $r(U^\dagger U) = \sup\{\lambda \geq 0 \mid (T - \lambda)(U^\dagger U) \geq 0\} = 1$ なので, Schwarz の不等式で等号が成立して, U をユニタリにできる. 他の S の固有値に対応する固有ベクトル V も同様に Schwarz の不等式で等

号が成立する. Lem. 65 (等号成立条件) より任意の $X \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し

$$T(U^\dagger X) = T(U^\dagger)T(X), \quad T(XU^\dagger) = T(X)T(U^\dagger).$$

特に X を S に属する固有値の固有ベクトルとすると, X はユニタリで群を成す. S の元は高々 n^2 個なのでこの群は位数 n^2 以下の有限群であり, ある $m \in \{1, \dots, n^2\}$ によって T の peripheral spectrum の元は $\lambda = e^{2\pi i k/m}$ と表される. \square

primitive map

peripheral spectrum の面倒を避けるため, peripheral spectrum がスペクトル半径 ρ_T しかない正写像として primitive map を定義する.

Def. 21: Primitive map

既約な正線形写像 $T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ が peripheral spectrum としてスペクトル半径 $\{\rho_T\}$ のみを持つとき, T は primitive であるという.

以降, $0 \neq A \geq 0$ を $\rho_A := A/\|A\|_{\text{tr}}$ とすることで $\text{Tr} \rho_A = 1$ とする. これにより密度行列を input とする命題は線形性から

$$T(A) = T(\rho_A) \text{Tr} A$$

を通して半正定値行列全体に拡張できる. 以下, 密度行列の集合を $\mathcal{D} := \{\rho \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \mid \rho \geq 0, \text{Tr}(\rho) = 1\}$ と表す.

Thm. 66: primitive map

既約な正線形 TP 写像 $T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ について以下は同値.

1. T は primitive
2. 任意の密度行列 ρ にて極限 $\lim_{k \rightarrow \infty} T^k(\rho)$ が存在し, ρ によらず同じ正定値行列の密度行列 ρ_∞ に収束する
3. ある $n \in \mathbb{N}$ が存在して, 任意の密度行列 ρ に対し $T^n(\rho) > 0$
4. 任意の $k \in \mathbb{N}$ にて T^k は既約

以下の証明では TP 写像はスペクトル半径が 1 であること (Lem. 57) を活用している.

Prf.

■item 1 \implies item 2 仮定より T の peripheral spectrum は $S = \{1\}$ である. すなわちある密度行列 $\rho_\infty > 0$ が存在して $T(\rho_\infty) = \rho_\infty$ を満たす. 他の固有値 $\lambda \in \text{Spec}(T)$ は $|\lambda| < 1$ なので, 任意の密度行列 ρ に対し

$$\lim_{k \rightarrow \infty} T^k(\rho) = \rho_\infty$$

が成り立つ.

■item 2 \implies item 3 任意の $\rho \in \mathcal{D}$ を正定値とする. $\rho_\infty > 0$ なので最小固有値 $\lambda_{\min} := \lambda_{\min}(\rho_\infty) > 0$ が存在し, 十分大きい N では

$$\|T^N - T_\infty\| < \lambda_{\min}$$

である (左辺は $N \rightarrow \infty$ で 0 に収束する). 任意の $\rho \in \mathcal{D}$ に対して

$$T^N(\rho) = T_\infty(\rho) + (T^N - T_\infty)(\rho) = \rho_\infty + (T^N - T_\infty)(\rho)$$

だが, $\|(T^N - T_\infty)(\rho)\| \leq \|T^N - T_\infty\| < \lambda_{\min}$ なので

$$\lambda_{\min}(T^N(\rho)) \geq \lambda_{\min}(\rho_\infty) - \|(T^N - T_\infty)(\rho)\| > 0$$

すなわち $T^N(\rho) > 0$.

■item 3 \implies item 4 背理法. ある $k \in \mathbb{N}$ にて非自明な射影 $P \neq 0, I$ が存在して $T^k(\text{PMat}_n(\mathbb{C})P) \subseteq \text{PMat}_n(\mathbb{C})P$ を満たすと仮定する.

$$T^{nk}(\text{PMat}_n(\mathbb{C})P) \subseteq T^{(n-1)k}(\text{PMat}_n(\mathbb{C})P) \subseteq \cdots \subseteq \text{PMat}_n(\mathbb{C})P$$

だが, これは $T^n > 0$ の合成 $T^{nk} = (T^n)^k$ が真に正であることに矛盾.

■item 4 \implies item 1 背理法. T の peripheral spectrum に $S \ni e^{2\pi ik/m} \neq 1$ が存在すると仮定する. これに対応する固有ベクトル $U \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ をとる. T^m は固有値 1 の固有ベクトルとして少なくとも二つ I, U が存在し, Thm. 61 の対偶に矛盾する. □

付録 B

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。本章は主に [61] を参考にした。

B.1 エントロピー

エントロピーは、系の不確定性や情報量を定量化する重要な概念である。量子情報理論においては、エントロピーは量子状態の情報量を測る指標として用いられる。

本節では特筆しない限り確率分布は離散的であるとする。^{*1} また情報理論では対数の底を 2 とすることが多いが、常に定数倍の変化で自然対数にできるので本稿では自然対数を用いる。

B.1.1 Shannon エントロピー

情報理論におけるエントロピーは確率事象から平均して得られる情報量 (不確かさ) を表す指標である。確率事象 E から実数への関数 I として、以下を満たすものを考える。

1. $I(E)$ は E の発生確率 $p(E)$ のみに依存し、 $0 \leq p(E) \leq 1$ により $I(p(E))$ と書ける
2. I は確率の連続関数
3. 独立事象が同時に発生する情報量は各事象の情報量の和に等しい: $I(p(E)q(E)) = I(p(E)) + I(q(E))$

Cauchy の関数方程式の議論に従って上記を満たす関数形 I を求める。 $x, y \in \mathbb{R}$ に対して $f(x) := I(e^x)$ とすると、

$$f(x+y) = I(e^{x+y}) = I(e^x e^y) = I(e^x) + I(e^y) = f(x) + f(y)$$

の線型方程式を得る。 I の連続性すなわち f の連続性からある定数 $k \in \mathbb{C}$ を用いて任意の $x \in \mathbb{R}$ で $f(x) = kx$ と書け、 $p = e^x$ と取り直すことで任意の $p > 0$ に対し $I(p) = k \ln p$ が導かれる (自己情報量)。確率分布関数 $\{p(x)\}$ が与えられたとき、得られる情報量の期待値は $k \sum_x p(x) \ln p(x)$ で書ける。

^{*1} 確率分布関数を $p(x)$ と書いても離散確率分布を表すことに注意。

Def. 22: Shannon エントロピー

確率分布 $\{p(x)\}$ に対し, Shannon エントロピー (情報量) H を

$$H(\{p(x)\}) := - \sum_x p(x) \ln p(x)$$

と定義する.

関数の極限と整合するように, $p(x) = 0$ のとき $0 \ln 0 = 0$ とする.

Prop. 67: Shannon エントロピーの最大・最小

1. $H(\{p(x)\}) \geq 0$. 特に $p(x) = \delta_{x,x_0}$ のとき等号成立.
2. n 個の排反事象に関する Shannon エントロピーは, 確率分布が一様分布 $p(x) = 1/n$ のとき最大値 $H = \ln n$ を取る.

Prf.

$0 < p(x) < 1$ では $-\ln p(x) > 0$ なので, このような値を含む分布では $H(\{p(x)\}) > 0$. よって最小性は自明である.

一様分布による最大性を証明するために, 相互情報量

$$H(\{p(x)\} \| q(x)) := \sum_x p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)}$$

の非負性を補題として示す. 任意の $x > 0$ に対して $\ln x \leq x - 1$ (等号成立は $x = 1$ のとき) が成り立つので,

$$H(\{p(x)\} \| q(x)) = - \sum_x p(x) \ln \frac{q(x)}{p(x)} \leq \sum_x p(x) \left(1 - \frac{q(x)}{p(x)} \right) = 1 - \sum_x q(x) = 0.$$

等号成立は任意の x にて $\ln[q(x)/p(x)] = 0$ すなわち $p(x) = q(x)$ のときに限る. これを用いて, $q(x) = 1/n$ と取ると

$$H(\{p(x)\} \| 1/n) = -H(\{p(x)\}) + \sum_x p(x) \ln n = -H(\{p(x)\}) + \ln n \geq 0$$

であり, 等号成立は $p(x) = 1/n$ のときに限る. □

B.1.2 von Neumann エントロピー

Shannon エントロピーは古典確率分布の情報量を表す. 量子系における情報量は密度行列の対角化 $\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|$ を通して Shannon エントロピーに帰着される. $\{p_i\}$ の Shannon エントロピーを引き出すために, 以下の形で von Neumann エントロピーを定義する.

Def. 23: von Neumann エントロピー

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

さて, 2 粒子系の量子純粋状態を Schmidt 分解して

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_i \sqrt{p_i} |i\rangle_A \otimes |i\rangle_B$$

と表す. AB 間にエンタングルメントがない場合には $p_i = \delta_{i,i_0}$ となるが, 分布が広がるほど複数の状態ベクトルの間でエンタングルメントが発生し, $p_i = 1/d$ にて最大エンタングル状態となる. エンタングルの情報をうまく拾うには片方の系について部分トレースすれば

$$\text{Tr}_B |\psi\rangle\langle\psi|_{AB} = \sum_i p_i |i\rangle_A \langle i|_A$$

となるので, von Neumann エントロピーを用いて以下のように定義する.

Def. 24: エンタングルメントエントロピー

量子状態 ρ_{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

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

とする.

B.1.3 Rényi エントロピー

von Neumann エントロピーの一般化として Rényi エントロピーを定義する.

Def. 25: Rényi エントロピー

$\alpha > 0$ を与えたとき, 量子状態 ρ の次数 α の Rényi エントロピーを

$$S_\alpha(\rho) := \frac{1}{1-\alpha} \ln \text{Tr} \rho^\alpha$$

と定義する.

α の効果を解釈しよう. ρ の固有値が $\{\lambda_i\}$ で与えられるとき,

$$S_\alpha(\rho) = \frac{1}{1-\alpha} \ln \left(\sum_i \lambda_i^\alpha \right)$$

だが, $\alpha > 1$ では λ_i が大きな値を持つものだけが寄与し, 特に $\alpha \rightarrow \infty$ 極限にて最大値を取る固有値だけが拾われ $S_\alpha \sim -\ln \lambda_{\max}$ となる (Min-エントロピー). 一方 $\alpha < 1$ では分布が均され, $\alpha \rightarrow 0$ 極限で $S_\alpha(\rho) \sim \ln(\sum_i 1)$ となり, 0 でない全ての固有値が値に関係なく均等に寄与して固有値の総数にしか依存しない. この観察から α が小さいほど分布が均されエントロピーが増大することが予想されるが, 以下の命題によりその直感が保証される.

Prop. 68: Rényi エントロピーの単調性

$\alpha \leq \beta$ ならば, $S_\alpha(\rho) \geq S_\beta(\rho)$.

Prf.

密度行列 ρ の固有値を $\{p_i\}$ とし, $Z_\alpha := \sum_i p_i^\alpha$ を定義する.

$$\begin{aligned} \frac{dS_\alpha}{d\alpha} &= \frac{d}{d\alpha} [(1-\alpha)^{-1} \ln Z_\alpha] = (1-\alpha)^{-2} \ln Z_\alpha + (1-\alpha)^{-1} \frac{dZ_\alpha/d\alpha}{Z_\alpha} \\ &= \frac{1}{(1-\alpha)^2} \left[\ln Z_\alpha + \sum_i \frac{p_i^\alpha}{Z_\alpha} \ln(p_i^{1-\alpha}) \right]. \end{aligned}$$

ここで $q_i := p_i^\alpha / Z_\alpha$ を定義すると $\sum_i q_i = 1$ を満たす確率分布である. さらに相対エントロピー

$$D_{KL}(\{q_i\} \parallel \{p_i\}) := \sum_i q_i \ln \frac{q_i}{p_i}$$

を定義すると,

$$\frac{dS_\alpha}{d\alpha} = \frac{1}{(1-\alpha)^2} \left[\ln Z_\alpha + \sum_i q_i \ln \frac{p_i}{q_i Z_\alpha} \right] = -\frac{1}{(1-\alpha)^2} D_{KL}(\{q_i\} \parallel \{p_i\})$$

である. 特に Jensen の不等式 (対数関数が上に凸であること) を利用すると, 相互情報量は

$$D_{KL}(\{q_i\} \parallel \{p_i\}) = -\left\langle \ln \frac{p_i}{q_i} \right\rangle_q \geq -\ln \left\langle \frac{p_i}{q_i} \right\rangle_q = -\ln \left(\sum_i q_i \frac{p_i}{q_i} \right) = 0$$

を満たすので, $\alpha \neq 1$ にて S_α の導関数は常に負.

□

また $\alpha \rightarrow 1$ 極限は von Neumann エントロピーに一致する. これにより von Neumann エントロピーは $\alpha < 1$ の Rényi エントロピーの下限を与えることになる.

Thm. 69: $\alpha = 1$ Rényi エントロピー

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1} S_\alpha(\rho) = S(\rho)$$

Prf.

l'Hôpital の定理を使う. ρ の固有値を $\{\lambda_i\}$ ($\sum_i \lambda_i = 1$) とすると,

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1} S_\alpha(\rho) = \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{d \ln(\sum_i \lambda_i^\alpha) / d\alpha}{d(1-\alpha) / d\alpha} = \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{1}{-1} \cdot \frac{\sum_i (\lambda_i^\alpha \ln \lambda_i)}{\sum_i \lambda_i^\alpha} = -\sum_i \lambda_i \ln \lambda_i$$

を得る.

□

Shannon エントロピーは確率分布が平坦なときに最大値を取ったので, Rényi エントロピーも同様に平坦な分布で最大値を取ることが期待される. この文脈で確率分布の平坦性を測る半順序関係として majorization

が用いられる. 二つの確率分布 $(p_i)_i, (q_i)_i$ を降順に並べ替えたものを $(p_i^\downarrow)_i, (q_i^\downarrow)_i$ とする. 任意の $k \in \mathbb{N}$ にて

$$\sum_{i=1}^k p_i^\downarrow \geq \sum_{i=1}^k q_i^\downarrow$$

を満たすとき, $(p_i)_i$ は $(q_i)_i$ を majorize すると言って $(p_i)_i \succ (q_i)_i$ と書く. 平坦性との関係は, 例えば $(p_i)_i = (1, 0, 0, \dots)$ は任意の確率分布を majorize し, 逆に $(q_i)_i = (1/n, 1/n, \dots, 1/n)$ は任意の n 次元確率分布に majorize されることから解釈できるだろう. Rényi エントロピーはこの意味で確率分布が平坦なほど大きい.

Thm. 70: Rényi エントロピーの Schur concavity

確率分布 $(p_i)_i, (q_i)_i$ に対し, $(p_i)_i \succ (q_i)_i$ ならば任意の $\alpha > 0$ にて

$$S_\alpha((p_i)_i) \leq S_\alpha((q_i)_i).$$

証明にあたって以下の補題を示す.

Lem. 71: Karamata の不等式

区間 $I \subset \mathbb{R}$ 上で定義された関数 $f: I \rightarrow \mathbb{R}$ が上に凸な関数であるとする. $(x_i \in I)_i, (y_i \in I)_i$ がともに降順に並んでいて $(x_i)_i \succ (y_i)_i$ を満たすとき,

$$\sum_i f(x_i) \geq \sum_i f(y_i).$$

f が下に凸ならば不等式は逆向きになる.

直感的には, 上に凸な関数は分布の平均値付近にて大きな値を取るため, 変数を平均値に近づけるほど関数値の和が大きくなることを意味する.

Prf. Lem. 71

f が下に凸な場合は同様の証明を繰り返すだけなので, 上に凸な場合のみを示す. f の凸性により $f(a) - f(b) \leq f'(b)(a - b)$ が成り立つ. これを用いて

$$\begin{aligned} \Delta &:= \sum_{i \in \mathbb{N}} f(x_i) - \sum_i f(y_i) \leq \sum_{i \in \mathbb{N}} f'(y_i)(x_i - y_i) \\ &= f'(y_1)(x_1 - y_1) + \sum_{i > 1} f'(y_i) \left[\sum_{j=1}^i (x_j - y_j) - \sum_{j=1}^{i-1} (x_j - y_j) \right] \\ &= \sum_{i \in \mathbb{N}} [f'(y_i) - f'(y_{i+1})] \sum_{j=1}^i (x_j - y_j) \end{aligned}$$

である. $(x_i)_i \succ (y_i)_i$ より $\sum_{j=1}^i (x_j - y_j) \geq 0$ であり, また f の凸性と $y_i \geq y_{i+1}$ より $f'(y_i) \leq f'(y_{i+1})$ である. 以上により $\Delta \leq 0$ が従う. \square

Prf. Thm. 70 (Rényi エントロピーの Schur concavity)

$p > 0$ にて p^α の 2 回微分 $\alpha(\alpha-1)p^{\alpha-2}$ は $0 < \alpha < 1$ で負, $\alpha > 1$ で正である. Karamata の不等式により

$$(p_i)_i \succ (q_i)_i \implies \begin{cases} \sum_i p_i^\alpha \leq \sum_i q_i^\alpha & (0 < \alpha < 1), \\ \sum_i p_i^\alpha \geq \sum_i q_i^\alpha & (\alpha > 1). \end{cases} \quad (\text{B.1.1})$$

$0 < \alpha < 1$ の場合, 対数関数は単調増加し $1/(1-\alpha) > 0$ であるため $S_\alpha((p_i)_i) \leq S_\alpha((q_i)_i)$ が成り立つ. $\alpha > 1$ の場合は $1/(1-\alpha) < 0$ であるため同様に不等式が成り立つ. \square

以上の考察により, Rényi エントロピーは確率分布が偏っているとき, すなわち純粋状態にて最小値を取り, 分布が平坦なとき, すなわち一様分布にて最大値を取ることが分かる.

Cor. 72: エントロピーの最大・最小を与える分布

Rényi エントロピーは純粋状態で最小値を取り, 一様分布で最大値を取る. 特に Hilbert 空間の次元が d であるとき, α によらず

$$0 = S_\alpha(|\psi\rangle\langle\psi|) = \frac{1}{1-\alpha} \ln 1^\alpha \leq S_\alpha(\rho) \leq S_\alpha(\mathbf{1}/d) = \frac{1}{1-\alpha} \ln \left(d \cdot \frac{1}{d^\alpha} \right) = \ln d.$$

したがって von Neumann エントロピーも同様に純粋状態で最小値 0, 一様分布で最大値 $\ln d$ を取る.

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、表現の最も良い簡約である既約表現を導入する。さらに Sec. 3.2 での利用を念頭に (有限群の) 既約表現の分類に必要な諸定理を紹介する。続いて appendix C.2 で、線形表現に $U(1)$ 位相自由度を許す射影表現を導入する。

本節は主に [62] 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. 26: 線形表現

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

直ちに

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

を得る。

Def. 27: 表現の基底

線型空間 X に対し群 G が線型写像として右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 $D: G \rightarrow \mathbb{B}(X)$ との間に

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

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

Sec. 3.2 では、基底として秩序変数 $\mathbf{O} = (O_1, \dots, O_d)$ をとり、その対称性操作による変換を表現 D で表した。上の定義は、対称性操作 $g \in G$ に対応する対称性演算子 $D(g)$ の作用によって秩序変数 ψ_μ が $(g\psi)_\mu$ に変

換されることを示している。

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

$$\exists T \in \text{GL}(d), \forall g \in G, D_1(g) = T D_2(g) T^{-1}$$

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。群の表現論では対角和が特に有用で、指標と呼ばれる。

量子系において、対称性変換が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 $\text{U}(d)$ のとき D をユニタリ表現という。

Thm. 73: 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 λ_i は全て正。

そこで D と等価な表現 D' を $D'(g) := V^{-1} D(g) V$ ($V := U \Lambda^{-1/2}$) により与えると、

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

となる。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

表現の合成と既約性

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 すら別々であっても良い場合を考える. 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,

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

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

$$\begin{pmatrix} D_{11}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{11}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ D_{11}^{(G)}(g)D_{d_21}^{(H)}(h) & \cdots & D_{11}^{(G)}(g)D_{d_2d_2}^{(H)}(h) & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{d_21}^{(H)}(h) & \cdots & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{d_2d_2}^{(H)}(h) \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ D_{d_11}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_11}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) & D_{d_1d_1}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_1d_1}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ D_{d_11}^{(G)}(g)D_{d_21}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_11}^{(G)}(g)D_{d_2d_2}^{(H)}(h) & D_{d_1d_1}^{(G)}(g)D_{d_21}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_1d_1}^{(G)}(g)D_{d_2d_2}^{(H)}(h) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^{(1)}\psi_1^{(2)} \\ \vdots \\ \psi_1^{(1)}\psi_{d_2}^{(2)} \\ \vdots \\ \psi_{d_1}^{(1)}\psi_1^{(2)} \\ \vdots \\ \psi_{d_1}^{(1)}\psi_{d_2}^{(2)} \end{pmatrix}$$

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.

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**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.

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

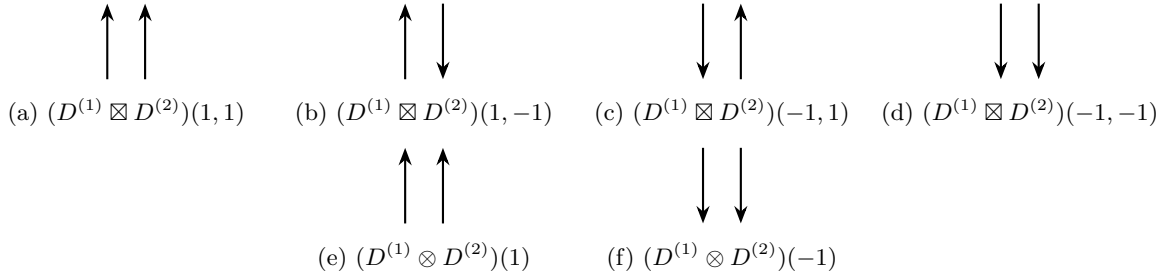


図 C.1: 2 粒子 \mathbb{Z}_2 スピン系における外部テンソル積表現 (a-d) とテンソル積表現 (e-f) それぞれで表せる対称性操作

このような表現を**直和表現**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. 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**, 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**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.

表現の忠実性

一般に表現は群の元を一对一に写さない. もっとも顕著な例が自明表現であり, 群元を全て単位元へ写す. そのため表現は積の構造を保存するものの, 群元の区別は容易に失われる. 逆に表現が単射であるとき, その表現は忠実であるという. 忠実な線形表現の自然な構成方法に正則表現がある.

Def. 28: 正則表現

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.

特に基底として群環 $\mathbb{C}[G]$ を取ることで, 正則表現を行列形式で表すことができる. $\mathbb{C}[G]$ は基底を群元 $|g\rangle$ とする線型空間であり, 積は $|g\rangle \cdot |g'\rangle := |gg'\rangle$ のように群演算に従う. 正則表現による基底への作用は $\rho(g)|g'\rangle = |gg'\rangle$ と表される. 双対基底で挟んで行列要素を見ると

$$\langle g_i | \rho(g) | g_j \rangle = \langle g_i | gg_j \rangle = \delta(g_i^{-1} gg_j)$$

を得る. ここに,

$$\delta(g) := \begin{cases} 1 & (g = 1_G) \\ 0 & (g \neq 1_G) \end{cases} \quad (\text{C.1.1})$$

である. したがって有限群の正則表現は $|G| \times |G|$ 行列として

$$[D^{(\text{reg})}(g)]_{ij} := \delta(g_i^{-1} gg_j) \quad (\text{C.1.2})$$

の表示を持つ.

C.1.3 既約表現の分類に要する命題

線形既約表現の分類にあたって、その共役類と指標を全て列挙できれば方針が立てやすい。本節では既約表現の指標を分類するための道具立てを揃える。

Schur の補題

既約表現を扱うにあたって以下の補題が有用である。

Lem. 74: Schur の補題

- $D^{(1)}, D^{(2)}$ 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. $M = 0$
2. M は正方行列で $\det M \neq 0$ かつ $D^{(1)} \sim D^{(2)}$

のいずれか。

- 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。

Prf.

■appendix C.1.3 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。

■appendix C.1.3 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 appendix C.1.3 により

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

のいずれか。 λ 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

$C_1 = 1$	
$C_2 = r^2$	
$C_3 = r \oplus r^3$	$r^3 = sr s^{-1}$
$C_4 = s \oplus r^2 s$	$r^2 s = sr^2 s^{-1}$
$C_5 = rs \oplus r^3 s$	$r^3 s = sr s^{-1}$

表 C.1: D_8 の共役類

る.

□

共役類

Def. 29: 共役類

群 G に以下の同値関係を与える.

$$g \sim g' \stackrel{\text{def}}{\iff} \exists h \in G, g' = hgh^{-1}.$$

これによる同値類を G の共役類という.

共役類 C_1, \dots, C_{n_c} について,

$$G = C_1 \oplus C_2 \oplus \dots \oplus C_{n_c}, \quad C_i = g_{i1} \oplus g_{i2} \oplus \dots$$

のように表すことにする. 明らかに単位元はそれのみで共役類を成す.

続く補題のモチベーションを与える目的で, 非可換群 D_8 を例にとる. 生成元による表記で

$$D_8 = \langle s, r \mid r^4 = s^2 = 1, sr s = r^{-1} \rangle$$

と定義され, 共役類は Tbl. C.1 に示した 5 つに分解される. それぞれの間で演算を行なってみると, 例えば

$$C_2 C_3 = [r^2][r \oplus r^3] = [r^3 \oplus r] = C_3,$$

$$C_4 C_4 = [s \oplus r^2 s][s \oplus r^2 s] = [s^2 \oplus sr^2 s \oplus r^2 ss \oplus r^2 sr^2 s] = [1 \oplus r^2 s \oplus r^2 s \oplus 1] = 2C_1 \oplus 2C_2$$

などとできる. 左辺は共役類の積で与えているが, 右辺は重複を許した共役類の和で与えていることに注意せよ. 一方で右辺は必ず共役類の構造を保っている. このような代数関係は一般に成り立つ.

Prop. 75: 類定数

共役類 $C_i = g_{i1} \oplus g_{i2} \oplus \dots, C_j = g_{j1} \oplus g_{j2} \oplus \dots$ の間の演算を

$$C_i C_j = g_{i1} g_{j1} \oplus g_{i1} g_{j2} \oplus \dots \oplus g_{i1} g_{jn} \oplus g_{i2} g_{j1} \oplus \dots \oplus g_{i2} g_{jn} \oplus \dots$$

で定める. G が有限群で共役類の個数が n_c のとき, 右辺は一般に $\{c_{ij}^k \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\}_{i,j,k=1,\dots,n_c}$ を用いて

$$C_i C_j = \bigoplus_k c_{ij}^k C_k \tag{C.1.3}$$

の形でかける.

Prf.

$g_{i_k} \in C_i, g_{j_l} \in C_j$ ($1 \leq k \leq |C_i|, 1 \leq l \leq |C_j|$) によって右辺に $g_{kl}^{(ij)} = g_{i_k} g_{j_l}$ が現れる. (C.1.3) 右辺に $g_{kl}^{(ij)}$ を与える (g_{i_m}, g_{j_n}) の組の中で, 積が $C_i C_j$ に属するものの集合 $S(g_{kl}^{(ij)})$ は

$$S(g_{kl}^{(ij)}) = \{(g_{i_m}, g_{j_n}) \in C_i \times C_j \mid g_{i_m} g_{j_n} = g_{kl}^{(ij)}, 1 \leq m \leq |C_i|, 1 \leq n \leq |C_j|\}$$

と書ける. 任意の $g \in G$ を固定して,

$$S(g_{kl}^{(ij)}) = \{(g g_{i_m} g^{-1}, g g_{j_n} g^{-1}) \in C_i \times C_j \mid (g g_{i_m} g^{-1})(g g_{j_n} g^{-1}) = g_{kl}^{(ij)}\}$$

$$\begin{aligned} S(g^{-1} g_{kl}^{(ij)} g) &= \{(g_{i_m}, g_{j_n}) \in C_i \times C_j \mid g_{i_m} g_{j_n} = g^{-1} g_{kl}^{(ij)} g\} \\ &= \{(g_{i_m}, g_{j_n}) \in C_i \times C_j \mid (g g_{i_m} g^{-1})(g g_{j_n} g^{-1}) = g_{kl}^{(ij)}\} \end{aligned}$$

が成り立つので, $|S(g g_{kl}^{(ij)} g^{-1})| = |S(g_{kl}^{(ij)})|$ である. すなわち (C.1.3) 左辺を計算して右辺に現れる $g_{kl}^{(ij)}$ の係数はその共役類で共通するので, (C.1.3) 右辺の形で well-defined に書ける. \square

この類定数を用いることで, 指標と共役類の関係を表すことができる.

Prop. 76: 指標と類定数

群が $G = C_1 \oplus \cdots \oplus C_{n_c}$ と共役類に分解できるとき, 既約表現の指標 χ と類定数 c_{ij}^k は

$$|C_i| \chi(C_i) |C_j| \chi(C_j) = \dim D \sum_{k=1}^{n_c} c_{ij}^k |C_k| \chi(C_k)$$

を満たす.

Prf.

任意の共役類 C_k と $g \in G$ に対し $g C_k g^{-1} = C_k$ なので $g C_k = C_k g$. 既約表現 $g \mapsto D(g)$ は準同型なので

$$\hat{C}_k := \sum_{g \in C_k} D(g)$$

とすると任意の $g \in G$ に対して $D(g) \hat{C}_k = \hat{C}_k D(g)$ となる. Schur の補題 (Lem. 74) により複素数 λ を用いて

$$\hat{C}_k = \lambda 1_{\dim D} \quad (\text{C.1.4})$$

と表せ, 両辺のトレースをとって $|C_k| \chi(C_k) = \lambda \dim D$ となるので, λ の値を (C.1.4) に代入して

$$\hat{C}_k = \frac{|C_k|}{\dim D} \chi(C_k) 1_{\dim D}.$$

また, 類定数の定義 (C.1.3) に対応して表現にも

$$\hat{C}_i \hat{C}_j = \bigoplus_{k=1}^{n_c} c_{ij}^k \hat{C}_k$$

が成り立つので,

$$|C_i| \chi(C_i) |C_j| \chi(C_j) = \dim D \sum_{k=1}^{n_c} c_{ij}^k |C_k| \chi(C_k).$$

□

既約表現と指標の直交性

Thm. 77: 既約表現行列の直交性

既約ユニタリ表現 $D^{(\alpha)}, D^{(\beta)}$ について

$$\sum_{g \in G} D_{ij}^{(\alpha)*}(g) D_{kl}^{(\beta)}(g) = \frac{|G|}{\dim D^{(\alpha)}} \delta_{ik} \delta_{jl} \delta^{\alpha\beta}$$

が成り立つ. ただし $\delta^{\alpha\beta}$ は $D^{(\alpha)}, D^{(\beta)}$ が同一の線形表現であるときに 1, 異値の場合に 0 をとる.^a

^a $D^{(\alpha)} \sim D^{(\beta)}$ だが $D^{(\alpha)} \neq D^{(\beta)}$ の場合にはこの定理は何も言っていないことに注意せよ.

Prf.

$d_\alpha \times d_\beta$ 行列 B により同じ大きさの行列 M を

$$M := \sum_{g \in G} D^{(\alpha)}(g^{-1}) B D^{(\beta)}(g)$$

と与える. $g' \in G$ にて

$$\begin{aligned} D^{(\alpha)}(g') M &= \sum_{g \in G} D^{(\alpha)}(g' g^{-1}) B D^{(\beta)}(g) \\ &= \sum_{g'' (= g g'^{-1}) \in G} D^{(\alpha)}(g''^{-1}) B D^{(\beta)}(g'' g') = M D^{(\beta)}(g'). \end{aligned}$$

Schur の補題 (Lem. 74) によって $M = 0$, または $M = \lambda 1$ ($\lambda \in \mathbb{C}$) かつ $D^{(\alpha)} \sim D^{(\beta)}$ のいずれか. $D^{(\alpha)} \approx D^{(\beta)}$ のときは $M = 0$ のみが許され,

$$\sum_{g \in G} [D^{(\alpha)}(g^{-1})]_{ij} B_{jk} [D^{(\beta)}(g)]_{kl} = 0$$

となる. 今, $d_\alpha \times d_\beta$ 行列 B は任意に選んで良いので, 特に jk 成分だけが 1 で他が 0 となるようなものにとすると,

$$\sum_{g \in G} D^{(\alpha)}(g^{-1})_{ij} D^{(\beta)}(g)_{kl} = 0$$

を得る. ユニタリ表現を仮定しているので $[D^{(\alpha)}(g^{-1})]_{ij} = [D^{(\alpha)}(g)]_{ji}^*$.

$D^{(\alpha)} = D^{(\beta)}$ の場合を考える. $B \in \text{GL}(\dim D^{(\alpha)})$ は任意にとることができるので, jk 成分だけが 1 で他が 0 となるようなものとする,

$$\lambda 1 = \sum_{g \in G} D^{(\alpha)}(g^{-1})_{ij} D^{(\alpha)}(g)_{kl}$$

である. 両辺のトレースをとって

$$\lambda \dim D^{(\alpha)} = \sum_{g \in G} \sum_i \text{tr} [D^{(\alpha)}(g)_{ki} D^{(\alpha)}(g^{-1})_{ij}] = \sum_{g \in G} \delta_{kj} = |G| \delta_{kj}$$

となる. 表現のユニタリ性を使って題意を得る. \square

有限群の既約表現を分類するとき, 既約表現の指標が直交することを基本の指針とする.

Thm. 78: 指標の第 1 種直交性

群 G の既約ユニタリ表現の指標 $\chi^{(\alpha)}, \chi^{(\beta)}$ は

$$\sum_{g \in G} \chi^{(\alpha)*}(g) \chi^{(\beta)}(g) = |G| \delta_{\alpha\beta}$$

を満たす. 特に $G = C_1 + \cdots + C_{n_c}$ と共役類に分解できるとき,

$$\sum_{i=1}^{n_c} |C_i| \chi^{(\alpha)}(C_i)^* \chi^{(\beta)}(C_i) = |G| \delta^{\alpha\beta}.$$

Prf.

定理 77 の結果にて $i = j, k = l$ として和を取れば,

$$\sum_{g \in G} \chi^{(\alpha)}(g)^* \chi^{(\beta)}(g) = \frac{|G|}{\dim D^{(\alpha)}} \delta_{ik} \delta_{jl} \delta^{\alpha\beta} \delta_{ij} \delta_{kl} = |G| \delta^{\alpha\beta}$$

を得る. 同じ共役類に属する元についての指標は

$$\chi(g^{-1}g'g) = \text{Tr}[D(g^{-1})D(g')D(g)] = \text{Tr}[D(g')D(gg^{-1})] = \chi(g')$$

となって一致する. \square

以降の命題が容易に理解できるように指標の内積を定義しておく.

Cor. 79: 有限群の指標の内積

有限群 G の指標 $\chi^{(1)}, \chi^{(2)}$ に対し, (C.1.1) の δ により表される

$$(\chi^{(1)}, \chi^{(2)})_G := \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi^{(1)}(g)^* \chi^{(2)}(g)$$

は内積である. また表現 D が既約表現 $\{D^{(\alpha)}\}_{\alpha=1,\dots,n_r}$ によって

$$D = \bigoplus_{\alpha=1}^{n_r} n_{\alpha} D^{(\alpha)} \quad (n_{\alpha} \in \mathbb{Z}_{\geq 0})$$

と直和分解されるとき, $D, D^{(\alpha)}$ の指標 $\chi, \chi^{(\alpha)}$ によって

$$n_{\alpha} = (\chi^{(\alpha)}, \chi)_G.$$

また, $(\chi, \chi)_G = 1 \iff D$ は既約表現.

Prf.

内積であること (非退化, 半正定値, 双線型性) は自明. 既約表現による直和分解に指標の第 1 種直交性 (Thm. 78) を用いると,

$$(\chi^{(\alpha)}, \chi)_G = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi^{(\alpha)}(g)^* \sum_{\beta=1}^{n_r} n_{\beta} \chi^{(\beta)}(g) = \sum_{\beta=1}^{n_r} n_{\beta} \delta_{\alpha\beta} = n_{\alpha}.$$

□

Cor. 80: 指標と次元の積和

群 G の既約表現 $\{D^{(\alpha)}\}_{\alpha=1,\dots,n_r}$ の指標 $\chi^{(\alpha)}$ は

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} \dim D^{(\alpha)} \chi^{(\alpha)}(g) = |G| \delta(g) \quad (\forall g \in G)$$

を満たす. 特に, すべての同値でない既約表現の次元数の 2 乗和は $|G|$ に等しい.

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} (\dim D^{(\alpha)})^2 = |G| \quad (\text{C.1.5})$$

Prf.

正則表現が

$$D^{(\text{reg})} = \bigoplus_{\alpha=1}^{n_r} q_{\alpha} D^{(\alpha)}$$

と簡約されたとする. 直和表現の指標は各直和成分の指標の和で与えられ,

$$\chi^{(\text{reg})}(g) = \sum_{\alpha=1}^{n_r} q_{\alpha} \chi^{(\alpha)}(g) \quad (\text{C.1.6})$$

と計算される. 一方正則表現の指標は (C.1.2) の具体的表示から

$$\chi^{(\text{reg})}(g) = \sum_{g' \in G} \delta(g'^{-1} g g') = \begin{cases} |G| & (g = 1_G) \\ 0 & (g \neq 1_G) \end{cases} = |G| \delta(g)$$

と計算できるので, 指標の第 1 種直交性 (Thm. 78) を使って

$$q_\alpha = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi^{(\alpha)}(g)^* \chi^{(\text{reg})}(g) = \chi^{(\alpha)}(1_G)^* = \dim D^{(\alpha)}.$$

したがって (C.1.6) は

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} \dim D^{(\alpha)} \chi^{(\alpha)}(g) = |G| \delta(g)$$

と書き換えられる. $g = 1_G$ にて (C.1.5) を得る. \square

Thm. 81: 指標の第 2 種直交性

群 $G = \bigoplus_{i=1}^{n_c} C_i$ に類別できるとき, 既約ユニタリ表現の指標 $\chi^{(\alpha)}, \chi^{(\beta)}$ は

$$\sum_{\alpha} \chi^{(\alpha)}(C_i) \chi^{(\alpha)}(C_j)^* = \frac{|G|}{|C_i|} \delta_{ij}$$

を満たす.

Prf.

Prop. 76 を既約表現で書いて, すべての既約表現で足しあげると,

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^{n_r} |C_i| |C_j| \chi^{(\alpha)}(C_i) \chi^{(\alpha)}(C_j) &= \sum_{\alpha=1}^{n_c} \dim D^{(\alpha)} \sum_{k=1}^{n_c} c_{ij}^k |C_k| \chi^{(\alpha)}(C_k) \\ &= \sum_{k=1}^{n_c} c_{ij}^k |C_k| |G| \delta(C_k) \quad (\because \text{Cor. 80}) \\ &= |G| c_{ij}^1 \quad (\because C_1 = \{1_G\}) \end{aligned} \tag{C.1.7}$$

を得る. $g \in C_j$ に対して $g^{-1} \in C_{j'}$ とすれば, ユニタリ表現では

$$\chi^{(\alpha)}(C_{j'}) = \text{tr } D^{(\alpha)}(g^{-1}) = \text{tr } D^{(\alpha)}(g)^\dagger = \chi^{(\alpha)}(C_j)^*$$

と書き換えられる. また $|C_j| = |C_{j'}|$ であり, 任意の $g \in C_j$ に対して $g^{-1} \in C_{j'}$ なので

$$C_j C_{j'} = |C_j| C_1 \oplus \dots$$

i.e. $c_{ij'}^1 = |C_i| \delta_{ij}$. よって (C.1.7) にて $j \rightarrow j'$ とすれば,

$$|C_i| \sum_{\alpha=1}^{n_r} \chi^{(\alpha)}(C_i) \chi^{(\alpha)}(C_j)^* = |G| \delta_{ij}.$$

\square

Cor. 82: 共役類の数と既約表現の数

有限群が n_c 個の共役類に類別され、また既約表現が同値なものを除いて n_r 個あるとき、 $n_c = n_r$ が成り立つ。

Prf.

指標の第 1 種直交性 (Thm. 78) は $\alpha = 1, \dots, n_r$ でラベルされる n_c 次元ベクトルの内積

$$\sum_{i=1}^{n_c} |C_i| \chi^{(\alpha)}(C_i)^* \chi^{(\beta)}(C_i) = \left[\sqrt{|C_i|} \chi^{(\alpha)}(C_i), \sqrt{|C_i|} \chi^{(\beta)}(C_i) \right]$$

であるから、 $n_r \leq n_c$ を満たす。同様に指標の第 2 種直交性 Thm. 81 は $i = 1, \dots, n_c$ でラベルされる n_r 次元ベクトルの内積

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} \chi^{(\alpha)}(C_i) \chi^{(\alpha)}(C_j)^* = \left[\chi^{(\alpha)}(C_i), \chi^{(\alpha)}(C_j) \right]$$

なので、 $n_c \leq n_r$ が必要。よって $n_c = n_r$ が成り立つ。 □

以上で求めた

(C.1.5) 非同値な既約表現の次元数の 2 乗和は群の位数に等しい。

Cor. 82 共役類と既約表現の数は等しい。

Thm. 78 指標の第 1 種直交性

Thm. 81 指標の第 2 種直交性

Cor. 80 指標と次元の積和

を駆使することで既約表現の指標が求められる。

C.1.4 具体例: D_8

具体的例として D_8 で既約表現の指標を求めてみよう。非同値な既約表現の次元の数の 2 乗和は $\sum_{\alpha} (\dim D^{(\alpha)})^2 = |D_8| = 8$ である。共役類は Tbl. C.1 に示される 5 つあったので、既約表現も 5 つ存在する。したがって既約表現の次元はそれぞれ 1, 1, 1, 1, 2 とわかる。任意の群には必ず自明表現が存在し、その指標は全ての元に対して 1。指標の第 1 種直交性 (Thm. 78) を用いると、他の 1 次元表現の指標は $U(1)$ に値をとらなければならない。1 次元表現の指標は表現と一致するので群演算を保存する必要がある。第 1 種直交性 (Thm. 78) と合わせて考えると、1 次元表現の指標は Tbl. C.2 に示される 4 通りとわかる。残る 2 次元表現は第 2 種直交性 (Thm. 81) を用いて一意に定まる。これにより D_8 既約表現の分類が完了した。

物理的には、自明表現は対称性を全て保つ基底状態を、1 次元表現は対称性を部分的に破る基底状態を、2 次元表現は対称性をフルに破る基底状態を表す。2 次元表現の表式は基底に依存するが、指標によりある程度推察でき、例えば

$$D^{(2)}(r) = \begin{pmatrix} i & \\ & -i \end{pmatrix}, \quad D^{(2)}(s) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.1.8})$$

により生成できる。

		次元	$C_1(=1)$	$C_2(=r^2)$	$C_3(=r, r^3)$	$C_4(=s, r^2s)$	$C_5(=rs, r^3s)$
D_0	自明表現	1	1	1	1	1	1
D_s	$s \mapsto -1$	1	1	1	1	-1	-1
D_r	$r \mapsto -1$	1	1	-1	1	-1	1
D_{sr}	$s, r \mapsto -1$	1	1	-1	-1	1	1
$D^{(2)}$	忠実表現	2	2	-2	0	0	0

表 C.2: D_8 の既約表現の指標

最後に, Sec. 3.4.1 で用いる既約表現の間の代数関係を求めておこう. 線型表現空間において積はテンソル積で, 和は直和で与える. 1 次元表現どうしのテンソル積は自明に 1 次元表現なので既約表現である. 非自明なのは 2 次元表現とのテンソル積である. (C.1.8) の表示を用いると

$$\begin{aligned} (D^{(2)} \otimes D_r)(r) &= \begin{pmatrix} -i & \\ & i \end{pmatrix}, & (D^{(2)} \otimes D_r)(s) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ (D^{(2)} \otimes D_s)(r) &= \begin{pmatrix} i & \\ & -i \end{pmatrix}, & (D^{(2)} \otimes D_s)(s) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

はそれぞれ $U = \sigma^x, \sigma^z$ にユニタリ変換で $D^{(2)}$ に変換できるので, $D^{(2)} \otimes D_r \sim D^{(2)} \otimes D_s \sim D^{(2)} \otimes D_{rs} \sim D^{(2)}$ が成り立つ. 2 次元表現同士のテンソル積は

$$(D^{(2)} \otimes D^{(2)})(r) = \begin{pmatrix} -1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}, \quad (D^{(2)} \otimes D^{(2)})(s) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

により生成される. 内側の 2×2 ブロックが保存されることに注目すると, ユニタリ変換

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

により $\tilde{D} = U^\dagger D^{(2)} \otimes D^{(2)} U$ とすることで

$$\tilde{D}(r) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & \\ 0 & 1 & & \\ & & -1 & 0 \\ & & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{D}(s) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ 1 & 0 & & \\ & & 0 & 1 \\ & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

とブロック対角化でき, さらにそれぞれのブロックは固有値 ± 1 の対角行列に変換できる. したがって $D^{(2)} \otimes D^{(2)} \sim D_0 \oplus D_s \oplus D_r \oplus D_{sr}$ となる. 以上非自明な代数をまとめて,

$$D^{(2)} \otimes D_r \sim D^{(2)} \otimes D_s \sim D^{(2)} \otimes D_{rs} \sim D^{(2)}, \quad D^{(2)} \otimes D^{(2)} \sim D_0 \oplus D_s \oplus D_r \oplus D_{sr}$$

で与えられる代数関係は $\text{Rep}(D_8)$ と呼ばれる.

C.2 射影表現

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 π 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. 30: 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

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

を満たすとき、 D は ω を乗数系とする射影表現という。

Cor. 83: 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。

Prf.

(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 ω 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。群環 $\mathbb{C}[G]$ を表現空間として正規直交基底を $|g\rangle$ ($g \in G$) で表す。正

則表現として線型写像 $D(g) : \mathbb{C}[G] \rightarrow \mathbb{C}[G]$ を

$$D(g) |g'\rangle := \omega(g, g') |gg'\rangle \quad (\forall g, g' \in G)$$

により定めると,

$$\begin{aligned} D(g)D(h) |k\rangle &= \omega(h, k) D(g) |hk\rangle = \omega(h, k) \omega(g, hk) |ghk\rangle \\ &= \omega(g, h) \omega(gh, k) |ghk\rangle = \omega(g, h) D(gh) |k\rangle \end{aligned}$$

となるので, $D(g)D(h) = \omega(g, h)D(gh)$ が成り立ち, D は ω を乗数系とする射影表現となる. \square

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 ω 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 ω 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 ω_1, ω_2 の間に

$$\omega_2(g_1, g_2) = \omega_1(g_1, g_2) e^{i\theta(g_1)} e^{i\theta(g_2)} / e^{i\theta(g_1g_2)} \quad (\text{C.2.3})$$

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

この同一視のため, 1 次元射影表現の乗数系は 1 と等価になる.

Cor. 84: 1 次元射影表現は線形表現

(C.2.3) によって 1 次元射影表現は線形表現と等価.

Prf.

ω を乗数系とする 1 次元射影表現 $D(g)$ では

$$\omega(g_1, g_2) = \frac{D(g_1)D(g_2)}{D(g_1g_2)} \sim 1.$$

\square

C.2.1 射影表現の分類

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 (C.2.3) の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 (C.2.3) 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. 射影表現の分類問題はホモロジー代数の道具を用いて解かれている. いささか天下りのだが, 以下を定義する.

Def. 31: 群コチェイン, 群コサイクル, 群コバウンダリー, 群コホモロジー

G を群, M を G -加群とする. すなわち M は G が作用する線型空間. $n \in \{0, 1, \dots\}$ に対し

$$C^n(G; M) := \text{Hom}(G^n, M) = \{\varphi : G^n \rightarrow M\}$$

とし, その間に $d^{n+1} : C^n(G; M) \rightarrow C^{n+1}(G; M)$ として

$$(d^{n+1}\varphi)(g_1, \dots, g_{n+1}) := g_1\varphi(g_2, \dots, g_{n+1}) + \sum_{i=1}^n (-1)^i \varphi(g_1, \dots, g_i g_{i+1}, \dots, g_{n+1}) \\ + (-1)^{n+1} \varphi(g_1, \dots, g_n)$$

を与える. ^a このとき系列

$$0 \longrightarrow C^0(G; M) \xrightarrow{d} C^1(G; M) \xrightarrow{d} C^2(G; M) \xrightarrow{d} \dots$$

をコチェイン複体という. $C^n(G; M)$ の元を群コチェイン, d のことをコチェイン写像という. コチェイン複体 $C^\bullet(G; M)$ において $d \circ d = 0$ が常に満たされ,

$$Z^n(G; M) := \text{Ker } d^n, \quad B^n(G; M) := \text{Im } d^{n-1}, \quad H^n(G; M) := Z^n(G; M)/B^n(G; M)$$

をそれぞれ群コサイクル, 群コバウンダリー, 群コホモロジーという.

^a 本来 d^n はレベル n ごとに異なるが, n を略して d と書くことが多い.

$d \circ d = 0$ は直接計算で確かめられる.

作用 G の $M = U(1)$ への作用が自明 ($gm = m$) な場合に $n = 2$ の場合で群コホモロジー $H^2(G, U(1))$ を与える. $U(1)$ の演算を積で表すと,

$$Z^2(G; U(1)) = \left\{ \omega : G \times G \rightarrow U(1) \mid d^2 \omega(g_1, g_2, g_3) = \frac{\omega(g_2, g_3) \omega(g_1, g_2 g_3)}{\omega(g_1 g_2, g_3) \omega(g_1, g_2)} = 1, \forall g_1, g_2, g_3 \in G \right\}$$

となるが, これはコサイクル条件 (C.2.2) に他ならない. また任意の $\varphi : G \rightarrow U(1)$ に対し

$$d^1 \varphi(g_1, g_2) = \frac{\varphi(g_1) \varphi(g_2)}{\varphi(g_1 g_2)}$$

なので, 群コホモロジーはコサイクル条件 (C.2.2) を満たす写像 ω のうち, (C.2.3) による同値関係で割ったものと一致する.

Thm. 85: 射影表現の分類

群 G の射影表現の乗数系の分類は群コホモロジー $H^2(G, U(1))$ に一致する.

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

一般に群のコホモロジー $H^2(G, U(1))$ を計算するのは難しい問題だが, G が有限可換群であれば等価な結果が知られている. 以下ではまず G の射影表現を線型表現として実現する群である拡大を導入し, 補題を与え

る. 続いて 2 次の群コホモロジーから bicharacter と呼ばれる準同型を構成し, 有限可換群の射影表現の分類との対応を示す.

群の拡大と 2 次のコホモロジー

Def. 32: 完全列

代数構造の間に

$$\cdots \longrightarrow A_{i-1} \xrightarrow{\phi_{i-1}} A_i \xrightarrow{\phi_i} A_{i+1} \longrightarrow \cdots$$

のような準同型の系列が与えられて, 任意の i に対して $\text{Im}\phi_{i-1} = \text{Ker}\phi_i$ が成り立つとき, この系列を完全列という. 特に

$$1 \longrightarrow A \xrightarrow{\iota} E \xrightarrow{\pi} G \longrightarrow 1$$

が完全列であるとき, これを短完全列といい, さらに E は G の A による拡大と呼ばれる.

上述した群コチェインでは $\ker d^n \supseteq \text{im } d^{n-1}$ の包含関係しか与えられていなかった. コホモロジーが自明なら完全系列になっていたことになる. すなわちコホモロジーとは完全列からのずれを測っていると解釈できる.

Def. 33: 分裂

拡大 $1 \rightarrow A \xrightarrow{\iota} E \xrightarrow{\pi} G \rightarrow 1$ に対し, 準同型 $s: G \rightarrow E$ であって $\pi \circ s = \text{id}_G$ を満たすものを分裂という. またそのような分裂が存在するとき, この拡大は分裂すると言う.

コホモロジーでは代数の間の準同型を考えたが, 以下では群準同型の系列を考察する. 群 A, G, E の間に短完全列 $1 \rightarrow A \rightarrow E \rightarrow G \rightarrow 1$ により群の拡大を定義する. 射影表現の乗数系と $H^2(G, U(1))$ は等価だが, これはまた $U(1)$ による G の拡大の同型類と等価になることが示される. ただし完全列の間の同型とは,

$$\begin{array}{ccccccc} 1 & \longrightarrow & A & \longrightarrow & E & \longrightarrow & G \longrightarrow 1 \\ & & \downarrow \cong & & \downarrow \cong & & \downarrow \cong \\ 1 & \longrightarrow & A' & \longrightarrow & E' & \longrightarrow & G' \longrightarrow 1 \end{array}$$

が可換図式になることをいう.

Thm. 86: 2 次群コホモロジーと群の拡大

A を有限可換群, G を有限群とする. 群の拡大 $(1 \rightarrow A \rightarrow E \rightarrow G \rightarrow 1)$ の同型類 $\mathcal{E}(G, A)$ と $H^2(G, A)$ との間に全単射が存在する. これにより分裂する群の拡大は自明なコホモロジー類に対応する.

補題を用意する.

Lem. 87: 共役作用 $G \curvearrowright A$ は分裂に依存しない

A を有限可換群, G を有限群とする. 完全列 $1 \rightarrow A \rightarrow E \rightarrow G \rightarrow 1$ と集合論的な分裂 $s_1, s_2 : G \rightarrow E$ s.t. $\pi \circ s_i = \text{id}_G$ ($i = 1, 2$) が与えられたとき, 任意の $g \in G$ に対して

$$s_1(g)^{-1} a s_1(g) = s_2(g)^{-1} a s_2(g)$$

すなわち, G の元の A に対する共役作用は分裂にせず

$$\forall g \in G, a \in A; \varphi_{s(g)}(a) = \varphi_g(a)$$

と書ける.

Prf. Lem. 87

分裂 s_1, s_2 の間には

$$s_1(g) = s_2(g) a_g$$

なる $a_g \in A$ が存在する. ^a A が可換群であることから

$$\varphi_{s_1(g)}(a) = s_2(g) a_g a a_g^{-1} s_2(g)^{-1} = \varphi_{s_2(g)}(a)$$

を得る. □

^a もしこのように書けないとすると, ある $g' \neq 1 \in G$ が存在して, $s_1(g) = s_2(g'g)a'$ となるはずだが, 両辺 π を作用させると $g = g'g$ となり矛盾.

Lem. 88: 5 項補題

図式

$$\begin{array}{ccccccccc} A_0 & \xrightarrow{\phi_0} & A_1 & \xrightarrow{\phi_1} & A_2 & \xrightarrow{\phi_2} & A_3 & \xrightarrow{\phi_3} & A_4 \\ \downarrow f_0 & & \downarrow f_1 & & \downarrow f_2 & & \downarrow f_3 & & \downarrow f_4 \\ B_0 & \xrightarrow{\psi_0} & B_1 & \xrightarrow{\psi_1} & B_2 & \xrightarrow{\psi_2} & B_3 & \xrightarrow{\psi_3} & B_4 \end{array}$$

において,

- 可換図式になる
- 横 2 列がそれぞれ完全列になる
- f_1, f_3 が同型である
- f_0 が全射である
- f_4 が単射である

が全て成り立つとき, f_2 も同型である.

Prf. Lem. 88

f_2 が単射であることを示す. $a_2 \in A_2$ に対して $f_2(a_2) = 0$ とすると f_3 の同型性から $f_3^{-1} \circ \psi_1(f_2(a_2)) = 0$. 可換性と f_3 の単射性により $\phi_2(a_2) = 0$ なので, $a_2 \in \ker \phi_2 = \text{im } \phi_1$. 可換性により $f_1(a_1) \in \ker \psi_1$ ため $a_1 = \psi_0(b_0)$ なる $b_0 \in B_0$ が存在する. f_0 の全射性からある $a_0 \in A_0$ が存在して $f_0(a_0) = b_0$ となる. 可換性と f_1 の単射性により $a_1 = \phi_0(a_0)$ なので, $a_2 = \phi_1 \circ \phi_0(a_0) = 0$ を得る. 次に f_2 が全射であることを示す. $b_2 \in B_2$ を任意に取る. $\psi_3 \circ \psi_2(b_2) = 0$ と f_3, f_4 の単射性から, $\phi_3 \circ f_3^{-1} \circ \psi_2(b_2) = 0$. 完全列の定義により $\phi_2(a_2) = f_3^{-1} \circ \psi_2(b_2)$ を満たす $a_2 \in A_2$ が存在する. 可換性により $\psi_2 \circ f_2(a_2) = \psi_2(b_2)$ となるので $\psi_2(f_2(a_2) - b_2) = 0$. 完全列の定義により $b_2 - f_2(a_2) = \psi_1(b_1)$ を満たす $b_1 \in B_1$ が存在する. f_1 の同型性からある $a_1 \in A_1$ が存在して $f_1(a_1) = b_1$ となる. 可換性により $f_2 \circ \phi_1(a_1) = \psi_1 \circ f_1(a_1) = b_2 - f_2(a_2)$. よって $b_2 = f_2(a_2 + \phi_1(a_1))$ を得る. \square

Prf. Thm. 86

■完全列からコサイクルの構成 群の拡大 \mathcal{E} の集合論的な切断 $s : G \rightarrow E$ を固定する. s は一般に準同型でないので, 写像 $f_s : G \times G \rightarrow A$ により

$$s(g_1)s(g_2) = f(g_1, g_2)s(g_1g_2) \in E$$

と書かれる. ただし

$$\pi(s(g_1g_2)) = g_1g_2 = \pi(s(g_1))\pi(s(g_2)) = \pi(s(g_1)s(g_2)) = \pi(f_s(g_1, g_2)s(g_1g_2))$$

なので, $f_s \in \ker \pi = A$. さらに 3 つの元 $g_1, g_2, g_3 \in G$ の間での結合律を考えると,

$$\begin{aligned} s(g_1)s(g_2)s(g_3) &= f_s(g_1, g_2)s(g_1g_2)s(g_3) = f_s(g_1, g_2)f_s(g_1g_2, g_3)s(g_1g_2g_3) \\ &= s(g_1)f_s(g_2, g_3)s(g_2g_3) = \varphi_{s(g_1)}(f_s(g_2, g_3))f_s(g_1, g_2g_3)s(g_1g_2g_3) \end{aligned}$$

を満たさなければならないので,

$$f_s(g_1, g_2)f_s(g_1g_2, g_3) = f_s(g_1, g_2g_3)\varphi_{s(g_1)}(f_s(g_2, g_3))$$

のコサイクル条件が成り立つ. よって $f_s \in Z^2(G, A)$ である.

■完全列からコホモロジーへの写像の構成 1-cochain $c : G \rightarrow A$ によって分裂を $s'(g) := c(g)s(g)$ とすると, Lem. 87 を念頭に

$$\begin{aligned} f_{s'}(g_1, g_2) &= c(g_1)s(g_1)c(g_2)s(g_2)s(g_1g_2)^{-1}c(g_1g_2)^{-1} \\ &= c(g_1)\varphi_{s(g_1)}(c(g_2))s(g_1)s(g_2)s(g_1g_2)^{-1}c(g_1g_2)^{-1} \\ &= c(g_1)\varphi_{g_1}(c(g_2))c(g_1g_2)^{-1}\varphi_{c(g_1g_2)}(f_s(g_1, g_2)) = (\text{dc})(g_1, g_2)f_s(g_1, g_2) \end{aligned}$$

ただし最後の等号で $A \ni f_s(g_1, g_2), c(g_1g_2)$ が可換であることを使った. ゆえにコホモロジー類 $[f] := [f_s] \in H^2(G, A)$ は分裂 s の取り方に依存しない.

$\xi : \mathcal{E}(G, A) \rightarrow H^2(G, A)$ を $[1 \rightarrow A \rightarrow E \rightarrow G \rightarrow 1] \mapsto [f]$ と定義する. まずこれが well-defined で

あることを示す. 同型な群の拡大を可換図式

$$\begin{array}{ccccccccc} 1 & \longrightarrow & A & \xrightarrow{\iota} & E & \xrightarrow{\pi} & G & \longrightarrow & 1 \\ \downarrow & & \downarrow \text{id}_A & & \downarrow \phi & & \downarrow \text{id}_G & & \downarrow \\ 1 & \longrightarrow & A & \xrightarrow{\iota'} & E' & \xrightarrow{\pi'} & G & \longrightarrow & 1 \end{array}$$

で与える. 5 項補題 Lem. 88 より, $\phi : E \rightarrow E'$ は同型. 集合論的な分裂 $s : G \rightarrow E$ をとると, $\pi' \circ \phi \circ s = \pi \circ s = \text{id}_G$ より $\phi \circ s$ は $G \rightarrow E'$ の分裂. 対応するコサイクル $f'_{s'}$ は

$$f'_{s'}(g_1, g_2) = \phi(s(g_1))\phi(s(g_2))\phi(s(g_1g_2))^{-1} = \phi(s(g_1)s(g_2)s(g_1g_2)^{-1}) = \phi(f_s(g_1, g_2)) = f_s(g_1, g_2)$$

となる. ただし最後の等号で ι, ι' が共に自然な単射であることと, 図式が可換であることから得られる $\phi|_A = \text{id}_A$ を使った. 以上, $[f] = [f']$ であり, 完全系列の同型類の代表元に依存しない.

ここまでの帰結をもとに, 以下では分裂を $s(1_G) = 1_E$ とする. このため 2-cocycle は $f_s(1, 1) = 1_E$ と規格化されている.

■ ξ が全射であること 任意の $[\alpha] \in H^2(G, A)$ をとる. ただし代表元は $\alpha(1, 1) = 1_E$ と規格化されているとする.

$$E_\alpha := \{(a, g) \in A \times G \mid (a, g)(b, h) = (a + \varphi_g(b) + \alpha(g, h), gh)\}$$

を定義すると, これは群になる. 実際, 群演算で閉じており, 単位元は $(0_A, 1_G)$ で, 逆元は $(a, g)^{-1} = (\varphi_g^{-1}(-a - \alpha(g, 1)), g^{-1})$ とすれば良い. $\iota : A \rightarrow E_\alpha$ を $\iota(a) = (a, 1_G)$, $\pi : E_\alpha \rightarrow G$ を $\pi(a, g) = g$ とすると, $1 \rightarrow A \rightarrow E_\alpha \rightarrow G \rightarrow 1$ は完全列. さらに分裂 $s : G \rightarrow E_\alpha$ を $s(g) = (0_A, g)$ とすると,

$$\begin{aligned} s(g_1)s(g_2)s(g_1g_2)^{-1} &= (0_A, g_1)(0_A, g_2)(0, g_1g_2)^{-1} \\ &= (\alpha(g_1, g_2), g_1g_2)(\phi_{g_1g_2}^{-1}(-\alpha(g_1g_2, 1_G)), (g_1g_2)^{-1}) = (\alpha(g_1, g_2), 1_G) \end{aligned}$$

となるので $\xi([1 \rightarrow A \rightarrow E_\alpha \rightarrow G \rightarrow 1]) = [\alpha]$ である. 以上, 任意のコサイクルから ξ の逆像の元を構成できたので, ξ は全射である.

■ ξ が単射であること 同型類

$$[E] = [1 \rightarrow A \rightarrow E \rightarrow G \rightarrow 1]$$

$$[E'] = [1 \rightarrow A \rightarrow E' \rightarrow G \rightarrow 1]$$

をとり, $\xi([E]) = \xi([E'])$ とする. 代表元の分裂をそれぞれ $s : G \rightarrow E$, $s' : G \rightarrow E'$, 2-cocycle を $f, f' \in Z^2(G, A)$ とすると, 仮定からある 1-cochain $c \in C^1(G, A)$ が存在して $f' = dc + f$ だが, 注目しているのはコホモロジー類なので $f = f'$ としても一般性を失わない. E の任意の元は $a \in A$ と $g \in G$ により $as(g)$ と書ける. E の積は

$$as(g)bs(h) = a\varphi_g(b)s(g)s(h) = \underbrace{a\varphi_g(b)f(g, h)}_{\in A} s(gh)$$

で, これはまさしく E_f の群演算である. よって $(a, g) \mapsto as(g)$ により $E_f \cong E$ の同型, さらに完全系列の同型

$$\begin{array}{ccccccccc} 1 & \longrightarrow & A & \xrightarrow{\iota} & E_f & \xrightarrow{\pi_f} & G & \longrightarrow & 1 \\ \downarrow & & \downarrow \text{id}_A & & \downarrow & & \downarrow \text{id}_G & & \downarrow \\ 1 & \longrightarrow & A & \xrightarrow{\iota'} & E' & \xrightarrow{\pi'} & G & \longrightarrow & 1 \end{array}$$

が得られる. よって ξ は単射.

■分裂する拡大が自明なコホモロジー類に対応すること 分裂する完全系列では, 切断を $s(g) = (0_A, g)$ とすると準同型なので, $[f] = 1$ に限られる. \square

後の定理に用いるため以下を証明しておく.

Lem. 89: 可除群による可換群の拡大が可換なら分裂

可除群 A による可換群 G の拡大 E が可換群なら分裂する.

Prf.

完全系列の写像を以下のように名付ける.

$$1 \longrightarrow A \xrightarrow{\iota} E \xrightarrow{\pi} G \longrightarrow 1$$

■レトラクション $f: E \rightarrow A$ の構成 E の部分群 S と準同型 $r: S \rightarrow A$ の組として, $A \subset S \subset E$ かつ $r|_A = \text{id}_A$ を満たす (S, r) 全体の集合を \mathcal{R} とする. $(A, \text{id}_A) \in \mathcal{R}$ なので $\mathcal{R} \neq \emptyset$. \mathcal{R} 上に包含関係で順序を入れると Zorn の補題により極大元 (S_{\max}, r_{\max}) が存在する. 背理法により $S_{\max} \neq E$ を証明する. もし $S_{\max} \neq E$ ならば, ある $x \in E \setminus S_{\max}$ が存在する. $n \in \{0\} \cup \mathbb{N}$ により $nx \in S_{\max}$ となるものを取る. もしこのような n が 0 しかなければ, $S = S_{\max} \oplus \mathbb{Z}x$ として, r は x を A の任意の元に写すように拡張できるので, (S_{\max}, r_{\max}) は極大でない. そのため $n \in \mathbb{N}$ によって $nx \in S_{\max}$ となる. $nx \in S_{\max}$ となる最小の整数 n を取る. $r_{\max}(nx) \in A$ であり, A が可除群であることからある $a \in A$ によって $r_{\max}(nx) = na$ と表せる. ここで $r': S_{\max} \oplus \mathbb{Z}x \rightarrow A$ を

$$r'(m + n'x) := r_{\max}(m) + n'a \quad (m \in S_{\max}, n' \in \mathbb{Z})$$

と定める. もし $m + n'x = 0$ ならば $n'x = -m \in S_{\max}$ なので n' は n の倍数であり,

$$r'(m + n'x) = r_{\max}(m) + nka = r_{\max}(m) + kr_{\max}(nx) = r_{\max}(m + knx) = r_{\max}(0) = 0$$

なので well-defined. よって $(S_{\max} \oplus \mathbb{Z}x, r') \in \mathcal{R}$ であり, (S_{\max}, r_{\max}) の極大性の仮定に矛盾する. 以上より $S_{\max} = E$ であり, さらに $r: E \rightarrow A$ で $r|_A = \text{id}_A$ を満たすものが存在する.

■分裂 $s: G \rightarrow E$ の構成 E が HP をななので任意の $e \in E$ に対して

$$e = \iota(r(e)) + (e - \iota(r(e)))$$

の分解が常に存在する. 第 1 項は明らかに $\text{im } \iota = A$ に属し, 第 2 項に r を作用させると 0 になるので, 第 2 項は $\ker r$ に属す. さらに $\iota(A) \cap \ker r = \{0\}$ なので, $E \cong A \oplus \ker r$. $\pi|_{\ker r}: \ker r \rightarrow G$ は全射であり, $\ker \pi = \text{im } \iota$ なので単射でもある. よって $\pi|_{\ker r}$ は同型であり, その逆写像を $(\pi|_{\ker r})^{-1} = s: G \rightarrow E$ とすれば分裂が得られる. \square

Def. 34: bicharacter

群 G に対して, $\beta : G \times G \rightarrow \mathbb{U}(1)$ が

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

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

Lem. 90: 有限可換群の射影表現の乗数系は anti-symmetric bicharacter を誘導する

有限可換群 G の射影表現の乗数系を ω とする. このとき,

$$\text{alt}(\omega)(g_1, g_2) := \frac{\omega(g_1, g_2)}{\omega(g_2, g_1)}$$

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

Prf.

コサイクル条件 (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

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

□

Prop. 91: 有限可換群射影表現の分類は $\text{alt } \omega$ の分類と等価 (cf. [63] Prop. 2.6)

有限可換群 G の射影表現の乗数系 ω の分類は, $\text{alt}(\omega)$ の分類と同型.

Prf.

Lem. 90 より $\omega \in Z^2(G, \mathbb{U}(1))$ なら $\text{alt}(\omega) \in X_a^2(G)$. また $\omega \in B^2(G, \mathbb{U}(1))$ なら $\varphi \in C^1(G, \mathbb{U}(1))$ が存在して $\omega(g_1, g_2) = \varphi(g_1) \varphi(g_2) / \varphi(g_1 g_2)$ と書けるので

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

よって alt は $H^2(G, \mathbb{U}(1))$ から $X_a^2(G)$ への写像を誘導する. 一方で $\omega \in Z^2(G, \mathbb{U}(1))$ が $\text{alt}(\omega) = 1$ を満たすならば, G の ω による中心拡大は可換群になる. 実際, G も $\mathbb{U}(1)$ の可換性と $\text{alt}(\omega) = 1$ を使

うことで中心拡大の積は

$$(g_1, u_1)(g_2, u_2) = (g_1 g_2, u_1 u_2 \omega(g_1, g_2)) = (g_2 g_1, u_2 u_1 \omega(g_2, g_1)) = (g_2, u_2)(g_1, u_1)$$

となり, 可換になる. 可除群による可換群の可換な拡大は常に分裂する (Lem. 89) ので, Thm. 86 よりコサイクル ω は $B^2(G, U(1))$ に属する. 以上より $\text{alt} : H^2(G, U(1)) \rightarrow X_a^2(G)$ は単射. \square

付録 D

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.

D.1 gapped 系に関する命題の証明

D.1.1 Lem. 6 (フィルター付き階段関数の評価) の証明

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \frac{e^{-iEt} e^{-\alpha t^2}}{t + i\epsilon} &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^0 d\omega e^{-(\omega+E)^2/4\alpha} \\ &= \begin{cases} 1 + \mathcal{O}(\exp(-\Delta E^2/4\alpha)) & (E \geq \Delta E) \\ \mathcal{O}(\exp(-\Delta E^2/4\alpha)) & (E \leq -\Delta E) \end{cases} \end{aligned}$$

と評価できることを示す.

$$I(E) := \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \frac{e^{-iEt} e^{-\alpha t^2}}{t + i\epsilon}$$

とする. Fourier 変換により

$$e^{-iEt} e^{-\alpha t^2} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] e^{i\omega t}$$

である. $\Delta\omega = bT^{-1/2}$ ($b > 0$) において, 積分を

$$\begin{aligned} I_-(E) &:= \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-T}^T dt \frac{1}{t + i\epsilon} \int_{-\infty}^{-\Delta\omega} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] e^{i\omega t} \\ I_0(E) &:= \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-T}^T dt \frac{1}{t + i\epsilon} \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] e^{i\omega t} \\ I_+(E) &:= \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-T}^T dt \frac{1}{t + i\epsilon} \int_{\Delta\omega}^{\infty} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] e^{i\omega t} \end{aligned}$$

の 3 つに分割し, $I(E) = I_-(E) + I_0(E) + I_+(E)$ とする. ϵ, T の極限をとる前であれば

$$\int_{-T}^T dt \int_{\Delta\omega}^{\infty} d\omega \left| \frac{1}{t + i\epsilon} \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] e^{i\omega t} \right| = \text{const.} \times \alpha^{1/2} \int_{-T}^T dt \frac{1}{\sqrt{t^2 + \epsilon^2}} < \infty$$

なので Fubini の定理により積分の順序を交換できることを使う。

$I_0(E)$ について評価する。

$$I_0(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] \int_{-T}^T dt \frac{e^{i\omega t}}{t+i\epsilon}$$

において, t 積分は

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{t+i\epsilon} = P \frac{1}{t} - i\pi\delta(t)$$

により

$$\int_{-T}^T dt \frac{e^{i\omega t}}{t+i\epsilon} = P \int_{-T}^T dt \frac{\cos \omega t + i \sin \omega t}{t} - i\pi = 2i \int_0^T dt \frac{\sin \omega t}{t} - i\pi$$

と計算できる。第 1 項は $T = \pi$ にて最大値 (≈ 1.85) をとることが知られている^{*1} ので, t 積分の絶対値は $T, \Delta\omega$ に依存しない定数で押さえられる。よって

$$\begin{aligned} |I_0(E)| &\leq \text{const.} \times \alpha^{-1/2} \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] \\ &\leq \text{const.} \times \alpha^{-1/2} \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega = \text{const.} \times \alpha^{-1/2} \Delta\omega \stackrel{\Delta\omega = bT^{-1/2}}{=} \text{const.} \times \alpha^{-1/2} T^{-1/2} \end{aligned}$$

であり, $T \rightarrow \infty$ で 0.

$I_+(E)$ について評価する。時間積分を先に実行すると,

$$\begin{aligned} \int_{-T}^T dt \frac{e^{i\omega t}}{t+i\epsilon} &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{i\omega t}}{t+i\epsilon} - \int_{|t|>T} dt \frac{e^{i\omega t}}{t+i\epsilon} \\ &= -2\pi i \Theta(-\omega) - \left[\frac{e^{i\omega t}}{i\omega(t+i\epsilon)} \right]_{\pm T}^{\pm\infty} - \int_{|t|>T} dt \frac{e^{i\omega t}}{i\omega(t+i\epsilon)^2} \quad (\text{partial integration}) \\ &= -2\pi i \Theta(-\omega) + \mathcal{O}(\omega^{-1} T^{-1}) \end{aligned}$$

である。ここに Θ は Heviside の階段関数である。さらに ω 積分を評価すると

$$\begin{aligned} |I_+(E)| &\leq \text{const.} \times \left| \int_{\Delta\omega}^{\infty} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] \frac{1}{\omega T} \right| \\ &\leq \text{const.} \times \frac{1}{\Delta\omega T} \left| \int_{\Delta\omega}^{\infty} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] \right| \leq \text{const.} \times \frac{1}{\Delta\omega T} \left| \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] \right| \\ &\leq \text{const.} \times \alpha^{1/2} T^{-1/2} \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

である。

^{*1} 正弦積分

$$\text{Si}(x) := \int_0^x dt \frac{\sin t}{t}$$

が $x = \pi$ で最大となることは, $x > 0 \iff \text{Si}(x) > 0$ となること, $x \in (2\mathbb{Z} + 1)\pi$ で極大値をとること, および

$$\left| \int_{(n-1)\pi}^{n\pi} dt \frac{\sin t}{t} \right| \leq \left| \int_{(n+1)\pi}^{(n+2)\pi} dt \frac{\sin t}{t} \right|$$

となることから従う。

最後に $I_-(E)$ について評価する. 上記の t 積分の評価により

$$\begin{aligned} I_-(E) &= \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^{-\Delta\omega} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] (-2\pi i + \mathcal{O}(\omega^{-1}T^{-1})) \\ &\rightarrow \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^0 d\omega \exp\left[-\frac{(\omega+E)^2}{4\alpha}\right] \quad (\epsilon \rightarrow 0, T \rightarrow \infty) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^E d\omega e^{-\omega^2/4\alpha}. \end{aligned}$$

$E \leq -\Delta E$ のとき,

$$(\text{LHS}) \leq \left| \int_{-\infty}^E d\omega \frac{\omega}{E} e^{-\omega^2/4\alpha} \right| = \mathcal{O}\left(\frac{\exp(-\Delta E^2/4\alpha)}{|\Delta E|}\right)$$

であり, $E \geq \Delta E$ のとき,

$$(\text{LHS}) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} - \int_E^{\infty} \right) d\omega e^{-\omega^2/4\alpha} = 1 + \mathcal{O}\left(\frac{\exp(-\Delta E^2/4\alpha)}{|\Delta E|}\right)$$

である. □

D.1.2 Rényi エンタングルメントエントロピーの面積則 (Thm. 7) の証明

具体的証明に入る前に, オーダー評価の記法を整理しておく. 十分大きい n に対して定義される関数 $f(n), g(n)$ について,

上からの評価 $f(n) = \mathcal{O}(g(n)) \iff \exists n_0, C \text{ s.t. } \forall n \geq n_0, |f(n)| \leq C|g(n)|$

下からの評価 $f(n) = \Omega(g(n)) \iff \exists n_0, C \text{ s.t. } \forall n \geq n_0, |f(n)| \geq C|g(n)|$

同じオーダー $f(n) = \Theta(g(n)) \iff f(n) = \mathcal{O}(g(n)) \text{ かつ } f(n) = \Omega(g(n))$

と定める. さらに $\tilde{O}, \tilde{\Omega}, \tilde{\Theta}$ といったチルダ付きの大文字オーダー評価は, 定数因子および対数因子の多項式を無視する.

エネルギーカットオフ付き Hamiltonian $H^{(t)}$ の構成

まずはエンタングルメントを評価する切断面から十分遠くの影響を無視しつつ, 全体の低エネルギー状態をほとんど保存するような摂動 Hamiltonian $H^{(t)}$ を構成したい.

くりこみによって 1 次元系の gapped Hamiltonian が 2-local になっていると仮定して, Hamiltonian $H' = \sum_{i=-n}^n h'_i$ の局所項 h'_i は $i, i+1$ サイトに作用し $0 \leq h'_i \leq 1$ を満たすとする. $\epsilon_0(\cdot)$ は Hamiltonian を引数にとり基底エネルギーを返す関数とする.

$$H = h_L + h_{-s} + h_{1-s} + \cdots + h_{s-1} + h_s + h_R \quad (\text{D.1.1})$$

を

1. $h_L = h'_L - \epsilon_0(h'_L)$, $h_R = h'_R - \epsilon_0(h'_R)$ ただし $h'_L = \sum_{i < -s} h'_i$, $h'_R = \sum_{i > s} h'_i$
2. $h_i = h'_i$ for $i = \pm s$
3. $h_i = h'_i - \epsilon_0(h'_M)/(2s-1)$ for $1-s \leq i \leq s-1$ ただし $h'_M = \sum_{i=-s+1}^{s-1} h'_i$

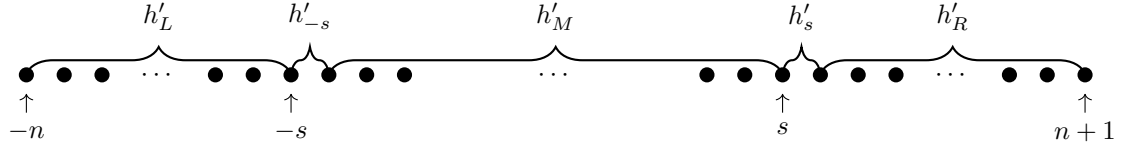


図 D.1: 局所 Hamiltonian $H' = h'_L + h'_{-s} + h'_M + h'_s + h'_R$ の分割

と定義する. すなわち

1. $h_L \geq 0, h_R \geq 0$ かつ $\epsilon_0(h_L) = \epsilon_0(h_R) = 0$
2. $0 \leq h_i \leq 1$ for $i = \pm s$
3. $0 \leq \sum_{i=1-s}^{s-1} h_i \leq 2s-1$ かつ $\epsilon_0(\sum_{i=1-s}^{s-1} h_i) = 0$
4. $H = H' - \epsilon_0(h'_L) - \epsilon_0(h'_M) - \epsilon_0(h'_R)$ で基底状態とギャップは保存される

が成り立つ. Fig. D.1 も参照せよ. H の基底状態が厳密に f -重縮退していると仮定する. $f = \mathcal{O}(1)$ は定数である. エネルギー準位を下から順に $0 \leq \epsilon_0 = \epsilon_1 = \dots = \epsilon_{f-1} < \epsilon_f \leq \epsilon_{f+1} \leq \dots$ とし, ギャップを $\epsilon = \epsilon_f - \epsilon_0$ とする.

h_L の t 以下のエネルギー部分空間への射影 $P_L^{\leq t}$ により高エネルギー準位を全て t に押し下げた

$$h_L^{\leq t} := h_L P_L^{\leq t} + t(1 - P_L^{\leq t})$$

を定義し, 同様にして $h_R^{\leq t}$ を定義する.

$$H^{(t)} := h_L^{\leq t} + h_{-s} + h_{1-s} + \dots + h_{s-1} + h_s + h_R^{\leq t} \leq 2t + 2s + 1 \quad (\text{D.1.2})$$

のエネルギー固有値と固有状態をそれぞれ $\epsilon_i^{(t)}, \phi_i^{(t)}$ とする. 特に言及のない限り状態は規格化する. $H^{(t)}$ のギャップ $\Delta E^{(t)} = \epsilon_f^{(t)} - \epsilon_0^{(t)}$ を与える. $B := h_{-s} + h_s$ を境界項とし, さらに P_t を $H - B$ の t 以下のエネルギー部分空間への射影とする. このとき $h_L P_t = h_L P_L^{\leq t} P_t$ および $h_R P_t = h_R P_R^{\leq t} P_t$ が成り立つので

$$H P_t = H^{(t)} P_t \quad (\text{D.1.3})$$

である.

ここまでのセットアップでいくつか補題を与える. 状態やエネルギーが氾濫するので, Tbl. D.1 に主なものをまとめている.

Lem. 92

床関数 $\lfloor \cdot \rfloor$ を用いて, $0 \leq \epsilon_0^{(t)} \leq \epsilon_0 \leq 2$ かつ $\epsilon_f^{(t)} \leq \epsilon_f \leq \lfloor \log_2 f \rfloor + 4 = \mathcal{O}(1)$.

Prf.

$H^{(t)}$ の固有状態は H の固有状態を $P_L^{\leq t}$ などにより射影したものの部分空間に含まれるので, $H^{(t)} \leq H$ であり, 直ちに $0 \leq \epsilon_0^{(t)} \leq \epsilon_0, \epsilon_f^{(t)} \leq \epsilon_f$ が成り立つ. $H, h_L, \sum_{i=1-s}^{s-1} h_i, h_R$ の基底状態をそれぞれ

表 D.1: Rényi エントロピーの面積則 (Thm. 7) の証明で用いる主な記号一覧

記号	意味	備考
H'	元の Hamiltonian	2-local
H	エネルギーシフトした全系の Hamiltonian	(D.1.1) で定義. 基底エネルギーは 0 で物理的性質は H' と同じ.
$H^{(t)}$	エネルギーカットオフ付き Hamiltonian	(D.1.2) で定義. 両端 h_L, h_R の高エネルギー準位を t に押し下げたもの
B	境界項	$B := h_{-s} + h_s$. 系を L, M, R に分割する際の境界に作用
ϵ_i	H の第 i エネルギー固有値	基底エネルギーは $\epsilon_0 = \dots = \epsilon_{f-1} = 0$
ΔE	H のギャップ	$\Delta E = \epsilon_f - \epsilon_0 = \epsilon_f$
$\epsilon_i^{(t)}$	$H^{(t)}$ の第 i エネルギー固有値	$\epsilon_i^{(t)} \approx \epsilon_i$
$\epsilon_\infty^{(t)}$	$H^{(t)}$ の最大固有値	$\epsilon_\infty^{(t)} = 2s + 2t + 1$
$\Delta E^{(t)}$	$H^{(t)}$ のギャップ	$\Delta E^{(t)} := \epsilon_f^{(t)} - \epsilon_0^{(t)}$
P_t	$H - B$ の t 以下のエネルギー部分空間への射影	(D.1.3) により H と $H^{(t)}$ をつなぐ
G	H の基底状態空間	
$G^{(t)}$	$H^{(t)}$ の基底状態空間	H からの摂動による分裂を加味して f -重縮退
$P^{(t)}$	$H^{(t)}$ の基底状態空間 $G^{(t)}$ への射影	
$\phi^{(t)}$	$H^{(t)}$ のエネルギー固有状態	第 i 固有状態は $\phi_i^{(t)}$
$\Phi^{(t)}$	$H^{(t)}$ の固有状態の低エネルギーへの射影	$\Phi^{(t)} := P_t \phi^{(t)} / \ P_t \phi^{(t)}\ $.
$\varphi_i^{(t)}$	$H^{(t)}$ の基底状態	Lem. 101 で使用. $\varphi_0^{(t)} \perp \varphi_1^{(t)}$.
φ	H の基底状態	
C_l	AGSP 演算子を与える fl 次多項式	Lem. 99 で構成
$A^{(t)}$	$H^{(t)}$ の AGSP 演算子	$A^{(t)} := C_l(H^{(t)})$

$\psi_0, \psi_L, \psi_M, \psi_R$ とする.

$$\begin{aligned}
\epsilon_0 &\leq \langle \psi_L \psi_M \psi_R | H | \psi_L \psi_M \psi_R \rangle \\
&= \langle \psi_L | H_L | \psi_L \rangle + \langle \psi_M | \sum_{i=1-s}^{s-1} h_i | \psi_M \rangle + \langle \psi_R | H_R | \psi_R \rangle + \langle \psi_L \psi_M \psi_R | B | \psi_L \psi_M \psi_R \rangle \leq \|B\| \leq 2
\end{aligned}$$

により最初の不等式の上限が得られる. $f' := \lfloor \log_2 f \rfloor + 1$ として, ϕ_R を $\sum_{i=-s+f'+1}^s h_i$ の基底状態

とする. $-s+1, -s+2, \dots, -s+f'$ 上の任意の状態 ϕ_M について

$$\begin{aligned}
& \langle \psi_L \phi_M \phi_R | H | \psi_L \phi_M \phi_R \rangle \\
&= \langle \psi_L | H_L | \psi_L \rangle + \langle \psi_L \phi_M \phi_R | \sum_{i=-s}^{-s+f'} h_i | \psi_L \phi_M \phi_R \rangle + \langle \phi_R | \sum_{i=-s+f'+1}^s h_i + h_R | \phi_R \rangle \\
&\leq \langle \psi_L | H_L | \psi_L \rangle + \sum_{i=-s}^{-s+f'} \langle \psi_0 | h_i | \psi_0 \rangle + f' + 1 + \langle \psi_0 | \sum_{i=-s+f'+1}^s h_i + h_R | \psi_0 \rangle \\
&\leq \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle + f' + 1 = \epsilon_0 + f' + 1
\end{aligned}$$

であり, 先ほどの上限と合わせて左辺は $\epsilon_0 + f' + 3$ で抑えられる. ただし最初の不等号で $h_i \leq 1$ を用いた. よって $\epsilon_f \leq \epsilon_0 + f' + 3 = \lfloor \log_2 f \rfloor + 4$. \square

Lem. 93

$H^{(t)}$ の代わりに $H^{(r)}$ を与え, 固有値 $\epsilon^{(r)}$ の固有状態を $\phi^{(r)}$ とする. $r, t > \epsilon^{(r)}$ にて

$$\|(1 - P_t)\phi^{(r)}\|^2 \leq \left| \frac{\langle \phi^{(r)} | (1 - P_t) B P_t | \phi^{(r)} \rangle}{\min\{r, t\} - \epsilon^{(r)}} \right|.$$

Prf.

$$\begin{aligned}
\epsilon^{(r)} &= \langle \phi^{(r)} | H^{(r)} | \phi^{(r)} \rangle \\
&= \langle \phi^{(r)} | (1 - P_t) H^{(r)} (1 - P_t) | \phi^{(r)} \rangle + \langle \phi^{(r)} | P_t H^{(r)} | \phi^{(r)} \rangle + \langle \phi^{(r)} | (1 - P_t) H^{(r)} P_t | \phi^{(r)} \rangle \\
&\geq \langle \phi^{(r)} | (1 - P_t) (H^{(r)} - B) (1 - P_t) | \phi^{(r)} \rangle + \epsilon^{(r)} \|P_t \phi^{(r)}\|^2 \\
&\quad + \langle \phi^{(r)} | (1 - P_t) (H^{(r)} - B) P_t | \phi^{(r)} \rangle + \langle \phi^{(r)} | (1 - P_t) B P_t | \phi^{(r)} \rangle.
\end{aligned}$$

$\|\phi^{(r)}\| = 1$ および第 4 項を除くことで

$$(\text{LHS}) \geq \min\{r, t\} \|(1 - P_t)\phi^{(r)}\|^2 + \epsilon^{(r)} (1 - \|(1 - P_t)\phi^{(r)}\|^2) - \left| \langle \phi^{(r)} | (1 - P_t) B P_t | \phi^{(r)} \rangle \right|$$

を得て, 整理すると主張の不当式が得られる. \square

Lem. 94: [12] Lemma 6.6 (2)

$t \geq r$ のとき $\|(1 - P_t) H P_r\| = \|(1 - P_t) B P_r\| \leq 2e^{-(t-r)/8}$.

Prf.

最初の等号は $H = (H - B) + B$ であることと, $H - B$ が P_r と可換であることから

$$(1 - P_t)(H - B)P_r = (1 - P_t)P_r(H - B) = 0$$

により従う. $\mu > 0$ により $(1 - P_t)BP_r = (1 - P_t)e^{-\mu(H-B)}e^{\mu(H-B)}Be^{-\mu(H-B)}e^{\mu(H-B)}P_r$ であるから

$$\|(1 - P_t)BP_r\| \leq \|(1 - P_t)e^{-\mu(H-B)}\| \|e^{\mu(H-B)}Be^{-\mu(H-B)}\| \leq e^{-\mu(t-r)} \|e^{\mu(H-B)}Be^{-\mu(H-B)}\|.$$

ここで Baker-Campbell-Hausdorff の公式より

$$e^{\mu(H-B)}Be^{-\mu(H-B)} = B + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\mu^i}{i!} \underbrace{[H-B, [H-B, \dots, [H-B, B] \dots]]}_{i \text{ times}} =: \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\mu^i}{i!} Q_i \quad (\text{D.1.4})$$

と表せるので, Q_i のノルムを評価する. H, B ともに 2-local な局所項の和であることから, Q_i はある n_i 項の局所 Hamiltonian の積から構成できる. この n_i を評価する. $n_0 = 2$ は自明. Q_{i-1} が高々 i 個の局所項から構成されることに注意すると, Q_{i-1} と非可換な $H - B$ 中の項は $2i$ 個以下である. すなわち $n_i \leq 4in_{i-1}$ であり, $n_i \leq 2 \cdot 4^i i!$ が従う. 各項はノルムを 1 以下に設定しているので $Q_i \leq 2 \cdot 4^i i!$. (D.1.4) に代入して $\mu = 1/8$ とすると

$$\|e^{\mu(H-B)}Be^{-\mu(H-B)}\| = B + \sum_{i=1}^{\infty} 2 \cdot 4^i i! \cdot \frac{1}{8^i i!} \leq 2$$

なので題意を満たす. □

Lem. 95

Lem. 93 の設定で $\epsilon^{(r)} = \mathcal{O}(1)$, $r \geq \epsilon^{(r)} + 100 = \mathcal{O}(1)$ とすると $\|(1 - P_t)\phi^{(r)}\| \leq 2^{-\Omega(t)}$.^a

^a t_0 の定数 100 は安全係数であり, $\mathcal{O}(1)$ の (それなりに大きな) 量であれば何をとっても問題ない.

Prf.

$t_0 = \epsilon^{(r)} + 100$ にて $t_i = t_0 + ci$ としたとき

$$\|(1 - P_{t_i})\phi^{(r)}\| \leq 2^{-i} \quad (\text{D.1.5})$$

を満たす $c = \mathcal{O}(1)$ が存在することを示す. $i = 0$ では自明. $i = 0, 1, \dots, j-1$ で成り立つと仮定する.

Lem. 93 より十分大きな i にて

$$\begin{aligned} & \|(1 - P_{t_j})\phi^{(r)}\|^2 \\ & \leq \frac{1}{100} \left| \left\langle \phi^{(r)} \left| (1 - P_{t_j})B \sum_{i=0}^j (P_{t_i} - P_{t_{i-1}}) \right| \phi^{(r)} \right\rangle \right| \\ & \leq \frac{1}{100} \|(1 - P_{t_j})\phi^{(r)}\| \sum_{i=0}^j \|(1 - P_{t_i})B(P_{t_i} - P_{t_{i-1}})\| \|(P_{t_i} - P_{t_{i-1}})\phi^{(r)}\| \end{aligned}$$

であるから,

$$\|(1 - P_{t_j})\phi^{(r)}\| \leq \frac{1}{100} \sum_{i=0}^j \|(1 - P_{t_i})BP_{t_i}\| \|(1 - P_{t_{i-1}})\phi^{(r)}\| \leq \sum_{i=0}^j \frac{1}{10} e^{(t_i - t_j)/8} 2^{-i}$$

である。ただし最後の不等号で帰納法の仮定と Lem. 94 の結果を用いた。これにより (D.1.5) が成り立つ。 \square

Lem. 96

$\Phi^{(t)} := P_t \phi^{(t)} / \|P_t \phi^{(t)}\|$ とするとき,

$$\langle \Phi^{(t)} | H | \Phi^{(t)} \rangle \leq \epsilon^{(t)} + 2^{-\Omega(t)}.$$

Prf.

$$\begin{aligned} \epsilon^{(t)} &= \langle \phi^{(t)} | H^{(t)} | \phi^{(t)} \rangle \\ &\geq \langle \phi^{(t)} | P_t H^{(t)} P_t | \phi^{(t)} \rangle + \langle \phi^{(t)} | P_t H^{(t)} (1 - P_t) | \phi^{(t)} \rangle + \langle \phi^{(t)} | (1 - P_t) H^{(t)} P_t | \phi^{(t)} \rangle \\ &= \langle \phi^{(t)} | P_t H P_t | \phi^{(t)} \rangle + \langle \phi^{(t)} | P_t B (1 - P_t) | \phi^{(t)} \rangle + \langle \phi^{(t)} | (1 - P_t) B P_t | \phi^{(t)} \rangle \\ &\geq \langle \phi^{(t)} | P_t H P_t | \phi^{(t)} \rangle - 2^{-\Omega(t)}. \end{aligned}$$

ただし 2 行目から 3 行目への変形では (D.1.3), Lem. 94 を用いた。Lem. 95 より

$$\langle \Phi^{(t)} | H | \Phi^{(t)} \rangle \leq \frac{\epsilon^{(t)} + 2^{-\Omega(t)}}{\|P_t \phi^{(t)}\|^2} = \frac{\epsilon^{(t)} + 2^{-\Omega(t)}}{1 - 2^{-\Omega(t)}} \leq \epsilon^{(t)} + 2^{-\Omega(t)}.$$

\square

Lem. 97

$\langle \psi | H | \psi \rangle \leq \epsilon_0 + \varepsilon$ なる任意の状態 ψ に対して H の基底状態空間 G の元 (基底状態) $\psi_g \in G$ が存在して

$$\|\psi - \psi_g\|^2 \leq \frac{2\varepsilon}{\Delta E}.$$

Prf.

$$\psi = c_g \psi_g + c_e \psi_e, \quad c_g, c_e \geq 0, \quad c_g^2 + c_e^2 = 1, \quad \psi_e \perp G$$

と分解する。このとき

$$c_g^2 \epsilon_0 + c_e^2 \epsilon_f \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \leq \epsilon_0 + \varepsilon$$

であるから $c_e^2 \leq \varepsilon / \Delta E$ であり, $\|\psi - \psi_g\|^2 = 2 - 2c_g \leq 2\varepsilon / \Delta E$ が従う。 \square

Thm. 98

$t \geq \mathcal{O}(\ln \epsilon^{-1})$ にて,

$$1. \quad 0 \leq \epsilon_0 - \epsilon_{f-1}^{(t)} \leq \epsilon_0 - \epsilon_{f-2}^{(t)} \leq \dots \leq \epsilon_0 - \epsilon_0^{(t)} \leq 2^{-\Omega(t)}$$

2. H の基底状態 $\psi_{i,t} \in G$ が存在して $\|\psi_{i,t} - \phi_i^{(t)}\|^2 \leq 2^{-\Omega(t)}$ ($i = 0, 1, \dots, f-1$)
3. $\Delta E^{(t)} \geq \Delta E/10^a$

^a 右辺の $1/10$ は安全係数であり, $\Delta E^{(t)}$ が $\mathcal{O}(\Delta E)$ であることが重要.

Prf.

$\epsilon_i^{(t)}$ ($i < f$) は $H - B$ の基底固有状態なので, $\epsilon_i^{(t)} \leq \epsilon_0$ である. $\Phi_0^{(t)} := P_t \phi_0^{(t)} / \|P_t \phi_0^{(t)}\|$, $\Phi_f^{(t)} := P_t \phi_f^{(t)} / \|P_t \phi_f^{(t)}\|$ に対して Lem. 96 より

$$\epsilon_0^{(t)} \leq \epsilon_1^{(t)} \leq \dots \leq \epsilon_{f-1}^{(t)} \leq \epsilon_0 \leq \langle \Phi_0^{(t)} | H | \Phi_0^{(t)} \rangle \leq \epsilon_0^{(t)} + 2^{-\Omega(t)}$$

$$\langle \Phi_f^{(t)} | H | \Phi_f^{(t)} \rangle \leq \epsilon_f^{(t)} + 2^{-\Omega(t)} = \epsilon_0^{(t)} + \Delta E^{(t)} + 2^{-\Omega(t)} \leq \epsilon_0 + \Delta E^{(t)} + 2^{-\Omega(t)}$$

である. 上の式から 1. が従う. Lem. 97 から H の基底状態 $\psi_{i,t} \in G$ ($i = 0, 1, \dots, f$) として

$$\begin{aligned} \|\Phi_i^{(t)} - \psi_{i,t}\|^2 &\leq \frac{2^{-\Omega(t)}}{\Delta E} = 2^{-\Omega(t) + \log_2 \Delta E^{-1}} \quad (i = 0, 1, \dots, f-1) \\ \|\Phi_f^{(t)} - \psi_{f,t}\|^2 &\leq \frac{\Delta E^{(t)} + 2^{-\Omega(t)}}{\Delta E} \end{aligned} \quad (\text{D.1.6})$$

を満たすものを取りことができる. Lem. 95 から

$$\|\phi_i^{(t)} - \Phi_i^{(t)}\|^2 \leq 2^{-\Omega(t)} \quad (\text{D.1.7})$$

なので, $t \geq \mathcal{O}(\ln \Delta E^{-1})$ にて 2. が従う. $f+1$ 個のエネルギー固有状態 (の射影) $\Phi_i^{(t)}$ ($i = 0, f$) は互いに直交しているが, 基底状態空間 G は f 次元なので

$$\sum_{i=0}^f \|\Phi_i^{(t)} - P_G \Phi_i^{(t)}\|^2 \geq (f+1) - \dim G = 1$$

である. (D.1.6) により $\Phi_i^{(t)}$ は誤差 $2^{-\Omega(t)}$ で G に射影されているので, $\|\Phi_f^{(t)} - P_G \Phi_f^{(t)}\|^2 \gtrsim 1$ となる. (D.1.7) により 3. が従う. \square

Approximate ground-state projection

$G^{(t)}$ を $H^{(t)}$ の基底状態空間とし, $R(\psi)$ として状態 ψ を $[-n, 0]$ と $[1, n+1]$ に分割して Schmidt 分解したときの Schmidt ランクと定義する (Schmidt ランクについては Chap. 2 を参照せよ).

Def. 35: AGSP

$H^{(t)}$ の (D, Δ) -AGSP 演算子 $A^{(t)}$ とは, 以下を満たす線形演算子である.

1. $\forall \varphi \in G^{(t)}, A^{(t)} \varphi = \varphi$
2. $\forall \psi \perp G^{(t)}, A^{(t)} \psi \perp G^{(t)}, \|A^{(t)} \psi\|^2 \leq \Delta \|\psi\|^2$

3. 任意の状態 ψ に対して $R(A^{(t)}\psi) \leq DR(\psi)$ を満たす

H で縮退していた基底状態が摂動により $H^{(t)}$ では分裂しうるため, 分裂した基底状態に均一に作用する AGSP 演算子を構成する.

$\epsilon_\infty^{(t)} := 2s + 2t + 1$ を $H^{(t)}$ の最大固有値とする.

Lem. 99

$l^2(\epsilon_{f-1}^{(t)} - \epsilon_0^{(t)})/(\epsilon_\infty^{(t)} - \epsilon_f^{(t)}) \leq 1/10$ を仮定したとき, 次数 fl の多項式 C_l として

1. $C_l(\epsilon_0^{(t)}) = C_l(\epsilon_1^{(t)}) = \dots = C_l(\epsilon_{f-1}^{(t)}) = 1$
2. $C_l^2(x) \leq 2^{2f+4} e^{-4l\sqrt{\Delta E^{(t)}/\epsilon_\infty^{(t)}}}$ for $\epsilon_f^{(t)} \leq x \leq \epsilon_\infty^{(t)}$

を満たすものが存在する.

Prf.

第 1 種 Chebyshev 多項式

$$T_l(x) := \cos(l \arccos x) = \cosh(l y), \quad y := \cosh^{-1} x$$

を用いる. 定義により $|x| \leq 1$ にて $|T_l(x)| \leq 1$. $x \geq 1$ で $T_l(x)$ は単調増加であり,

$$T_l(x) \geq e^{ly}/2 \geq \frac{1}{2} e^{2l \tanh(y/2)} = \frac{1}{2} e^{2l\sqrt{(x-1)/(x+1)}}$$

$$\frac{T'_l(x)}{T_l(x)} = \frac{l \tanh(l y)}{\sinh y} \leq \frac{l(l y)}{y} = l^2$$

が成り立つ. $g(x) := (\epsilon_\infty^{(t)} + \epsilon_f^{(t)} - 2x)/(\epsilon_\infty^{(t)} - \epsilon_f^{(t)})$ とすると $g(\epsilon_\infty^{(t)}) = -1$, $g(\epsilon_f^{(t)}) = 1$. l 次の多項式 $S_l(x) := T_l(g(x))$ を定義すると $|S_l(x)| \leq 1$ for $\epsilon_f^{(t)} \leq x \leq \epsilon_\infty^{(t)}$ であり,

$$S_l(\epsilon_0^{(t)}) \geq \frac{1}{2} \exp \left[2l \sqrt{\frac{g(\epsilon_0^{(t)}) - 1}{g(\epsilon_0^{(t)}) + 1}} \right] = \frac{1}{2} \exp \left[2l \sqrt{\frac{\epsilon_f^{(t)} - \epsilon_0^{(t)}}{\epsilon_\infty^{(t)} - \epsilon_0^{(t)}}} \right] \geq \frac{1}{2} e^{2l\sqrt{\Delta E^{(t)}/\epsilon_\infty^{(t)}}}.$$

ここで Lagrange の平均値の定理から $\epsilon_0^{(t)} \leq \xi \leq \epsilon_{f-1}^{(t)}$ として $S_l(\epsilon_{f-1}^{(t)}) = S_l(\epsilon_0^{(t)}) + (\epsilon_{f-1}^{(t)} - \epsilon_0^{(t)}) S'_l(\xi)$ を満たすものが存在するが, $1 \leq g(\xi) \leq g(\epsilon_0^{(t)})$ なので, $S_l(\epsilon_0^{(t)}) \leq T_l(g(\xi))$. $g'(x) < 0$ に注意せよ. 故に

$$S_l(\epsilon_{f-1}^{(t)}) = S_l(\epsilon_0^{(t)}) + (\epsilon_{f-1}^{(t)} - \epsilon_0^{(t)}) T'_l(g(\xi)) g'(\xi) \geq S_l(\epsilon_0^{(t)}) \left(1 + (\epsilon_{f-1}^{(t)} - \epsilon_0^{(t)}) \frac{T'_l(g(\xi)) g'(\xi)}{T_l(g(\xi))} \right)$$

なので, $l^2(\epsilon_{f-1}^{(t)} - \epsilon_0^{(t)})/(\epsilon_\infty^{(t)} - \epsilon_f^{(t)}) \leq 1/10$ の仮定とあわせて

$$\frac{S_l(\epsilon_{f-1}^{(t)})}{S_l(\epsilon_0^{(t)})} \geq 1 - 2l^2 \frac{\epsilon_{f-1}^{(t)} - \epsilon_0^{(t)}}{\epsilon_\infty^{(t)} - \epsilon_f^{(t)}} \geq \frac{4}{5}.$$

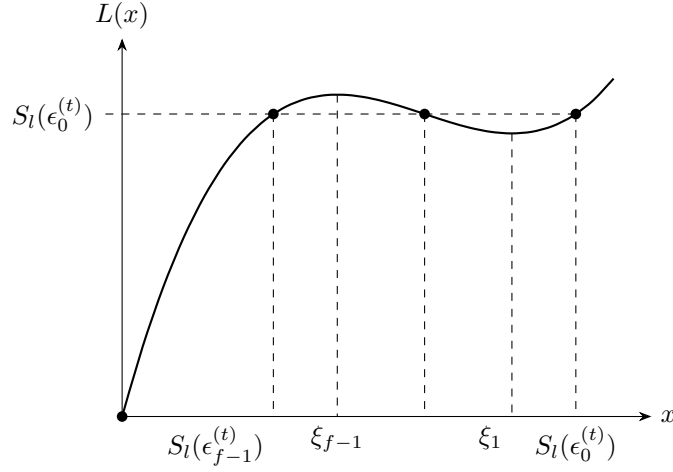


図 D.2: Lagrange 補完 $L(x)$. 黒丸で塗りつぶした点を全て通る最小次の多項式で定義する. ξ_i は区間 $(S_l(\epsilon_i^{(t)}), S_l(\epsilon_{i-1}^{(t)}))$ 中の導関数 0 の点.

$L(x) = \sum_{i=1}^f a_i x^i$ を $L(0) = 0$, $L(S_l(\epsilon_0^{(t)})) = L(S_l(\epsilon_1^{(t)})) = \dots = L(S_l(\epsilon_{f-1}^{(t)})) = S_l(\epsilon_0^{(t)})$ を満たすような Lagrange 補完とする.^a Fig. D.2 も参照せよ. 再度 Lagrange の平均値の定理により各 $i = 1, 2, \dots, f-1$ について $S_l(\epsilon_{i-1}^{(t)}) > \xi_i > S_l(\epsilon_i^{(t)})$ として $L'(\xi_i) = 0$ を満たすものが存在する. これにより

$$L'(x) = a_1 \prod_{i=1}^{f-1} (1 - x/\xi_i)$$

と表せる. $L(0) = 0 < L(S_l(\epsilon_0^{(t)})) = S_l(\epsilon_0^{(t)})$ なので $a_1 > 0$ および $x < S_l(\epsilon_{f-1}^{(t)})$ にて $L'(x) > 0$ が直ちに得られる. したがって

$$S_l(\epsilon_0^{(t)}) = L(S_l(\epsilon_{f-1}^{(t)})) = \int_0^{S_l(\epsilon_{f-1}^{(t)})} dx L'(x) \geq a_1 \int_0^{S_l(\epsilon_{f-1}^{(t)})} dx \left(1 - \frac{x}{S_l(\epsilon_{f-1}^{(t)})}\right)^{f-1} = a_1 \frac{S_l(\epsilon_{f-1}^{(t)})}{f}$$

により $a_1 \leq 5f/4$. 一方 $|x| \leq 1$ では $\xi_1 > \xi_2 > \dots > \xi_{f-1} > S_l(\epsilon_f^{(t)}) = 1 > |x|$ なので,

$$|L'(x)| \leq a_1 \prod_{i=1}^{f-1} (1 + |x|/1) = a_1 (1 + |x|)^{f-1}$$

により $|L(x)| \leq a_1/f \cdot (1 + |x|)^f \leq 2^{f+1}$ である. $C_l(x) := L(x)/S_l(\epsilon_f^{(t)})$ とすると fl 次の多項式となって題意を満たす. \square

^a 相異なる x_j による点列 $\{(x_j, y_j)\}$ の Lagrange 補完とは, この全ての点を通るような最小次数の多項式をいう. $\epsilon_i^{(t)} = \epsilon_{i+1}^{(t)}$ の場合は適切に微量を加えて対処することで, この証明でも Lagrange 補完を与える.

Lem. 100: [12] Lemma 4.2

各サイトの Hilbert 空間の次元を d とする. $l \leq s^2$ 次の任意の多項式 p_l と $t > 0$ および状態 ψ に対して

$$R(p_l(H^{(t)})\psi) \leq l^{O(\sqrt{l})} R(\psi).$$

Prf.

$K = C_l(H^{(t)})$ は H^l 以下の線型結合であり, 最悪のケースである H^l について Schmidt ランクを足すことで評価する. $H^l = \sum_{j_1, \dots, j_l} h_{j_1} \cdots h_{j_l}$ の展開を与える. 変数 $Z_0, \dots, Z_{s+1} \in \mathbb{C}$ により母関数

$$P_l(Z) := (h_L Z_0 + h_1 Z_1 + \cdots + h_R Z_{s+1})^l = \sum_{a_0 + \dots + a_{s+1} = l} f_{a_0, \dots, a_{s+1}} Z_0^{a_0} \cdots Z_{s+1}^{a_{s+1}}$$

を与える. 係数 $f_{a_0, \dots, a_{s+1}}$ は $h_{j_i}^{a_i}$ の積を含む線型結合である.

$i \in \{0, \dots, s\}$ として, 各添え字列 (a_1, \dots, a_{s+1}) の中には $a_i \leq l/s$ を満たすものが必ず存在する. そこで,

- $a_i = k$
- $\sum_{j \neq i} a_j = l - k$

の両方を満たす $f_{a_0, \dots, a_{s+1}}$ を含むような演算子 $Q_{i,l,k}$ によって

$$H^l = P_l(Z=1) = \sum_{i=1}^s \sum_{k=0}^{l/s} Q_{i,l,k}$$

と分解する.^a この $Q_{i,l,k}$ を作用させた状態の Schmidt ランク $R(Q_{i,l,k}|\psi)$ を評価する.

まずは上で箇条書きした 2 条件を満たすような $f_{a_1, \dots, a_{s+1}}$ 全てを含む母関数

$$P_{i,l,k}(Z) = \sum_{\substack{a_i=k \\ \sum_{j \neq i} a_j = l-k}} f_{a_0, \dots, a_{s+1}} \prod_{j \neq i} Z_j^{a_j} \quad (\text{D.1.8})$$

を考える. 総和の項数は a_i 以外の $s+1$ 個の添え字を決める組み合わせの数 $t = \binom{l-k+s}{s}$ だけ存在する. 積をとっている Z_j に適切な複素数を付すことで $f_{a_0, \dots, a_{s+1}}$ の線型結合を与えることができ, この対応はフルランクである. したがって $Q_{i,l,k}$ は $P_{i,l,k}(Z=1)$ の線型結合として表せるので, $P_{i,l,k}(Z)$ による Schmidt ランクの評価がそのまま $Q_{i,l,k}$ の Schmidt ランクの評価になる.

$Z \in \mathbb{C}^{s+1}$ に対して $P_{i,l,k}(Z)$ は $P_l(Z) = (A + h_i + B)^l$ から h_i が k 回現れる項を取り出して構成される. ここで $A := h_L Z_0 + \cdots + h_{i-1} Z_{i-1}$, $B := h_{i+1} Z_{i+1} + \cdots + h_R Z_{s+1}$ とした. (D.1.8) にて $Z_i = 1$ になっていることに注意せよ. A, B は交換するので, h_i が k 回現れる項は $A^{a_0} B^{b_0} h_i^{a_1} B^{b_1} h_i \cdots h_i A^{a_k} B^{b_k}$ の形に書け, 項数 ($\sum_j (a_j + b_j) = l - k$ を満たすように a_j, b_j を選ぶ場合の数) は $\binom{(l-k)+(2k+2)-1}{(2k+2)-1} = \binom{l+k+1}{2k+1}$ である. A, B は共に $(i, i+1)$ をまたがないので Schmidt ランクを増やさない. $R(\psi)$ 次元 Hilbert 空間の 2 サイト $(i, i+1)$ をまたぐ h_i は Schmidt 分解によって最大でも $[R(\psi)]^2$ 個の項に分解される. 演算子の積により Schmidt ランクは掛け算されるので,^b Schmidt ランクは $(R^2(\psi))^k$ 倍される. この k 個の h_i が系の中央 $(s/2, s/2+1)$ をまたぐエンタング

ルに寄与するには最小でも $|i - s/2|$ 個の相互作用項が間を繋がないければならず, Schmidt ランクはさらに $(R^2(\psi))^{|i-s/2|} \leq R^s(\psi)$ 倍される.

結果,

$$R(Q_{i,l,k}\psi) \leq \binom{l-k+s}{s} \binom{l+k+1}{2k+1} R^{2k}(\psi) R^s(\psi) R(\psi)$$

の評価を得る. 右辺各係数について, $k \leq l/s < s \ll l \leq s^2$, $R(\psi) \ll l$ の下で

$$\binom{l-k+s}{s} \leq (l+s)^s = l^{\mathcal{O}(s)}, \quad \binom{l+k+1}{2k+1} = l^{\mathcal{O}(l/s)}$$

および相加相乗平均による最適化 $s + l/s = 2\sqrt{l}$ を満たすように l をとることで評価して

$$R(Q_{i,l,k}\psi) \leq l^{\mathcal{O}(l/s)} R(\psi)$$

を得る. $1 \leq i \leq s$, $0 \leq k \leq l/s$ について総和をとってもオーダーは変化しないので題意を満たす. \square

^a この分解は一意ではない.

^b Schmidt ランク r, r' の演算子 A, B の積

$$AB = \sum_{\alpha=1}^r (L \otimes R) \sum_{\beta=1}^{r'} (L \otimes R)$$

の項数は rr' で抑えられるので, Schmidt ランクは掛け算される.

$l = s^2/f$, $t = \Omega(s)$ とすると, Lem. 99 の仮定

$$\frac{1}{10} \geq l^2 \frac{\epsilon_{f-1}^{(t)} - \epsilon_0^{(t)}}{\epsilon_\infty^{(t)} - \epsilon_f^{(t)}} \stackrel{Thm. 98}{=} \mathcal{O}\left(\frac{s^4 2^{-\Omega(t)}}{s+t}\right) = \mathcal{O}\left(s^3 2^{-\Omega(s)}\right)$$

は十分大きい $s > \mathcal{O}(1)$ に対して成り立つ. Lems. 99 and 100 により

$$\Delta = 2^{2f+4} e^{-4l\sqrt{\Delta E^{(t)}/\epsilon_\infty^{(t)}}} = 2^{-\Omega(s^2\sqrt{\Delta E/t})}, \quad D = (s^2)^{\mathcal{O}(\sqrt{s^2})} = s^{\mathcal{O}(s)} \quad (\text{D.1.9})$$

により $A^{(t)} = C_l(H^{(t)})$ は $H^{(t)}$ の (D, Δ) -AGSP である. 特に $t = t_0 = \Theta(s_0)$ と $s = s_0 = \tilde{\mathcal{O}}(\Delta E^{-1})$ とすることで $\Delta = 2^{-\tilde{\Omega}(\Delta E^{-1})}$, $D = 2^{\tilde{\mathcal{O}}(\Delta E^{-1})}$ となり,

$$1/100 \geq \Delta D^2 = 2^{-\Omega(s^2\sqrt{\Delta E/t})} s^{\mathcal{O}(s)}$$

なる s, t を取れる. $D \geq 1$ により

$$\Delta D \leq \Delta D^2 \leq 1/100 \quad (\text{D.1.10})$$

も成り立つ.

Rényi エンタングルメントエントロピーの面積則

以下, 簡単のため $f = 2$ の場合を考える. $f = \mathcal{O}(1)$ の場合は同様の議論が成り立つ. $s = s_0, t = t_0$ は上記に与えた値を用い, $A^{(t)}$ は $H^{(t)}$ の (D, Δ) -AGSP であるとする.

Lem. 101

$H^{(t)}$ の基底状態空間 $G^{(t)}$ の状態 $\varphi_a^{(t)}, \varphi_b^{(t)} \in G^{(t)}$ と状態 ψ_0, ψ_1 として

1. $\varphi_a^{(t)} \perp \varphi_b^{(t)}$
2. $\left| \langle \varphi_a^{(t)} | \psi_0 \rangle \right|^2 \geq 24/25$
3. $R(\psi_0) = 2^{\tilde{O}(\Delta E^{-1})}$
4. $\left| \langle \varphi_b^{(t)} | \psi_1 \rangle \right|^2 \geq 24/25$
5. $R(\psi_1) = 2^{\tilde{O}(\Delta E^{-1})}$

を満たすものが存在する.

$f > 2$ の場合は直交する基底状態 $\varphi_i^{(t)} \in G^{(t)}$ ($i = 0, 1, \dots, f-1$) に対して同様の主張を示すことになる.

Prf.

■条件 1-3: 直積状態に AGSP を 2 回作用させた状態の構成 $P^{(t)}$ を $G^{(t)}$ への射影とする. 直積状態の集合 $\{\psi \mid R(\psi) = 1\}$ はコンパクトなので

$$\max_{R(\psi)=1} \|P^{(t)}\psi\|$$

が存在し, その最大値を与える ψ_0 をとる. $\tilde{\psi}_1 := A^{(t)}\psi_0$ を定義して

$$\psi_0 = c_{0,g}\psi_{0,g} + c_{0,e}\psi_{0,e}, \quad \tilde{\psi}_1 = c_{1,g}\psi_{1,g} + c_{1,e}\psi_{1,e}, \quad (\psi_{i,g} \in G^{(t)}, \psi_{i,e} \perp G^{(t)})$$

と分解する. 上で記載した状態のうち $\tilde{\psi}_1$ のみは規格化していないことに注意せよ. AGSP の定義 (Def. 35) から

$$c_{1,g} = c_{0,g}, \quad \psi_{1,g} = \psi_{0,g}, \quad |c_{1,e}|^2 \leq \Delta, \quad R(\psi_1) \leq D \quad (\text{D.1.11})$$

が成り立つ. $\tilde{\psi}_1$ の Schmidt 分解を

$$\tilde{\psi}_1 = \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}_1)} \lambda_{1,i} |L_{1,i}\rangle \otimes |R_{1,i}\rangle \quad (\text{D.1.12})$$

とすると,

$$\sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}_1)} \lambda_{1,i}^2 = \|\tilde{\psi}_1\|^2 = |c_{1,g}|^2 + |c_{1,e}|^2 \stackrel{(\text{D.1.11})}{\leq} |c_{0,g}|^2 + \Delta. \quad (\text{D.1.13})$$

さらに

$$\begin{aligned} |c_{0,g}| &\stackrel{(\text{D.1.11})}{=} \left| \langle \psi_{0,g} | \tilde{\psi}_1 \rangle \right| \stackrel{(\text{D.1.12})}{\leq} \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}_1)} \lambda_{1,i} |\langle \psi_{0,g} | L_{1,i} \otimes R_{1,i} \rangle| \stackrel{\psi_{0,g} \in G^{(t)}}{\leq} \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}_1)} \lambda_{1,i} \|P^{(t)} |L_{1,i} \otimes R_{1,i}\rangle\| \\ &\stackrel{(\text{D.1.12})}{\leq} \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}_1)} \lambda_{1,i} \|P^{(t)} \tilde{\psi}_1\| = |c_{1,g}| \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}_1)} \lambda_{1,i} \stackrel{(\text{D.1.11})}{=} |c_{0,g}| \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}_1)} \lambda_{1,i} \end{aligned}$$

が成り立つので $\sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}_1)} \lambda_{1,i} \geq 1$. したがって

$$\begin{aligned} 1 &\leq \left(\sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}_1)} \lambda_{1,i} \right)^2 = \left(\sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}_1)} 1 \cdot \lambda_{1,i} \right)^2 \stackrel{\text{Cauchy-Schwarz}}{\leq} R(\tilde{\psi}_1) \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}_1)} \lambda_{1,i}^2 \\ &\stackrel{(\text{D.1.11}), (\text{D.1.13})}{\leq} D(|c_{0,g}|^2 + \Delta) \stackrel{(\text{D.1.10})}{\leq} D|c_{0,g}|^2 + 1/100 \end{aligned}$$

により $|c_{0,g}|^2 \geq 99/(100D) \geq 99\Delta$ を得る. ψ_0 に AGSP を 2 回作用させた $\psi_2 := A^{(t)2}\psi_0/\|A^{(t)2}\psi_0\|$ を定めると,

$$\|P^{(t)}\psi_2\|^2 = \frac{c_{0,g}\psi_{0,g} + c_{1,e}P^{(t)}A^{(t)}\psi_{1,e}}{\|c_{0,g}\psi_{0,g} + P^{(t)}A^{(t)}\psi_{1,e}\|^2} \geq \frac{|c_{0,g}|^2}{|c_{0,g}|^2 + \Delta|c_{1,e}|^2} \geq \left(1 + \frac{\Delta^2}{|c_{0,g}|^2}\right)^{-1} \geq 1 - \Delta/50,$$

$$R(\psi_2) = D^2 R(\psi_0) \stackrel{\text{by def}}{=} D^2 = 2^{\tilde{O}(\Delta E^{-1})}$$

が成り立つ. $\varphi_a^{(t)} := P^{(t)}\psi_2/\|P^{(t)}\psi_2\| \in G^{(t)}$ とそれに直交する $\varphi_b^{(t)} \in G^{(t)}$ をとると,

$$\left| \left\langle \varphi_a^{(t)} \middle| \psi_2 \right\rangle \right|^2 \geq 1 - \Delta/50, \quad \left\langle \varphi_b^{(t)} \middle| \psi_2 \right\rangle = 0, \quad \forall \chi_e \perp G^{(t)}; |\langle \chi_e | \psi_2 \rangle|^2 \leq \Delta/50 \quad (\text{D.1.14})$$

である. この $\varphi_a^{(t)}, \varphi_b^{(t)}, \psi_2$ が主張の $\varphi_a^{(t)}, \varphi_b^{(t)}, \psi_0$ に対応し, 条件 1-3 を満たしている.

■条件 4-5: AGSP2 回作用と直交する成分を取り除いた状態の構成 再び $\{\psi \mid R(\psi) = 1\}$ のコンパクト性により上記の $\varphi_a^{(t)}$ に対して

$$\max_{R(\psi)=1} \left| \left\langle \varphi_a^{(t)} \middle| \psi \right\rangle \right|$$

が存在し, その最大値を与える ψ'_0 をとる. $\tilde{\psi}'_1 := A^{(t)}\psi'_0 - \langle \psi_2 | \psi'_0 \rangle \psi_2$ を定義して

$$\psi'_0 = c'_a \varphi_a^{(t)} + c'_b \varphi_b^{(t)} + c'_e \chi_e, \quad \tilde{\psi}'_1 = c'_b \varphi_b^{(t)} + c'_r \chi_r \quad (\chi_e \perp G^{(t)}, \chi_r \perp \varphi_b^{(t)})$$

と分解する. $\chi_r \perp \varphi_b^{(t)}$ は高エネルギー・低エネルギー両成分を含む可能性があることに注意せよ.

$$\begin{aligned} c'_r \chi_r &= (A^{(t)}\psi'_0 - \langle \psi_2 | \psi'_0 \rangle \psi_2) - c'_b \varphi_b^{(t)} \\ &= c'_a \left(A^{(t)}\varphi_a^{(t)} - \langle \psi_2 | \varphi_a^{(t)} \rangle \psi_2 \right) + c'_b \left(A^{(t)}\varphi_b^{(t)} - \langle \psi_2 | \varphi_b^{(t)} \rangle \psi_2 - \varphi_b^{(t)} \right) \\ &\quad + c'_e (A^{(t)}\chi_e - \langle \psi_2 | \chi_e \rangle \psi_2) \\ &= c'_a \left(\varphi_a^{(t)} - \langle \psi_2 | \varphi_a^{(t)} \rangle \psi_2 \right) + c'_e \left(A^{(t)}\chi_e - \langle \psi_2 | \chi_e \rangle \psi_2 \right) \quad (\because (\text{D.1.14})) \end{aligned}$$

なので

$$\begin{aligned} |c'_r| &\leq |c'_a| \left\| \varphi_a^{(t)} - \langle \psi_2 | \varphi_a^{(t)} \rangle \psi_2 \right\| + |c'_e| \left\| A^{(t)}\chi_e + \langle \psi_2 | \chi_e \rangle \psi_2 \right\| \\ &\leq |c'_a| \sqrt{1 - |\langle \psi_2 | \varphi_a^{(t)} \rangle|^2} + |c'_e| \sqrt{\|A^{(t)}\chi_e\|^2 + |\langle \psi_2 | \chi_e \rangle|^2 + 2|\langle \psi_2 | \chi_e \rangle| \|A^{(t)}\chi_e\|} \\ &\leq |c'_a| \sqrt{\Delta/50} + |c'_e| \sqrt{\Delta + \Delta/50 + 2\sqrt{\Delta} \cdot \Delta/50} \leq 0.2|c'_a| \sqrt{\Delta} + 1.2|c'_e| \sqrt{\Delta} \leq 1.4\sqrt{\Delta} \end{aligned} \quad (\text{D.1.15})$$

であり, また

$$R(\tilde{\psi}'_1) \leq R(A^{(t)}\psi'_0) + R(\langle\psi_2|\psi'_0\rangle A^{(t)2}\psi_0) \leq DR(\psi'_0) + D^2R(\psi_0) \stackrel{R(\psi_0)=R(\psi'_0)=1}{\leq} D + D^2 \leq 2D^2 \quad (\text{D.1.16})$$

が成り立つ. Schmidt ランクは必ず自然数なので $D \geq 1$ であることに注意せよ. $\tilde{\psi}'_1$ の Schmidt 分解を

$$\tilde{\psi}'_1 = \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}'_1)} \lambda'_{1,i} |L'_{1,i}\rangle \otimes |R'_{1,i}\rangle$$

とすると,

$$\sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}'_1)} \lambda'^2_{1,i} = \|\tilde{\psi}'_1\|^2 = |c'_b|^2 + |c'_r|^2 \stackrel{(\text{D.1.15})}{\leq} |c'_b|^2 + 2\Delta. \quad (\text{D.1.17})$$

ψ'_0 は $\langle\varphi_a^{(t)}|\psi'_0\rangle$ を最大にするように取っているので,

$$|c'_b| = \left| \langle\varphi_b^{(t)}|\tilde{\psi}'_1\rangle \right| \leq \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}'_1)} \lambda'_{1,i} \left| \langle\varphi_b^{(t)}|L'_{1,i} \otimes R'_{1,i}\rangle \right| \leq \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}'_1)} \lambda'_{1,i} \left| \langle\varphi_b^{(t)}|\psi'_0\rangle \right| = |c'_b| \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}'_1)} \lambda'_{1,i}$$

ゆえに

$$1 \leq \left(\sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}'_1)} \lambda'_{1,i} \right)^2 \leq R(\tilde{\psi}'_1) \sum_{i=1}^{R(\tilde{\psi}'_1)} \lambda'^2_{1,i} \stackrel{(\text{D.1.16}), (\text{D.1.17})}{\leq} 2D^2(|c'_b|^2 + 2\Delta) \leq 2D^2|c'_b|^2 + 1/25$$

を得て, $|c'_b|^2 \geq 12/(25D^2) \geq 48\Delta$ である. したがって $\psi_1 := \tilde{\psi}'_1/\|\tilde{\psi}'_1\|$ とすると

$$\left| \langle\varphi_b^{(t)}|\psi'_1\rangle \right|^2 = \frac{|c'_b|^2}{|c'_b|^2 + |c'_r|^2} \stackrel{(\text{D.1.15})}{\geq} \frac{1}{1 + \frac{2\Delta}{48\Delta}} \geq 24/25$$

であり, また

$$R(\psi'_1) = R(\tilde{\psi}'_1) \stackrel{(\text{D.1.16})}{\leq} 2D^2 = 2^{\tilde{O}(\Delta E^{-1})},$$

が成り立つ. 以上により, 条件 1, 4-5 を満たす $\varphi_b^{(t)}, \psi_1$ が構成できた. □

Lem. 102

任意の H の基底状態 $\varphi \in G$ を近似する状態列 $\{\varphi_i\}$ として,

1. $|\langle\varphi_i|\varphi\rangle| \geq 1 - 2^{-\Omega(i)}$
2. $R_i := R(\varphi_i) = 2^{\tilde{O}(\Delta E^{-1} + \Delta E^{-1/4} i^{3/4})}$

を満たすものが存在する.

Prf.

$t_i = t_0 + i$ とする. Thm. 98 2. により G と $\text{Span}\{\phi_0^{(t_i)}, \phi_1^{(t_i)}\}$ は i の指数関数により近づいていた. Lem. 101 2. により, 小さく見積もっても

$$\left| \langle \phi_0^{(t_i)} | \psi_0 \rangle \right|^2 + \left| \langle \phi_1^{(t_i)} | \psi_0 \rangle \right|^2 \geq 9/10 \quad (\text{D.1.18})$$

が成り立つ. Lem. 100 を念頭に $l_i := s_i^2/2 = \Theta(\sqrt{t_i^3/\epsilon}) = \mathcal{O}(t_i^2)$ とすると, Thm. 98 1. により $\epsilon_1^{(t_i)} - \epsilon_0^{(t_i)} = 2^{-\Omega(t_i)}$, $\epsilon_\infty^{(t_i)} - \epsilon_2^{(t_i)} = 2s_i + 2t_i$ なので,

$$\frac{1}{10} \geq l_i^2 \frac{\epsilon_1^{(t_i)} - \epsilon_0^{(t_i)}}{\epsilon_\infty^{(t_i)} - \epsilon_2^{(t_i)}} = \mathcal{O}(s_i^3 \cdot 2^{-\Omega(t_i)})$$

が十分大きな $s_i > \mathcal{O}(1)$ に対して成り立つ. Lems. 99 and 100 により $H^{(t_i)}$ の (D_i, Δ_i) -AGSPA $^{(t_i)} = C_{l_i}(H^{(t_i)})$ が得られ, (D.1.9) から

$$\Delta_i = 2^{-\Omega(s_i^2 \sqrt{\Delta E/t_i})} = 2^{-\Omega(t_i)}, \quad D_i = s_i^{\mathcal{O}(s_i)} = 2^{\tilde{\mathcal{O}}(\Delta E^{-1/4} t_i^{3/4})}$$

と評価できる. 再び Lem. 101 の状態 ψ_0 を用いて $\psi_i := A^{(t_i)}\psi_0 / \|A^{(t_i)}\psi_0\|$ とすると $\psi_\infty \in G$ に対して

$$R(\psi_i) \leq D_i R(\psi_0) \leq 2^{\tilde{\mathcal{O}}(\Delta E^{-1} + \Delta E^{-1/4} t_i^{3/4})}, \quad |\langle \psi_i | \psi_\infty \rangle| \geq 1 - 2^{-\Omega(t_i)}$$

であり, $\psi'_i := A^{(t_i)}\psi_1 / \|A^{(t_i)}\psi_1\|$ についても全く同様の評価で

$$R(\psi'_i) \leq 2^{\tilde{\mathcal{O}}(\Delta E^{-1} + \Delta E^{-1/4} t_i^{3/4})}, \quad |\langle \psi'_i | \psi'_\infty \rangle| \geq 1 - 2^{-\Omega(t_i)}$$

が成り立つ. (D.1.18) にて $i = \infty$ とすると ψ_0 が G に近く, したがって $\|\psi_0 - \psi_\infty\|$ は小さい定数で抑えることができる. ψ_0 と φ_a も小さい定数で抑えられるので, ψ_∞ と φ_a もほぼ差がない. ψ_1 と φ_b についても同様の議論ができるので ψ_∞ と ψ'_∞ はほとんど直交する. H の任意の基底状態 $\varphi \in G$ は

$$\varphi = c\psi_\infty + c'\psi'_\infty, \quad (|c|, |c'| = \mathcal{O}(1))$$

と分解できるので, $\{\varphi_i := c\psi_i + c'\psi'_i\}_{i=0}^\infty$ が主張を満たす状態列である. □

ここまででの議論により Thm. 7 を導出する.

Prf. Thm. 7 (Rényi エントロピーの面積則)

φ を中央で切断したときの Schmidt 係数を λ_i とする.

$$1 - p_i := \sum_{j=1}^{R_i} \Lambda_j^2 \geq |\langle \varphi_i | \varphi \rangle|^2 \geq 1 - 2^{-\Omega(i)}$$

Rényi エントロピーの評価のため, 降順に並べた Schmidt 係数を $\{\lambda_1, \dots, \lambda_{R_1}\}, \{\lambda_{R_1+1}, \dots, \lambda_{R_2}\}, \dots$ のブロックに区切る. Rényi エントロピーの Schur concavity の証明で示した (B.1.1) により, $\sum_i \lambda_i^\alpha$ は各ブロックで均一な分布にした場合の Rényi エントロピーで上限評価できる. ブロック内の

λ_i の総和は p_i を超えないので, 最初のブロックでは

$$\sum_{i=1}^{R_0} \lambda_i^\alpha \leq R_0 \left(\frac{1}{R_0} \right)^\alpha = R_0^{1-\alpha},$$

以降のブロックでは

$$\sum_{j=R_{i+1}}^{R_{i+1}} \lambda_j^\alpha \leq (R_{i+1} - R_i) \left(\frac{p_i}{R_{i+1} - R_i} \right)^\alpha = p_i^\alpha (R_{i+1} - R_i)^{1-\alpha}$$

と抑えられるので, Lem. 102 の結果を使って Rényi エントロピーは一旦

$$\begin{aligned} & \frac{1}{1-\alpha} \ln \left(R_0^{1-\alpha} + \sum_{i=0}^{\infty} p_i^\alpha (R_{i+1} - R_i)^{1-\alpha} \right) \\ & \leq \frac{1}{1-\alpha} \ln \left(2^{(1-\alpha)\tilde{O}(\Delta E^{-1})} + \sum_{i=0}^{\infty} 2^{(1-\alpha)\tilde{O}(\Delta E^{-1} + \Delta E^{-1/4} i^{3/4}) - \alpha \Omega(i)} \right) \end{aligned}$$

と評価できる. ここで右辺第 2 項の指数を評価する. オーダーに注目すると

$$2^{(1-\alpha)\Delta E^{-1/4} i^{3/4} - \alpha i}$$

となっているが, 指数の関数としての最大値は $i \approx (1-\alpha)^4 \alpha^{-4} \Delta E^{-1}$ で達成されるので,

$$\begin{aligned} S_\alpha(\rho) & \leq \tilde{O}(\Delta E^{-1}) + \frac{1}{1-\alpha} \ln \left(\mathcal{O}(1) + 2^{\tilde{O}((1-\alpha)^3 \alpha^{-3} \Delta E^{-1})} \right) \\ & = \tilde{O}(\Delta E^{-1} + (1-\alpha)^3 \alpha^{-3} \Delta E^{-1}) = \tilde{O}(\Delta E^{-1} / \alpha^3) \end{aligned}$$

を得る. □

D.2 整数論に関する命題の証明

Prop. 103: Newton の恒等式

n 変数 x_1, \dots, x_n について k 次の基本対称式を

$$\tau_k := \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq n} x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_k},$$

k 次の冪和を $s_k := x_1^k + \dots + x_n^k$ とする. このとき

$$k \tau_k = \sum_{i=1}^k (-1)^{i-1} \tau_{k-i} s_i.$$

Prf.

■ $n = k$ の場合 恒等式

$$(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n) = x^n - \tau_1 x^{n-1} + \cdots + (-1)^{n-1} \tau_{n-1} x + (-1)^n \tau_n$$

において $x = x_i$ とすると左辺は 0 になる. 右辺を $1 \leq i \leq n$ で足し合わせると

$$0 = s_n - \tau_1 s_{n-1} + \cdots + (-1)^{n-1} \tau_{n-1} s_1 + (-1)^n n \tau_n.$$

■ $n < k$ の場合 k 変数 k 次の Newton の恒等式にて $x_{n+1} = \cdots = x_k = 0$ とすればよい.

■ $n > k$ の場合 両辺の各項は k 次なので高々 k 個の変数しか関与しない. よって任意の k 個の変数を選んで Newton の恒等式を適用し, 残りの変数を 0 にすればよい. 表題の式式はどの $n - k$ 変数を 0 にするかの総和になっている. \square

Prop. 104: 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

$$P(x) =: \sum_{k=0}^r n_k B_k(x), \quad n_k \in \mathbb{Q} \quad (\text{D.2.1})$$

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, (D.2.1) 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. □

D.3 多極子対称性下での SPT 相の分類 (Sec. 5.2) に関する命題の証明

D.3.1 (5.2.3) 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 [46, 64] に従う.

Prop. 105: (5.2.3)

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 (5.2.3) 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. $r = k$ で成り立つと仮定し, $r = k + 1$ で成り立つことを示す.

[46, 47, 64] の記法に合わせて 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 $T(\mathcal{O}) = \sum_h A^{h\dagger} \mathcal{O} A^h$ の右固有ベクトルが単位行列, 左固有ベクトルがフルランク行列 ρ である.

$$\begin{array}{c} \text{---} A^\dagger \text{---} \\ | \\ \text{---} A \text{---} \end{array} = \text{---} \quad , \quad \begin{array}{c} \text{---} A^\dagger \text{---} \\ | \\ \text{---} A \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \rho \\ \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \rho \end{array} . \quad (\text{D.3.1})$$

帰納法の仮定と Sec. 5.2.1 で行なった計算から, $U_g^{(k+1)} |\psi\rangle$ は (5.2.3) 左辺を繋げたものだが, 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

$$T_k(\mathcal{O}) := \begin{array}{c} \text{---} A^\dagger \text{---} \\ | \\ \text{---} X_g^{(k)\dagger} \text{---} A \text{---} \end{array}$$

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 $X_g^{(k+1)}$ がある.

$$\begin{array}{c} \text{---} A^\dagger \text{---} \\ | \\ X_g^{(k+1)} \text{---} X_g^{(k)\dagger} \text{---} A \end{array} \doteq \begin{array}{c} \text{---} X_g^{(k+1)} \end{array} . \quad (\text{D.3.2})$$

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.

$$\begin{array}{c} \text{---} \rho \text{---} \\ | \\ X^{(k+1)} \text{---} X^{(k+1)\dagger} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} A^\dagger \text{---} \\ | \\ X^{(k+1)} \text{---} X^{(k)\dagger} \text{---} A \text{---} X^{(k+1)\dagger} \end{array} \begin{array}{c} \rho \\ \text{---} \end{array} \\ = \begin{array}{c} X^{(k+1)} \text{---} A^\dagger \text{---} \\ | \\ X^{(k)\dagger} \text{---} A \text{---} X^{(k+1)\dagger} \end{array} \begin{array}{c} \sqrt{\rho} \\ \text{---} \\ \sqrt{\rho} \end{array} \dots \quad (\text{D.3.3})$$

(D.3.1) 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.

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

最後の等号で $X_g^{(k)}$ のユニタリ性を利用した. (D.3.3) と比較すると,

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

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,

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

となり, $X_g^{(k+1)}$ がユニタリなら (5.2.3) と等価.

(5.2.3) と (D.3.2) により

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

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. \square

D.3.2 Prop. 41 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 (5.2.6) 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 Δ 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

$$B_L(t) = B_L(t-1) + B_{L-1}(t) \tag{D.3.4}$$

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.

$$\Delta S_L(k, l) = S_{L-1}(k, l). \tag{D.3.5}$$

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 (D.3.4) を用いた.

十分性

はじめに十分性を示す.

(5.2.6) 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 (D.3.5) を, 3 行目では $C_{L-1} = S_{L-1} - \theta = 0$ を用いた. これは (5.2.7) と同値である.

(5.2.8) ($\theta(k, l) = 0$ for $k+l < r$) の証明を帰納法で行う. $C_L(0, 1) = \theta(0, 0)L = 0$ により $\theta(0, 0) = 0$ 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 (5.2.7) $(\theta(k, l) = \theta(k+1, l) + \theta(k, l+1) \text{ for } k, l < r)$ および (5.2.8) $(\theta(k, l) = 0 \text{ for } k+l < r)$ を仮定する. 前者は

$$\Delta\theta(k, l) = \theta(k, l), \quad \forall k, l < r+1 \quad (\text{D.3.6})$$

と書き換えられる. (D.3.5) と (D.3.6) 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

$$\Delta C_L(k, l) = C_{L-1}(k, l) \quad (\text{D.3.7})$$

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. (D.3.7) 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 (5.2.6) と同値である. \square

参考文献

- [1] L. D. Landau, in *Collected Papers of L.D. Landau*, edited by D. TER HAAR (Pergamon, 1965) pp. 193–216.
- [2] V. L. Berezinskii, Soviet Physics JETP **34**, 610 (1972).
- [3] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, Journal of Physics C: Solid State Physics **6**, 1181 (1973).
- [4] J. M. Kosterlitz, Journal of Physics C: Solid State Physics **7**, 1046 (1974).
- [5] S. Vijay, J. Haah, and L. Fu, Physical Review B **94**, 235157 (2016), arXiv:1603.04442 [cond-mat.str-el] .
- [6] M. B. Hastings and T. Koma, Communications in Mathematical Physics **265**, 781–804 (2006), cond-mat/0507008 .
- [7] E. H. Lieb and D. W. Robinson, Communications in Mathematical Physics **28**, 251 (1972).
- [8] S. Bravyi, M. B. Hastings, and F. Verstraete, Physical Review Letters **97**, 10.1103/physrevlett.97.050401 (2006), arXiv:quant-ph/0603121 .
- [9] D. Poulin, Physical Review Letters **104**, 10.1103/physrevlett.104.190401 (2010), arXiv:1003.3675 [quant-ph] .
- [10] T. S. Cubitt, Advanced quantum information theory course, lecture notes for “Advanced Quantum Information Theory course”, for UCL quantum CDT (2018).
- [11] M. B. Hastings, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment **2007**, P08024–P08024 (2007), arXiv:0705.2024 [quant-ph] .
- [12] I. Arad, A. Kitaev, Z. Landau, and U. Vazirani, An area law and sub-exponential algorithm for 1d systems (2013), arXiv:1301.1162 [quant-ph] .
- [13] Y. Huang, Area law in one dimension: Degenerate ground states and renyi entanglement entropy (2015), arXiv:1403.0327 [cond-mat.str-el] .
- [14] Y. Huang, *Classical simulation of quantum many-body systems*, Ph.D. thesis, UC Berkeley (2015).
- [15] M. Fannes, B. Nachtergaele, and R. F. Werner, Communications in Mathematical Physics **144**, 443 (1992).
- [16] 塩崎 謙, ノート：行列積状態 (2024).
- [17] A. Molnar, Y. Ge, N. Schuch, and J. I. Cirac, Journal of Mathematical Physics **59**, 10.1063/1.5007017 (2018), arXiv:1706.07329 [cond-mat.str-el] .
- [18] D. Perez-Garcia, F. Verstraete, M. M. Wolf, and J. I. Cirac, Quantum Info. Comput. **7**, 401–430 (2007), arXiv:quant-ph/0608197 [quant-ph] .
- [19] F. Verstraete and J. I. Cirac, Physical Review B **73**, 10.1103/physrevb.73.094423 (2006), arXiv:cond-

- mat/0505140 .
- [20] N. Schuch, M. M. Wolf, F. Verstraete, and J. I. Cirac, Physical Review Letters **100**, 030504 (2008), 0705.0292 .
 - [21] M. Sanz, D. Perez-Garcia, M. M. Wolf, and J. I. Cirac, IEEE Transactions on Information Theory **56**, 4668–4673 (2010), arXiv:0909.5347 [quant-ph] .
 - [22] J. Cirac, D. Pérez-García, N. Schuch, and F. Verstraete, Annals of Physics **378**, 100–149 (2017), arXiv:1606.00608 [quant-ph] .
 - [23] A. Cadorso, M. Sanz, M. M. Wolf, J. I. Cirac, and D. Pérez-García, Physical Review B **87**, 10.1103/physrevb.87.035114 (2013), arXiv:1209.3898 [quant-ph] .
 - [24] G. De las Cuevas, T. S. Cubitt, J. I. Cirac, M. M. Wolf, and D. Pérez-García, Journal of Mathematical Physics **57**, 10.1063/1.4954983 (2016), arXiv:arXiv:1512.05709 [quant-ph] .
 - [25] C. K. Majumdar and D. K. Ghosh, Journal of Mathematical Physics **10**, 1399 (1969), https://pubs.aip.org/aip/jmp/article-pdf/10/8/1399/19219508/1399_1_online.pdf .
 - [26] A. Beekman, L. Rademaker, and J. van Wezel, SciPost Physics Lecture Notes 10.21468/scipost-physicslectnotes.11 (2019), arXiv:1909.01280 [hep-th] .
 - [27] 高橋 和孝 and 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, 2017).
 - [28] A. Y. Kitaev, Physics-Uspekhi **44**, 131–136 (2001), arXiv:cond-mat/0010440 .
 - [29] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
 - [30] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, Communications in Mathematical Physics **115**, 477 (1988).
 - [31] H. Tasaki, *Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems* (Springer Cham, 2020).
 - [32] T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, Journal of Statistical Physics **53**, 383 (1988).
 - [33] S. Knabe, Journal of Statistical Physics **52**, 627 (1988).
 - [34] N. Seiberg and S.-H. Shao, SciPost Physics **16**, 10.21468/scipostphys.16.3.064 (2024), arXiv:2307.02534 [cond-mat.str-el] .
 - [35] S. Seifnashri and S.-H. Shao, Physical Review Letters **133**, 10.1103/physrevlett.133.116601 (2024), arXiv:2404.01369 [cond-mat.str-el] .
 - [36] M. B. Hastings and X.-G. Wen, Phys. Rev. B **72**, 045141 (2005), arXiv:cond-mat/0503554 .
 - [37] X. Chen, Z.-C. Gu, and X.-G. Wen, Physical Review B **82**, 10.1103/physrevb.82.155138 (2010), arXiv:1004.3835 [cond-mat.str-el] .
 - [38] N. Schuch, D. Pérez-García, and I. Cirac, Physical Review B **84**, 165139 (2011), arXiv:1010.3732 [cond-mat.str-el] .
 - [39] B. Nachtergaele, Communications in Mathematical Physics **175**, 565–606 (1996), arXiv:cond-mat/9410110 .
 - [40] Z.-C. Gu and X.-G. Wen, Phys. Rev. B **80**, 155131 (2009), arXiv:0903.1069 [cond-mat.str-el] .
 - [41] F. Pollmann, E. Berg, A. M. Turner, and M. Oshikawa, Phys. Rev. B **85**, 075125 (2012), arXiv:0909.4059 [cond-mat.str-el] .
 - [42] X. Chen, Generalized landau paradigm for quantum phases and phase transitions (2025), arXiv:2511.19793 [hep-th] .
 - [43] R. Thorngren and D. V. Else, Phys. Rev. X **8**, 011040 (2018), arXiv:1612.00846 [cond-mat.str-el] .

- [44] J. Garre-Rubio, L. Lootens, and A. Molnár, *Quantum* **7**, 927 (2023), arXiv:2203.12563 [cond-mat.str-el] .
- [45] A. Kitaev, *Annals of Physics* **303**, 2–30 (2003), quant-ph/9707021 .
- [46] H. T. Lam, *Phys. Rev. B* **109**, 115142 (2024), arXiv:2311.04962 [cond-mat.str-el] .
- [47] T. Saito, W. Cao, B. Han, and H. Ebisu, *Phys. Rev. B* **112**, 195133 (2025), arXiv:2509.09244 [cond-mat.str-el] .
- [48] S. D. Pace, Ömer M. Aksoy, and H. T. Lam, Spacetime symmetry-enriched symtft: from lsm anomalies to modulated symmetries and beyond (2025), arXiv:2507.02036 [cond-mat.str-el] .
- [49] D. Bulmash, Defect networks for topological phases protected by modulated symmetries (2025), arXiv:2508.06604 [cond-mat.str-el] .
- [50] C.-Y. Yao, Lattice translation modulated symmetries and tfts (2025), arXiv:2510.03889 [cond-mat.str-el] .
- [51] J. H. Han, E. Lake, H. T. Lam, R. Verresen, and Y. You, *Phys. Rev. B* **109**, 125121 (2024), arXiv:2309.10036 [cond-mat.str-el] .
- [52] H. Yan, (2025), private communication.
- [53] M. Barkeshli, P. Bonderson, M. Cheng, and Z. Wang, Symmetry fractionalization, defects, and gauging of topological phases (2019), arXiv:1410.4540 [cond-mat.str-el] .
- [54] S. Moudgalya, B. A. Bernevig, and N. Regnault, *Reports on Progress in Physics* **85**, 086501 (2022), arXiv:2109.00548 [cond-mat.str-el] .
- [55] M. M. Wolf, Quantum channels and operations-guided tour, lecture note (2012), lecture notes, Niels-Bohr Institute (Copenhagen), 2008/2009.
- [56] P. Jordan and J. V. Neumann, *Annals of Mathematics* **36**, 719 (1935).
- [57] J. Von Neumann, *Tomsk Univ. Review* **1**, 286 (1937).
- [58] H. Miranda P., *Proyecciones Journal of Mathematics* **18**, 71 (1999).
- [59] M. Carlsson, *Expositiones Mathematicae* **39**, 149 (2021).
- [60] L. Mirsky, *Monatshefte für Mathematik* **79**, 303 (1975).
- [61] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition* (Cambridge University Press, 2010).
- [62] 犬井 鉄郎, 田辺 行人, and 小野寺 嘉孝, *応用群論 (増補版) -群表現と物理学-* (裳華房, 1980).
- [63] D. Tambara, *Israel Journal of Mathematics* **118**, 29 (2000).
- [64] J. C. Bridgeman and C. T. Chubb, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **50**, 223001 (2017), arXiv:1603.03039 [quant-ph] .

索引

<p> \boxtimes for group representation, 135 for vector space, 135 $\ \cdot\$, 102 $\ \cdot\ _F$, \rightarrow Frobenius ノルム for a linear map, \rightarrow 演算子ノルム for a matrix, \rightarrow 誘導ノルム for a vector, $\rightarrow L_2$ ノルム $\ \cdot\ _p$, $\rightarrow L_p$ ノルム $\ \cdot\ _{\text{tr}}$, \rightarrow トレースノルム 't Hooft line, 84 $(\cdot)_G$, 142 $\delta(g)$, 136 Δ, 89 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{HS}$, \rightarrow Hilbert-Schmidt 内積 \geq, 114 \geq, 111 Λ_s, 4 Λ, 4 \mathcal{K}_{psd}, 118 $\Omega(\cdot)$, 158 $\mathcal{O}(\cdot)$, 158 \sim as linear representation, \rightarrow 同値 (線形表現) as multiplier of projective representation, \rightarrow 同値 (射影表現の乗数系) by conjugation of group elements, \rightarrow 共役類 Spec, 117 \succ, 131 supp for a linear operator, 119 for an operator onto Hilbert space, 5 $\Theta(\cdot)$, 158 $\tilde{\Omega}(\cdot)$, 158 $\tilde{\Theta}(\cdot)$, 158 $\tilde{O}(\cdot)$, 158 $>$ for a matrix, 111 for a positive map, 111 AGSP, 15 bicharacter, 154 blocking, 33 canonical form, 26 CPTP 写像, 31 CP 写像, 111 dist, 4 Euclid 距離, 103 F-シンボル, 74 Frobenius ノルム, 17, 106 </p>	<p> gapped, 6 GHZ 状態, 24 Hilbert-Schmidt 内積, 108 injective — MPS, 32 injectivity length, 35 isometric form of MPS, 67 Jordan-Wigner 変換, 52 Karamata の不等式, 131 L-シンボル, 76 L_p ノルム, 103 LRE, 66 majorization, 130 Manhattan 距離, 103 matrix product operator, \rightarrow MPO matrix product state, \rightarrow MS26 MPO, 33 MPS, 17, 24, 26 MPS の基本定理, 44 multipole symmetry, 88, 90 normal MPS, 32 on-site, 71 parent Hamiltonian, 46, 47 pentagon identity F-シンボルの—, 75 L-シンボルの—, 76 periodic MPS, 32 peripheral spectrum, 123 physical な脚, 25 primitive map, 125 projective representation, \rightarrow 射影表現 Schmidt ランク, 20 Schur の補題, 137 Shannon エントロピー, 128 Spec, 117 SPT 相, 71 SRE, 66 string order parameter, 61 supp for a linear operator, 119 for an operator onto Hilbert space, 5 SVD, \rightarrow 特異値分解 't Hooft line, 84 TI-MPS, 40, 41 </p>
---	--

TP 写像, 114

valence bond solid, \rightarrow VBS 状態
VBS 状態, 57
virtual な脚, 25
von Neumann エントロピー, 129
von Neumann のトレース不等式, 108

Wilson line, 84
 W 状態, 24

エニオン, 83, 84
演算子ノルム, 109

階数分解, 101
外部テンソル積, 135
拡大, 149
可約

—正写像, 119
—表現, 136
完全系列, \rightarrow 完全列
完全正值写像, \rightarrow CP 写像
完全列, 149

基底 (表現), 133
既約
—正写像, 119
—表現, 136

ギャップ, 6
共役類, 138
行列積演算子, \rightarrow MPO, \rightarrow MPO
行列積状態, 17, 24, 26
局所ユニタリ変換, 65
極分解, \rightarrow aso 階数分解 101

クラスター性, 4

結合律, 74

コサイクル, 148
コチェイン, 148
コバウンダリー, 148
コホモロジー, 148

差分演算子, 89

指標, 134
自明相, 66
射影表現, 146
Schmidt 分解, 20
準断熱接続, 65
乗数系, 146
情報量, \rightarrow Shannon エントロピー

スペクトル集合, 117
スペクトル半径, 117

正写像, 111
正定値行列, 111
正則表現, 136, 147
線形表現, 133

相互作用距離, 6
相対エントロピー, 130
双対写像, 112
双対ノルム, 105

台

演算子の—, 5
線形演算子の—, \rightarrow supp for a linear operator
第 1 種直交性, 141
対称性に保護されたトポロジカル相, 71
第 2 種直交性, 143
多極子, 88
多極子対称性, 88, 90

忠実, 136
中線定理, 104
直積表現, 135
直和表現, 136

転送行列, 28
テンソル積表現, 135

同型
完全列の—, 149

同値
線形表現の—, 134
射影表現の乗数系の—, 147

同値変換
群の表現, 134
特異値, 19
特異値分解, 19
凸円錐, 118
トレースノルム, 28, 106

内積, 103

ノルム, 102
Frobenius—, 106
 L_p —, 103
演算子—, 109
トレース—, 106
内積から誘導された—, 104
誘導—, 106

半正定値行列, 111

非可逆対称性, 65
表現, 133
標準形
OBC-MPS の—, 26
TI-MPS の—, 42

フュージョンテンソル, 72
フラクトン, 87
分裂, 149

ボックステンソル積, \rightarrow 外部テンソル積
本質的に異なる MPS, 37
ボンド次元, 26

面積則, 15

誘導ノルム, 106
ユニタリ
—表現, 134
特異値分解の—, 19

類定数, 138

励起ギャップ, 6