

몽떼카를로방법에 의한 위상학적질서의 검출

박철민, 리국철

최근 위상학적절연체와 위상학적초전도체에 대한 연구가 활발히 진행되고있다.

모든 위상학적상들의 공통적인 특징은 보통의 상분류방법에 의해서는 그 어떤 질서도 가려낼수 없다는 점이다.[1] 실제로 위상학적물질들에는 국부질서파라미터가 존재하지 않기때문에 이론적으로 위상학적질서를 구분하는것은 불가능한것으로 되어있다. 위상학적상은 해석적방법으로는 풀수 없는 강상관계에서 제기되기때문에 흔히 이 모형들에서는 수값계산이 필요하다.

한편 삼방살창우의 량자이량체모형이 Z_2 위상학적질서의 액체상을 가진다는것이 알려져있다. 선행연구[2]에서는 삼방살창우에서 량자이량체모형의 위상학적혼합엔트로피를 Pfaffian법을 리용하여 비교적 작은 살창들에 대하여 높은 정확도(10^{-9})로 계산하였다. 선행연구[3]에서는 혼합엔트로피를 몽떼카를로방법으로 계산하는 한가지 가능성을 제시하였는데 이 방법은 일반적으로 비교적 큰 계들에 적용할수 있다.

우리는 비교적 큰 삼방살창우에서 량자이량체모형의 위상학적혼합엔트로피를 계산함으로써 량자이량체모형이 위상학적질서의 액체상을 가진다는것을 확인하였으며 위상학적상검출과 상변환에서 위상학적혼합엔트로피의 일반성을 검증하였다.

2분혼합엔트로피는 량자상태에 대한 검출도구로서 주목을 끌고있다.[1] 순수상태 $|\Psi\rangle$ 의 2분혼합엔트로피는 살창을 Ω 구역과 그것의 나머지구역($\bar{\Omega}$)으로 2분하여 다음과 같이 정의한다.

$$S(\rho_\Omega) \equiv -\text{Tr} \rho_\Omega \ln \rho_\Omega \quad (1)$$

만일 구역 Ω 가 길이가 L 인 미끈한 경계를 가진 구역이라면 2분혼합엔트로피는 다음의 규칙을 따른다.

$$S_\Omega \equiv S(\rho_\Omega) = \alpha L - \gamma + \dots \quad (2)$$

여기서 기본항은 구역의 둘레 L 에 비례하는 항이며 α 는 상수로서 계의 미시구조에 관계된다. 또한 γ 는 상수로서 위상학적질서를 나타내는 위상학적혼합엔트로피이다.

선행연구[4]에서는 유효작용위상학적마당론으로, 선행연구[5]에서는 현-그물과동함수로 γ 를 유도하였다.

2분혼합엔트로피는 다음과 같다.

$$\gamma = \ln D \quad (3)$$

여기서 D 는 총량자차원수로서 준립자량자차원수 d_a (여기서 a 는 준립자첨수)에 의하여 다음과 같이 정의된다.

$$D = \sqrt{\sum_a d_a^2} \quad (4)$$

보통의 상에 대해서는 잘 알려진 준립자들만 있으므로 $D=1$, $\gamma=0$ 이지만 위상학적질서상에서는 $D>1$ 이다. 따라서 위상학적혼합엔트로피는 위상학적질서의 증거로 된다.

우리는 파동함수가 배치들의 일반합으로 표시되는 RK점들을 연구하고 파동함수의 고전몽떼카를로모의를 리용하여 추정량의 기대값을 계산하였다.

혼합엔트로피를 계산하기 위하여 원본을 복사한 서로 호상작용하지 않는 2개의 복사본 1과 2가 겹친 새로운 2중계를 생각하자.

이때 매 복사본은 각각 동일한 2분구역 A와 B를 가지고 2중계의 힐베르트공간이 A_1, B_1 과 A_2, B_2 의 자유도로 표시되는 상태를 가진 2개 복사본의 텐소르적이 되도록 하였다.

한편 2분혼합엔트로피는 2중힐베르트공간에서 A의 자유도를 바꾸는 조작으로 정의된 $SWAP_A$ 연산자의 기대값과 다음과 같이 련관되어있다는것이 알려져있다.

$$SWAP_A |A_1 B_1\rangle \otimes |A_2 B_2\rangle = |A_2 B_1\rangle \otimes |A_1 B_2\rangle \quad (5)$$

선행연구[3]에서는 $Tr\rho_A^2 = \langle SWAP_A \rangle$ 이며 따라서 $S_A = -\ln\langle SWAP_A \rangle$ 이라는것을 밝혔다.

C가 2중계의 이량체회복을 표시한다면 $SWAP$ 연산자의 행렬원소들은 다음과 같다.

$$\langle C' | SWAP_A | C \rangle = \delta_{C'CA} \delta(C|A) \quad (6)$$

여기서 C_A 는 구역 A를 바꾸는 조작의 결과에 C로부터 생성되는 배치이며 $\delta(C|A)$ 는 바꾼 다음 배치가 이량체들이 서로 사귀지 않는다는 제한조건을 파괴하지 않으면 1, 그렇지 않으면 0이다.

$SWAP$ 의 기대값을 배치 C에 대한 비중합으로 다음과 같이 쓸수 있다.

$$\begin{aligned} \langle SWAP_A \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{C', C} \exp(-E(C') - E(C)) \langle C' | SWAP_A | C \rangle = \\ &= \frac{1}{Z} \sum_C \exp(-E(C_A) - E(C)) \delta(C|A) = \\ &= \sum_C \exp(-\Delta E(C|A)) \delta(C|A) \Pi(C) \end{aligned} \quad (7)$$

여기서 $Z = \sum_C \exp(-2E(C))$ 이고 $\Pi(C) \equiv \exp(-2E(C))/Z$ 는 확률분포와 같이 볼수 있으며

$\Delta E(C|A) \equiv E(C_A) - E(C)$ 이다.

그러면 $\Pi(C)$ 의 고전몽떼카를로표본화를 리용하여 $SWAP$ 의 기대값을 추정량 $\exp(-\Delta E(C))\delta(C|A)$ 로부터 구할수 있다. RK바닥상태에 대하여 교환연산자의 기대값은 간단히 이량체배치가운데서 A-교환가능한 몫이다.

선행연구[3]의 비률법을 적용하면 $SWAP$ 기대값의 비률을 효과적으로 구할수 있다.

혼합엔트로피계산에 리용되는 바른6각형구역, 구역상쇄법에서 리용하는 A, B, C구역 및 비률법에서 리용하는 A, A' 구역은 그림 1과 같다.

그림 1에서 구역 A'는 A보다 크지만 둘레 $L_{A'}$ 는 L_A 에 충분히 가깝고 비률이 그리 작지 않다.

식 (7)은 2개 구역의 혼합엔트로피차를 주지만 위상학적혼합엔트로피를 계산하는데 필요한 큰 구역의 혼합엔트로피는 작은 단일구역들의 차이값들을 련속적으로 더하여 얻을수 있다.

$$S_{A_n} = S_{A_0} + \sum_{i=1}^n (S_{A_i} - S_{A_{i-1}}) \quad (A_n > \dots > A_i > \dots > A_0) \quad (8)$$

$$\frac{\langle \text{SWAP}_{A'} \rangle}{\langle \text{SWAP}_A \rangle} = \exp(S_A - S_{A'}) \sim \exp(-\alpha(L_{A'} - L_A))$$

큰 구역 A' 는 작은 구역 A 도 내부에 포함한다. 회색칠한 조각들은 A 가 뒤집기가능하도록 고정된 경우 두 복사본에서 동시에 뒤집어야 할 조각들의 실례이다.

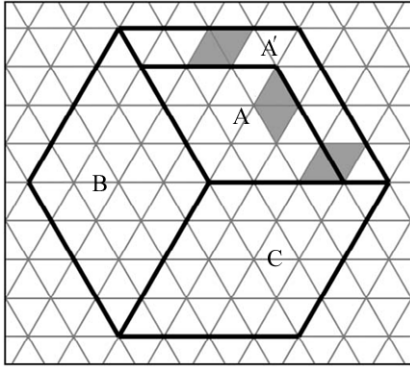


그림 1. 혼합엔트로피 계산에 이용되는 바른6각형구역, 구역상쇄법에서 이용하는 A, B, C구역 및 비율법에서 이용하는 A, A' 구역

$\langle \text{SWAP}_A \rangle$ 를 계산하는데 이용되는 추정량이 2중힐베르트공간의 모든 곳에서 다 의미를 가지는것이 아니라 교환가능한 배치에 대하여서만 0아닌 값을 가지므로 식 (7)을 계산하는데서 난점은 A' 에 대한 교환가능한 배치는 A 에 대한 교환가능한 배치의 부분모임도 아니며 그것의 거꿀도 성립하지 않는다는것이다.

실지로 직접 계산할수 있는것은 다음의 비율들이다.

$$R' = \frac{\langle \text{SWAP}_{A'} \text{SWAP}_A \rangle}{\langle \text{SWAP}_{A'} \rangle} \quad (9)$$

$$R = \frac{\langle \text{SWAP}_A \text{SWAP}_{A'} \rangle}{\langle \text{SWAP}_A \rangle}$$

$1 = \sum_C |C\rangle\langle C|$ 을 R 의 분자에 넣고 매 SWAP를 중심에 적용하면 다음식을 얻을수 있다.

$$R = \frac{\sum_C \delta(C|A) \delta(C|A') \exp(-E(C_A) - E(C_{A'}))}{\sum_C \exp(-E(C_A) - E(C)) \delta(C|A)} =$$

$$= \sum_{C|A} \exp(-\Delta E(C|A')) \delta(C|A') \Pi_A(C) \quad (10)$$

$$\Pi_A(C) = \frac{\exp(-E(C_A) - E(C))}{\sum_{C|A} \exp(-E(C_A) - E(C))}$$

여기서 합은 A -교환가능한 배치를 보여주며 $\Delta E(C|A') \equiv E(C_{A'}) - E(C)$ 이다.

R 를 계산하려면 A -경계가 언제나 교환가능하도록 이량체배치들을 선택하며 그다음 추정량 $\delta(C|A') \exp(-\Delta E(C|A'))$ 을 측정한다.

표준 RK점에서는 $\exp=1$ 이므로 R 는 A 와 A' 에 대하여 모두 교환가능한 배치에 비한 A 에 대하여서만 교환가능한 배치의 비율이다.

R' 를 구하려면 반대로 A' 가 교환가능하도록 하고 위의 과정을 반복한다. A 에서 언제나 교환가능하도록 남아있는 배치들을 생성하려면 매 복사본에 대하여 갱신을 따로따로 진행하는데 여기서 레외로 되는 조각들은 복사본 1과 2에서 동시에 뒤집어야 하는것들이다.

우리는 몽떼카를로방법으로 그림 1과 같은 바른6각형모양의 구역에 대한 위상학적혼합엔트로피를 계산하였다.

먼저 바른6각형구역을 계의 3차회전대칭성을 고려하여 꼭같은 3개의 부분구역 A, B, C로 가르고 A, AB, ABC구역에 대한 혼합엔트로피를 비률법을 적용하여 따로따로 구하였다.

다음 구역경계상쇄법[4]를 리용하여 위상학적혼합엔트로피를 다음식으로 구하였다.

$$S = S_A + S_B + S_C - S_{AB} - S_{AC} - S_{BC} + S_{ABC} \quad (11)$$

식 (11)을 리용하면 혼합엔트로피에서 경계의 기여몹은 상쇄되고 상수항 γ (위상학적혼합엔트로피)만 남게 된다.

우리는 14×14 , 16×16 , 18×18 삼방살창에서 각각 한번의 길이가 3, 4, 5, 6인 바른6면체구역에 대한 위상학적혼합엔트로피를 계산하였다.(그림 2, 표)

그림 2와 표에서 보는바와 같이 위상학적혼

표. 계산결과

w	$\gamma/\ln 2$		
	14×14	16×16	18×18
3	0.889	0.918	0.870
4	0.942	0.934	0.924
5	0.993	1.005	0.995
6	1.010	0.997	1.002

합엔트로피는 살창의 크기가 증가할수록, 구역의 크기가 증가할수록 리론적예측값 $\ln 2$ 로 다가간다.

바른6각형구역이 일정한 크기보다 커지면 예측값에서 벗어난다. 그것은 바른6각형구역의 크기가 커질수록 살창의 나머지구역의 크기가 감소하므로 유한크기효과의 영향을 받기때문이라고 볼수 있다.

이와 같이 우리는 몽떼카를로방법을 리용하여 비교적 큰 삼방살창우에서 량자이량체모형의 위상학적혼합엔트로피를 계산하였으며 그것이 리론적예측값 $\ln 2$ 로 수렴한다는것을 밝혔다.

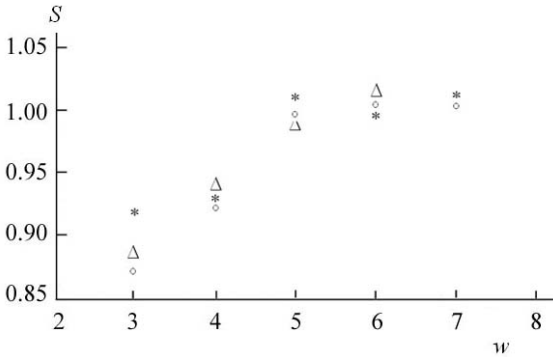


그림 2. 삼방살창우에서 량자이량체모형의 위상학적혼합엔트로피변화

*, Δ, ○는 각각 14×14 , 16×16 , 18×18 인 경우

참 고 문 헌

- [1] A. Selem et al.; Phys. Rev., B 87, 125105, 2013.
- [2] S. Furukawa et al.; Phys. Rev., B 75, 214407, 2007.
- [3] M. B. Hastings et al.; Phys. Rev. Lett., 104, 157201, 2010.
- [4] A. Kitaev et al.; Phys. Rev. Lett., 96, 110404, 2006.
- [5] M. Levin et al.; Phys. Rev. Lett., 96, 110405, 2006.

주체104(2015)년 4월 5일 원고접수

Detection of Topological Order by Monte Carlo Approach

Pak Chol Min, Ri Kuk Chol

Topological phases including topological insulators and topological superconductors share a common property that these appear disordered in terms of the conventional order parameters. Local order parameters all have vanishing expectation values and local observables all have exponentially decaying correlation values. A long-range or non-local order, however, still persists in those systems, which may be used to detect their topological order.

In the present paper, we describe a Monte Carlo approach to calculate the topological entanglement entropy so as to detect the topological order of a quantum dimer model on the triangular lattice which is known to possess a liquid phase with Z_2 topological order. We provide numerical results for lattice sizes up to 18×18 (324 sites) and verify that this model actually has a liquid phase with the known topological order.

Key words: Monte Carlo approach, topological order