

ギャップレスなフラストレーションフリー系の動的臨界指数に対する厳密な下限

(arXiv:2406.06415)

政岡凜太郎¹, 副島智大², 渡辺悠樹¹

September 16, 2024

¹ 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻, ²Department of Physics, Harvard University

目次

フラストレーションフリー系とは？

フラストレーションフリー系の動的臨界指数

具体例: Rokhsar-Kivelson ハミルトニアン

まとめ

フラストレーションフリー系とは？

フラストレーションフリー系とは？

フラストレーションフリー (FF) 系 → 理論的に扱いやすい量子系の一種

定義:

ハミルトニアンが局所的なエルミート演算子 H_i の和によって $H = \sum_i H_i$ と表されているとする。ハミルトニアン H の基底状態 $|\Psi\rangle$ が全ての局所項 H_i を同時に最小化するとき、系は **フラストレーションフリー (FF)** であると言う。

簡単な例: 1 次元 Ising 模型

$$H = \sum_{i=1}^L H_i, \quad H_i = -|\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow|_{i,i+1} - |\downarrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\downarrow|_{i,i+1} \quad (1.1)$$

基底状態は $|\Psi\rangle = |\uparrow\cdots\uparrow\rangle, |\downarrow\cdots\downarrow\rangle$ の 2 つであり、全ての H_i を同時に最小化する。

他の例

ギャップト: Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) 模型、トーリックコード

ギャップレス: Rokhsar-Kivelson (RK) 量子ダイマー、強磁性 Heisenberg 模型

フラストレーションフリー系とは？

FF 系はどのような量子相を記述できるか？

- ・ トポロジカル相や SPT 相など、ギャップトな量子相の代表元として、様々な FF 系が構成されている。
- ・ 一方でギャップレスな FF 系は典型的な（共形場理論で表される）ギャップレス系とは異なる振る舞いを示すことが示唆されてきた。
→ ギャップレスな FF 系は特異で興味深い

フラストレーションフリー系の動的臨界 指数

フラストレーションフリー系の動的臨界指数

動的臨界指数 z を以下の式によって定義する。

$$\epsilon \sim \frac{1}{L^z} \quad (2.1)$$

ϵ はハミルトニアンのエネルギーギャップ、 L は系の幅。

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

先行研究

- 様々なモデルで $z \geq 2$ が確認されている
 - Isakov et al Phys. Rev. B 83, 125114 (2011)
 - Xiao Chen et al J. Phys. A: Math. Theor. 50 464002 (2017)
 - 他にもたくさん
- Knabe の方法による開放端条件における $z \geq 2$ の証明
 - Gosset and Mozgunov J. Math. Phys. 57, 091901 (2016)
 - Anshu Phys. Rev. B 101, 165104 (2020)

我々の結果 (arxiv:2406.06415)

臨界的 (\subset ギャップレス) な FF 系の動的臨界指数に対して $z \geq 2$ が成り立つ。
ただし以下の相関関数が存在するとき FF 系は臨界的であると定義する。

$$|\langle \Psi | O(\mathbf{x})(\mathbb{1} - G)O'(\mathbf{y})|\Psi \rangle| \gtrsim L^{-\Delta}, \quad |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \sim L, \quad \Delta > 0. \quad (2.2)$$

ここで $|\Psi\rangle$ はある基底状態、 G は基底状態が張る空間への射影、 $O(\mathbf{x}), O'(\mathbf{y})$ は局所演算子である。

この結果は

- ・ 下限になっている ($z = 2$ となる具体的な模型が存在する)
- ・ 境界条件、次元、格子、並進対称性を仮定しない
- ・ fermion パリティを保存するような fermion 系にも拡張可能

証明は detectability lemma を用いる。appendix 参照。

具体例: Rokhsar-Kivelson ハミルトニ
アン

具体例: Rokhsar-Kivelson ハミルトニアン

我々の結果が適用できる具体例を紹介する。

FF 系の重要なクラスの一つとして、Rokhsar-Kivelson (RK) ハミルトニアンがある。

RK ハミルトニアン

ハミルトニアン $H = \sum_i H_i$ が以下の条件を満たすとき Rokhsar Kivelson (RK) ハミルトニアンであると言う。

1. 基底状態が以下のように書かれる。

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_{\mathcal{C}} \sqrt{w(\mathcal{C})} |\mathcal{C}\rangle, \quad Z = \sum_{\mathcal{C}} w(\mathcal{C}). \quad (3.1)$$

ここで $w(\mathcal{C})$ はある古典統計力学系における Boltzmann ウェイトである。

2. フラストレーションフリー
3. H_i の基底 $\{|\mathcal{C}\rangle\}$ に対する行列要素の非対角成分が非正。

具体例: Rokhsar-Kivelson ハミルトニアン

RK ハミルトニアンは、詳細つり合いを満たす局所的な Markov 連鎖に対応することが知られている (Henley 2004 J. Phys.: Condens. Matter 16 S891)。

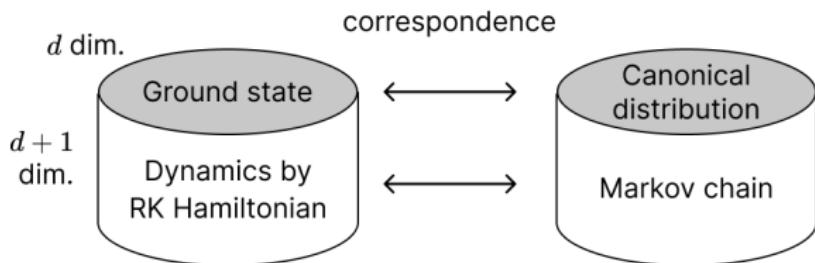


Figure 1: RK ハミルトニアンと Markov 連鎖の対応

RK ハミルトニアンのエネルギーギャップが $\epsilon \sim L^{-z}$ で閉じる
⇒ Markov 連鎖の緩和時間が $\tau \sim L^z$ で発散する

具体例: Rokhsar-Kivelson ハミルトニアン

臨界点にある統計力学系から構成される RK ハミルトニアンに対し、我々の結果から $z \geq 2$ 。よって、詳細つり合いを満たす局所的な Markov 連鎖モンテカルロ法の動的臨界指数は $z \geq 2$ である。

→ Markov 連鎖モンテカルロ法の分野における経験的な事実の証明

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

Table 1: 詳細つり合い条件を満たす局所的な Markov 連鎖モンテカルロ法に対する動的臨界指数

No-go 定理

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

まとめ

まとめ

- ・ 臨界的な FF 系の特異な振る舞い ($z \geq 2$) を厳密に示した
- ・ Markov 連鎖に対する新たな視点の提供

課題:

- ・ 任意のギャップレスな FF 系に対する $z \geq 2$ の証明
- ・ 有効理論による理解
- ・ ギャップレスな FF 系の低エネルギー励起の分散関係

興味のある方は我々の論文 (arXiv:2406.06414, arXiv:2406.06415) を読んでみてください！

主張の証明は以下の不等式に依っている。

Gosset and Huang Phys. Rev. Lett. 116, 097202

$$\frac{|\langle \Psi | O(\mathbf{x})(\mathbb{1} - G)O'(\mathbf{y})|\Psi \rangle|}{\|O(\mathbf{x})|\Psi\rangle\| \|O'(\mathbf{y})|\Psi\rangle\|} \leq 2e^{-\Theta(|\mathbf{x}-\mathbf{y}|\sqrt{\epsilon})} \quad (4.1)$$

- ・ $|\Psi\rangle$: FF なハミルトニアンの基底状態
- ・ $O(\mathbf{x}), O'(\mathbf{y})$: 局所演算子
- ・ G : 基底空間への射影
- ・ ϵ : ハミルトニアンのギャップ

$|\mathbf{x} - \mathbf{y}| = L/2$ とすると、動的臨界指数の定義 $\epsilon \sim L^{-z}$ から

$$\frac{|\langle \Psi | O_{\mathbf{x}}(\mathbb{1} - G)O'_{\mathbf{y}}|\Psi \rangle|}{\|O_{\mathbf{x}}|\Psi\rangle\| \|O'_{\mathbf{y}}|\Psi\rangle\|} \leq 2 \exp(-\Theta(L^{1-z/2})). \quad (4.2)$$

となる。左辺が L に対してべき的ならば、 $z < 2$ のとき十分大きな L で不等式が破綻する。よって $z > 2$ である。基底状態が縮退する場合にも結果をある程度拡張することができる。

Detectability lemma

We can replace each local Hamiltonian with a projector while preserving its local ground states. This operation does not change the ground states and the dynamic critical exponent.

Detectability lemma

Let $H = \sum_i H_i$ be a geometrically local frustration-free Hamiltonian with ground space projector G and spectral gap ϵ . We assume H_i is a projector. Choose some ordering of the terms H_i and let $P := \prod_i (\mathbb{1} - H_i)$, where product is taken with respect to this ordering. Then

$$\|P - G\| \leq \sqrt{\frac{g^2}{\epsilon + g^2}}, \quad (4.3)$$

where g is the maximum number of noncommutative H_j for one H_i .

Detectability lemma

Let $P_i = \mathbb{1} - H_i$ and $P := P_{i_1} P_{i_2} \cdots P_{i_N}$. For any state $|\phi\rangle$, if H_i and H_j are commutative,

$$\|H_i P_i |\phi\rangle\| = \|P_i H_i |\phi\rangle\| \leq \|H_i |\phi\rangle\|. \quad (4.4)$$

Also, for any H_j we have

$$\|H_i P_j |\phi\rangle\| \leq \|H_i |\phi\rangle\| + \|H_i H_j |\phi\rangle\| \leq \|H_i |\phi\rangle\| + \|H_j |\phi\rangle\|. \quad (4.5)$$

Let us consider $\|H_i P |\psi\rangle\|$. We move H_i to the right using the above inequalities. Repeating this procedure, at most g terms appear, and

$$\|H_i P |\psi\rangle\| \leq \sum_{i_l \sim i} \|H_{i_l} P_{i_{l+1}} \cdots P_{i_N} |\psi\rangle\|, \quad (4.6)$$

where $i_l \sim i$ means that $[H_{i_l}, H_i] \neq 0$. Then

$$\|H_i P |\psi\rangle\|^2 \leq g^2 \left(\frac{1}{g} \sum_{i_l \sim i} \|H_{i_l} P_{i_{l+1}} \cdots P_{i_N} |\psi\rangle\| \right)^2 \leq g^2 \cdot \frac{1}{g} \sum_{i_l \sim i} \|H_{i_l} P_{i_{l+1}} \cdots P_{i_N} |\psi\rangle\|^2. \quad (4.7)$$

Detectability lemma

Let us evaluate $\langle \psi | P^\dagger H P | \psi \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \psi | P^\dagger H P | \psi \rangle &= \sum_{i=1}^N \|H_i P | \psi \rangle\|^2 \leq g \sum_{i=1}^N \sum_{i_l \sim i} \|H_{i_l} P_{i_{l+1}} \cdots P_{i_N} | \psi \rangle\|^2 \\
&\leq g^2 \sum_{l=1}^N \|H_{i_l} P_{i_{l+1}} \cdots P_{i_N} | \psi \rangle\|^2 \\
&= g^2 \sum_{l=1}^N \langle \psi | P_{i_N} \cdots P_{i_{l+1}} (1 - P_{i_l}) P_{i_{l+1}} \cdots P_{i_N} | \psi \rangle \\
&= g^2 (1 - \|P | \psi \rangle\|^2).
\end{aligned} \tag{4.8}$$

For states $|\psi^\perp\rangle$ such that $G|\psi^\perp\rangle = 0$, $GP|\psi^\perp\rangle = G|\psi^\perp\rangle = 0$. Therefore

$$\epsilon \|P | \psi^\perp \rangle\|^2 \leq \langle \psi^\perp | P^\dagger H P | \psi^\perp \rangle \leq g^2 (1 - \|P | \psi^\perp \rangle\|^2). \tag{4.9}$$

Thus

$$\|P | \psi^\perp \rangle\| \leq \sqrt{\frac{g^2}{g^2 + \epsilon}}, \quad \therefore \|P - G\| \leq \sqrt{\frac{g^2}{g^2 + \epsilon}}, \quad \|P^\dagger P - G\| \leq \frac{g^2}{g^2 + \epsilon} \tag{4.10}$$

Proof of Gosset Huang inequality

We divide the P_i to the c layers or colors so that P_i are commutative with each other in a layer. Let us consider

$$P = (P_{1,1} \cdots P_{1,N_1})(P_{2,1} \cdots P_{2,N_2}) \cdots (P_{c,1} \cdots P_{c,N_c}), \quad (4.11)$$

where $P_{i,n}$ is n -th projector of i -th layer. The minimum of c does not depend on the system size. Then we have

$$\langle \Psi | O(x) O'(y) | \Psi \rangle = \langle \Psi | O(x) (P^\dagger P)^n O'(y) | \Psi \rangle \quad (4.12)$$

for $n \leq m \sim |x - y|$. Therefore

$$\langle \Psi | O(\mathbb{1} - G) O' | \Psi \rangle = \langle \Psi | O(Q_m(P^\dagger P) - G) O' | \Psi \rangle, \quad (4.13)$$

where $Q_m(x)$ is the polynomial such that $\deg Q_m(x) = m$ and $Q_m(1) = 1$, Let $G^\perp := \mathbb{1} - G$. Using $P^\dagger P G = G P^\dagger P = G$,

$$(P^\dagger P)^n - G = (P^\dagger P - G)^n (\mathbb{1} - G). \quad (4.14)$$

Therefore

$$\begin{aligned} \langle \Psi | O(\mathbb{1} - G) O' | \Psi \rangle &= \langle \Psi | O Q_m(P^\dagger P - G) G^\perp O' | \Psi \rangle \\ &\leq \|O|\psi\rangle\| \|O'|\psi\rangle\| \|Q_m(P^\dagger P - G)\|. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Proof of Gosset Huang inequality

Using $\|P^\dagger P - G\| \leq g^2/(g^2 + \epsilon)$,

$$\|Q_m(P^\dagger P - G)\| \leq \max_{0 \leq x \leq 1-\delta} |Q_m(x)|, \quad \text{where } \delta = \frac{\epsilon}{g^2 + \epsilon}. \quad (4.16)$$

The optimal polynomial is the normalized degree m Chebyshev polynomial of the first kind:

$$Q_m(x) = \frac{T_m(\frac{2x}{1-\delta} - 1)}{T_m(\frac{2}{1-\delta} - 1)}, \quad (4.17)$$

where $T_m(x) = \cos(m \arccos x)$ or $\cosh(m \operatorname{arccosh} x)$. The polynomial $Q_m(x)$ satysfies

$$|Q_m(x)| \leq 2e^{-2m\sqrt{\delta}} = 2 \exp\left(-2m \sqrt{\frac{\epsilon}{g^2 + \epsilon}}\right). \quad (4.18)$$

Using (4.15) and (4.18),

$$\frac{\langle \Psi | O(1 - G)O' | \Psi \rangle}{\|O|\psi\rangle\| \|O'|\psi\rangle\|} \leq 2 \exp\left(-2m \sqrt{\frac{\epsilon}{g^2 + \epsilon}}\right). \quad (4.19)$$