

iDMRGによる対称性に守られたトポロジカル相の解析
—フラストレート交替鎖への適用—

理研 上田宏



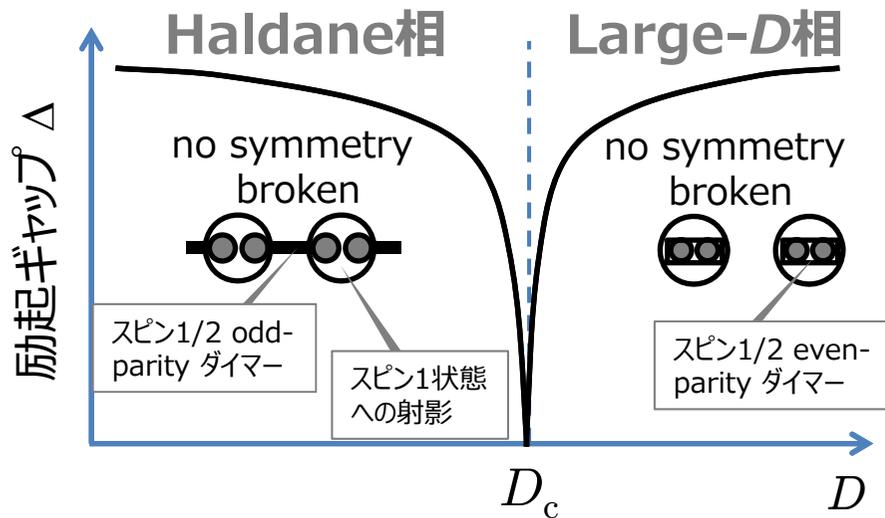
- 対称性に守られたトポロジカル (SPT) 相転移
- 行列積状態を利用したSPT相の区別
- 適用先
 - スピン1/2フラストレート交替鎖
 - 基底状態相図
 - 異なるベクトルカイラルダイマー相間のSPT相転移
 - 臨界性の解析
- まとめと今後の展望

- 対称性に守られたトポロジカル (SPT) 相転移
- 行列積状態を利用したSPT相の区別
- 適用先
 - スピン1/2フラストレート交替鎖
 - 基底状態相図
 - 異なるベクトルカイラルダイマー相間のSPT相転移
 - 臨界性の解析
- まとめと今後の展望

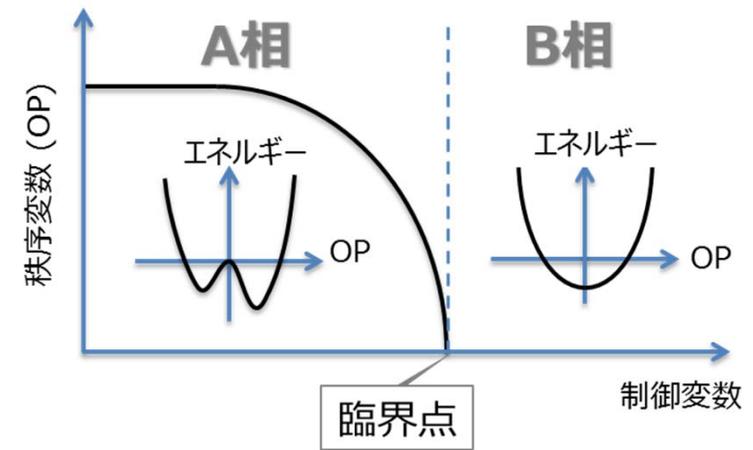
対称性に守られたトポロジカル (SPT) 相転移

例) スピン $S = 1$ 鎖

$$\hat{H} = \sum_i \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1} + D \sum_i (\hat{S}_i^z)^2$$



- ランダウ理論に基づく相転移



- 重要な対称性

$Z_2 \times Z_2$

ボンド中心反転

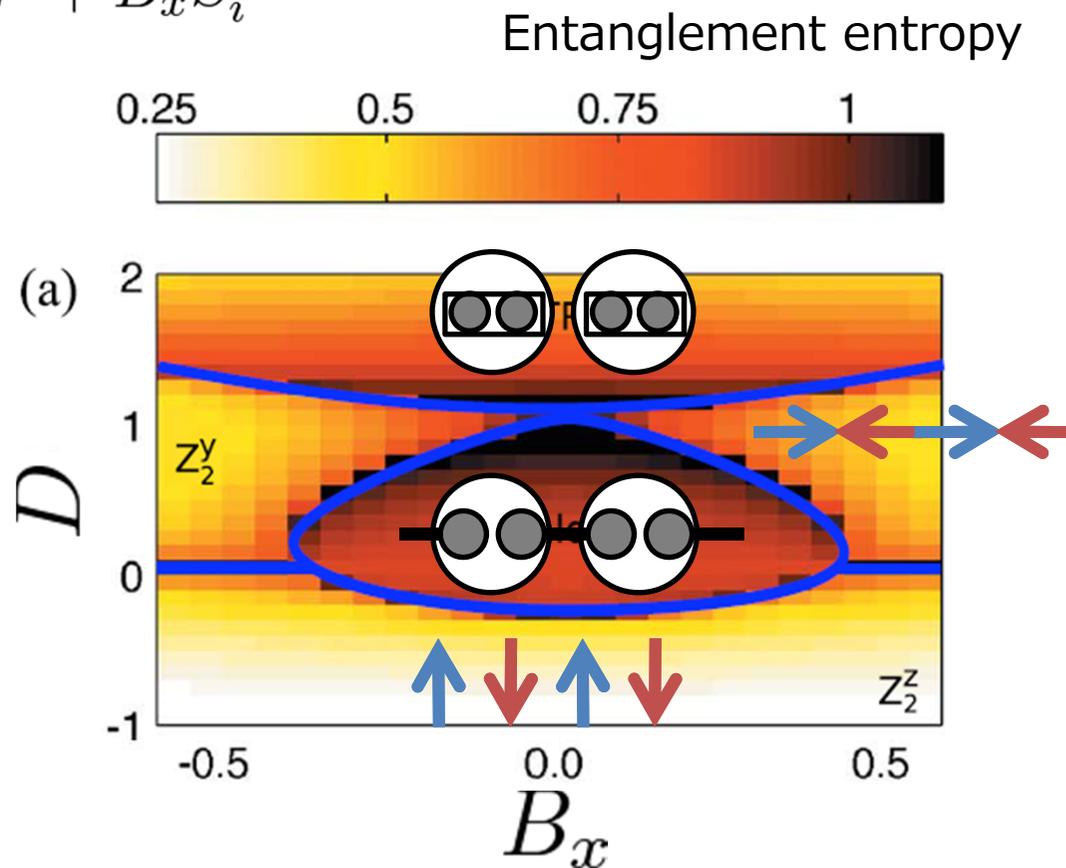
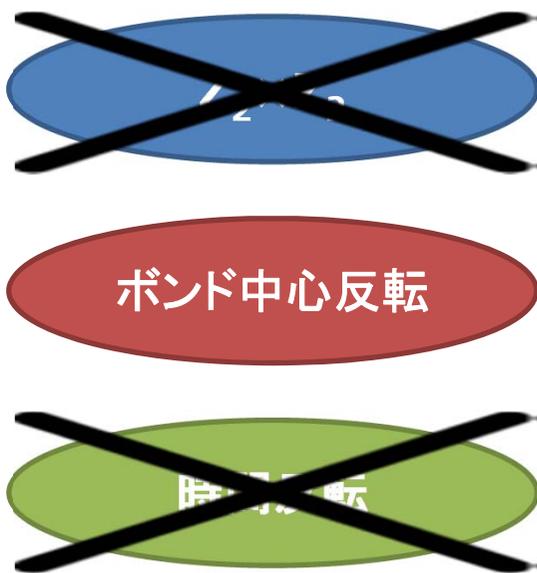
時間反転

SPT相とSPT相転移

(Pollmann, Turner, Berg, Oshikawa, PRB 2010)



$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1} + D(\hat{S}_i^z)^2 + B_x \hat{S}_i^x$$

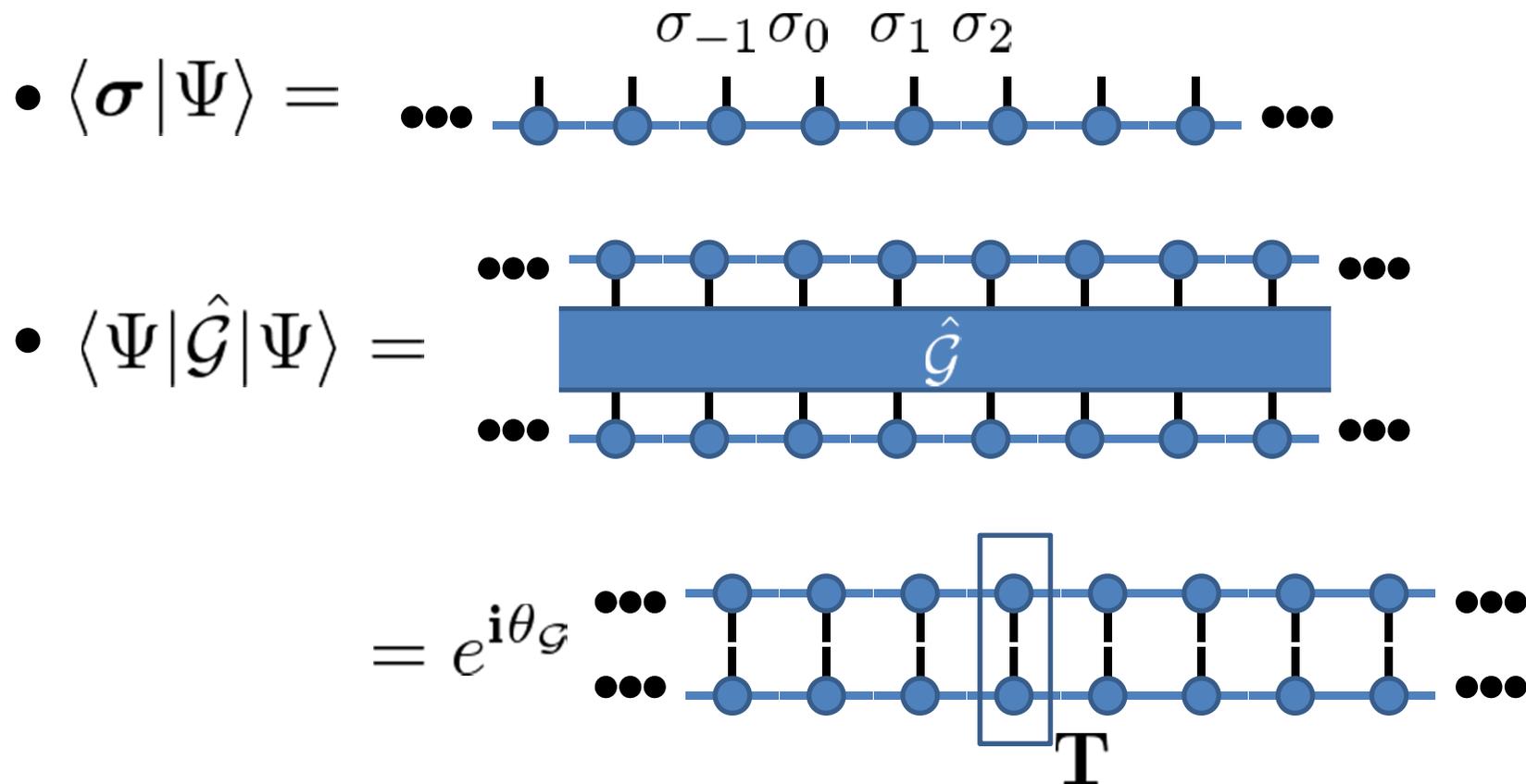


- $B_x \neq 0$: Haldane—Large-D相転移の消失

- 対称性に守られたトポロジカル (SPT) 相転移
- 行列積状態を利用したSPT相の区別
- 適用先
 - スピン $1/2$ フラストレート交替鎖
 - 基底状態相図
 - 異なるベクトルカイラルダイマー相間のSPT相転移
 - 臨界性の解析
- まとめと今後の展望

行列積状態 (MPS) に対する対称操作

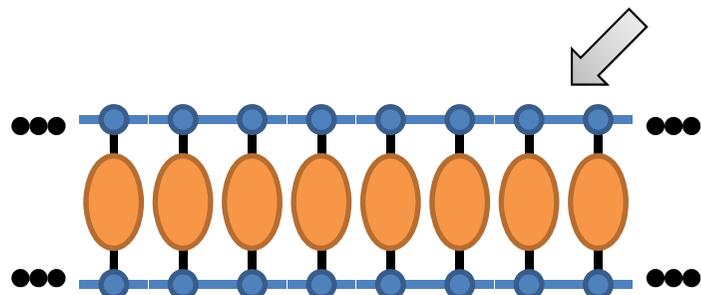
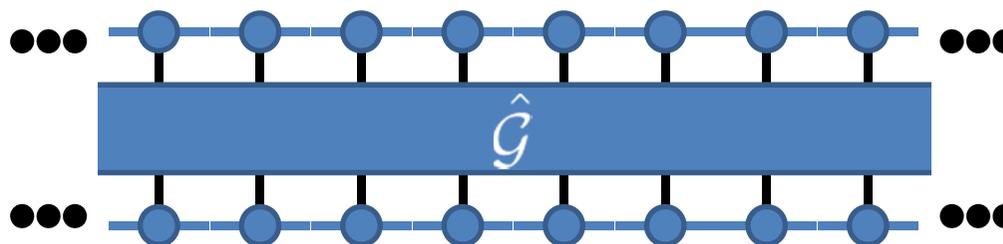
- \hat{G} : 対称操作, $|\Psi\rangle$: 基底状態
 $[\hat{G}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$ and $|\langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle| = \langle \Psi | \Psi \rangle$.



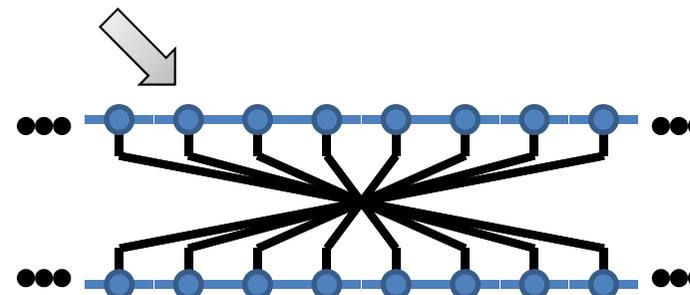
行列積状態 (MPS) に対する対称操作

- 対称操作の例

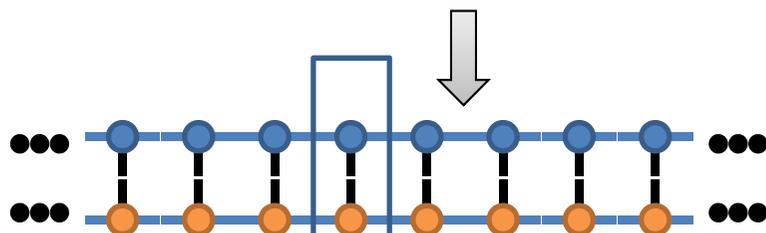
$$\langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle =$$



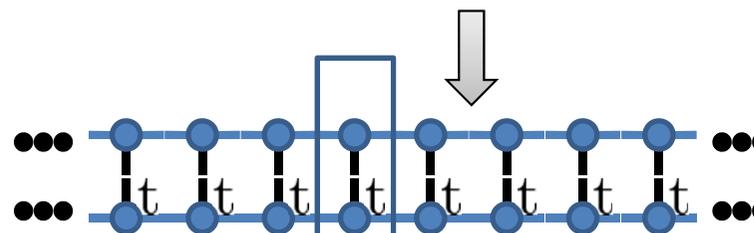
局所回転: R



ボンド中心反転: P



T_R



T_P

行列積状態 (MPS) に対する対称操作

- 周期境界条件の時

$$|\langle \Psi | \hat{\mathcal{G}} | \Psi \rangle| = \langle \Psi | \Psi \rangle$$

$$\Leftrightarrow \text{Tr}[\mathbf{T}_{\mathcal{G}}^N] = e^{i\theta_{\mathcal{G}}} \text{Tr}[\mathbf{T}^N]$$

↓ $N \gg 1$ • 対角化可能
 • 絶対値最大固有値が唯一

$$e^{iN\phi_{\mathcal{G}}} \text{Tr}[\tilde{\mathbf{v}}_r \tilde{\mathbf{v}}_{\ell}^{\dagger}] = e^{i\theta_{\mathcal{G}}} e^{iN\phi} \text{Tr}[\mathbf{v}_r \mathbf{v}_{\ell}^{\dagger}]$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} e^{i\theta_{\mathcal{G}}} = e^{iN(\phi_{\mathcal{G}} - \phi)} \\ \text{Tr}[\tilde{\mathbf{M}}(= \tilde{\mathbf{v}}_{\ell}^{\dagger} \tilde{\mathbf{v}}_r)] = \text{Tr}[\mathbf{M}(= \mathbf{v}_{\ell}^{\dagger} \mathbf{v}_r)] \end{cases}$$

$$\mathbf{v}_{\ell(r)} := \{v_{\ell(r)ij}\}_{(ij)=(11), \dots, (mm)}$$

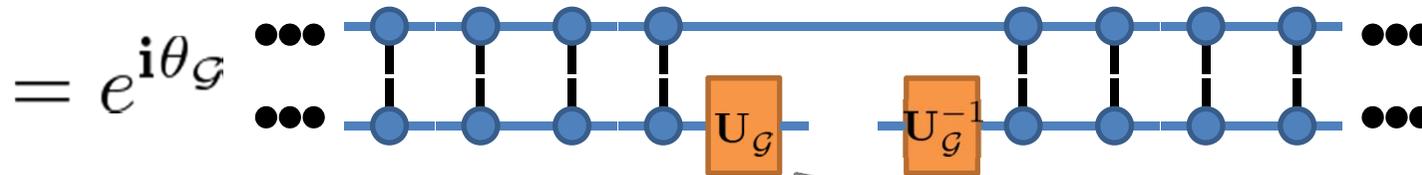
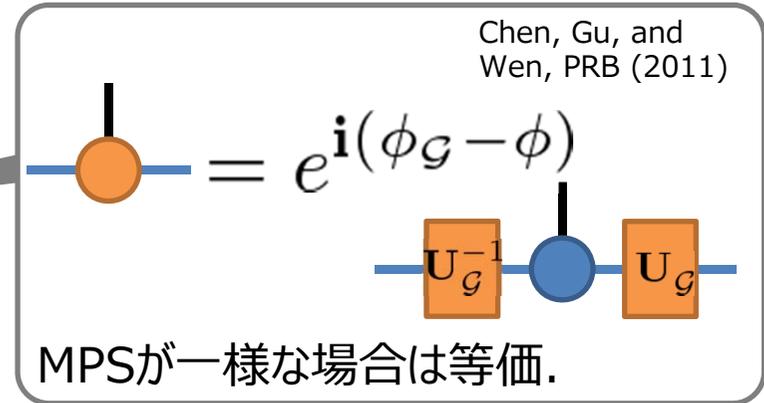
↓ reshape

$$\mathbf{v}_{\ell(r)} := \{v_{\ell(r)ij}\}_{\substack{i=1, \dots, m \\ j=1, \dots, m}}$$

行列積状態 (MPS) に対する対称操作

- (必要) 十分条件

$$\tilde{\mathbf{M}} = [\mathbf{U}_g]^t \mathbf{M} [\mathbf{U}_g^{-1}]^t$$



Schmidt基底
における表現行列

→

$$\begin{cases} e^{i\theta_g} = e^{iN(\phi_g - \phi)} \\ \text{Tr}[\tilde{\mathbf{M}} (= \tilde{\mathbf{v}}_\ell^\dagger \tilde{\mathbf{v}}_r)] = \text{Tr}[\mathbf{M} (= \mathbf{v}_\ell^\dagger \mathbf{v}_r)] \end{cases}$$

一様なMPSに対する対称操作

Chen, Gu, and Wen, PRB (2011)



- $|\Psi\rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \text{Tr}[\prod_{i=1}^N A^{\sigma_i}] |\sigma_1 \cdots \sigma_N\rangle$

$$A^{\sigma_i}, A_g^{\sigma_i} : m \times m \text{ 行列}$$

$$\xrightarrow{\text{対称操作: } g} |\Psi_g\rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \text{Tr}[\prod_{i=1}^N A_g^{\sigma_i}] |\sigma_1 \cdots \sigma_N\rangle$$

局所ユニタリ変換: $|\Psi_h\rangle = \hat{h}|\Psi\rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \text{Tr}[\prod_i \sum_{\sigma'_i} h_{\sigma_i \sigma'_i} A^{\sigma'_i}] |\sigma_1 \cdots \sigma_N\rangle$

時間反転操作: $|\Psi_\Theta\rangle = \hat{\Theta}|\Psi\rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \text{Tr}[\prod_i \sum_{\sigma'_i} R_{\sigma_i \sigma'_i}^{2y} (A^{\sigma'_i})^*] |\sigma_1 \cdots \sigma_N\rangle$

パリティ変換: $|\Psi_p\rangle = \hat{p}|\Psi\rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \text{Tr}[\prod_i (\sum_{\sigma'} h_{\sigma_i \sigma'}^p A^{\sigma'})^T] |\sigma_1 \cdots \sigma_N\rangle$

$$h^p = \mathbb{1} \text{ and } R^{2x}$$

- 対称操作に対して状態が不変: $\langle \Psi | \Psi_g \rangle = \alpha(g)^N, |\alpha(g)| = 1$



SPT相を分類するための index の1つ
(時間反転対称操作は除く)

$$A_g^{\sigma_i} = \alpha(g) U_g^{-1} A^{\sigma_i} U_g$$

射影表現
(projective representation)

乗数系 (Factor system)

Chen, Gu, and
Wen, PRB (2011)



- $\omega(h', h)$ [h', h : 局所ユニタリ変換]

$$U_{h'}U_h = \boxed{\omega(h', h)}U_{h'h}, \quad |\omega(h', h)| = 1$$

- $\beta(\Theta)$ と $\beta(p)$ [$\Theta^2 = p^2 = 1$]

$$A_{\Theta^2}^{\sigma_i} = U_{\Theta}^{-1*}U_{\Theta}^{-1}A^{\sigma_i}U_{\Theta}U_{\Theta}^* = A^{\sigma_i} \iff U_{\Theta}U_{\Theta}^* = \boxed{\beta(\Theta)}\mathbb{1}, \quad \beta(\Theta) = \pm 1$$

$$A_{p^2}^{\sigma_i} = \alpha(p)^2U_p^T U_p^{-1}A^{\sigma_i}U_p(U_p^{-1})^T = A^{\sigma_i} \iff U_p = \boxed{\beta(p)}U_p^T, \quad \beta(p) = \pm 1, \\ \alpha(p) = \pm 1$$

- $\gamma(\Theta, h)$ と $\gamma(p, h)$ [ただし $\Theta h = h\Theta, ph = hp$]

$$U_{\Theta}^{-1}U_hU_{\Theta} = \boxed{\gamma(\Theta, h)}U_h^*, \quad U_p^{-1}U_hU_p = \boxed{\gamma(p, h)}(U_h^T)^{-1}$$

- *Left canonical form*

$$T_{ii'jj'} = \sum_{\sigma} A_{ij}^{*\sigma} A_{i'j'}^{\sigma}, \quad \sum_{ii'} T_{ii'jj'} = \boxed{\delta_{jj'}}$$

絶対値最大固有値に
対応する左固有ベクトル

– 相関長 : $\xi = -[\log w]^{-1}$ ※ w : 転送行列 T の絶対値が2番目に
大きな固有値

- *General transfer matrix*

$$(T_g)_{ii'jj'} = \sum_{\sigma} A_{ij}^{*\sigma} (A_g^{\sigma})_{i'j'}, \quad \sum_{ii'} (U_g)_{ii'} (T_g)_{ii'jj'} = \alpha(g) \boxed{(U_g)_{jj'}}$$

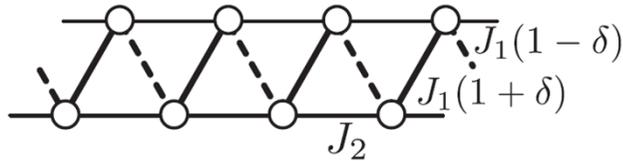
※ $|\alpha(g)| < 1$ の時 : 対称操作 g に対して MPS は不変でない

絶対値最大固有値に
対応する左固有ベクトル

- MPS の最適化 : iDMRG (McCulloch '08)

- 対称性に守られたトポロジカル (SPT) 相転移
- 行列積状態を利用したSPT相の区別
- 適用先
 - スピン $1/2$ フラストレート交替鎖
 - 基底状態相図
 - 異なるベクトルカイラルダイマー相間のSPT相転移
 - 臨界性の解析
- まとめと今後の展望

スピン1/2フラストレート交替鎖の概要



- $$\hat{\mathcal{H}} = J_1 \sum_i (1 - (-1)^i \delta) \times [\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + \Delta \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z]$$

$$+ J_2 \sum_i [\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+2}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+2}^y + \Delta \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+2}^z]$$

($J_1 < 0$, $J_2 > 0$, $|\delta| \ll 1$)

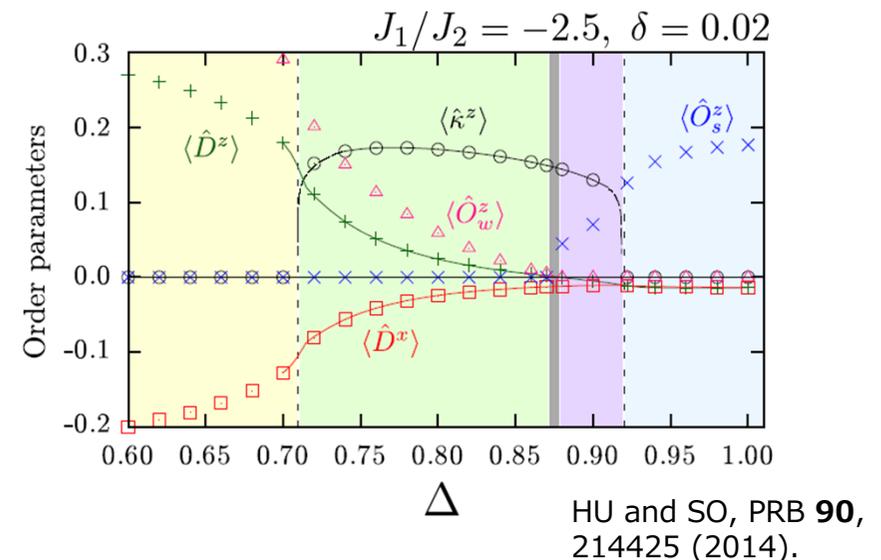
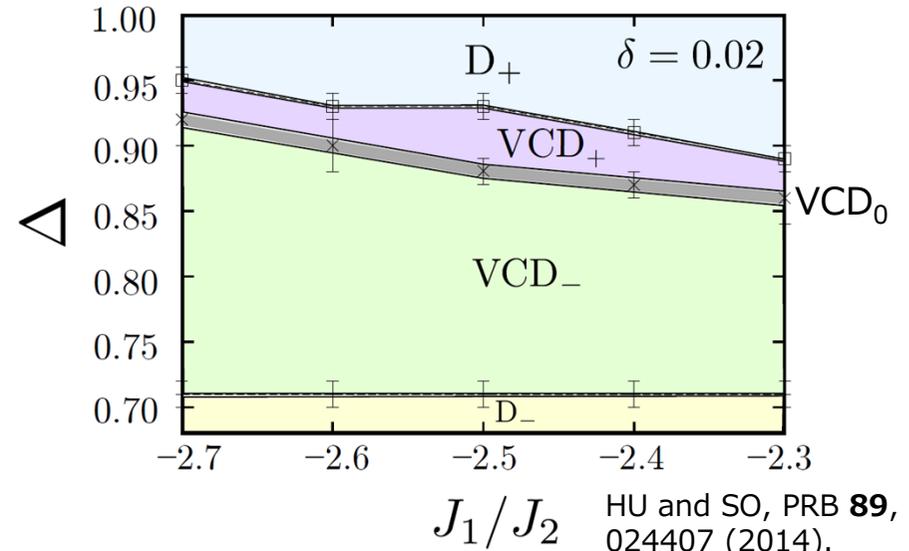
- D_{\pm} , VCD_{\pm} : スピンギャップ相
 VCD_0 : ギャップレス

- (局所的な) 秩序変数 :

$$\langle \hat{D}^\alpha \rangle = \frac{1}{N} \sum_i (-1)^{i-1} \langle \hat{S}_i^\alpha \hat{S}_{i+1}^\alpha \rangle$$

$$\langle \hat{k}^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{k}_{i+1/2}^z \rangle$$

with $\hat{k}_{i+1/2} = \hat{S}_i \times \hat{S}_{i+1}$

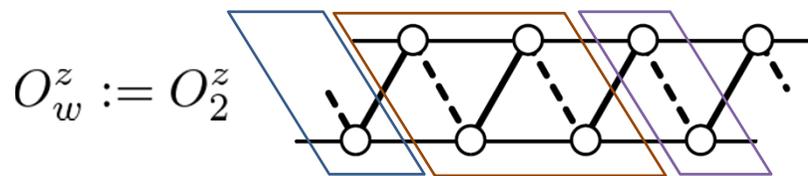
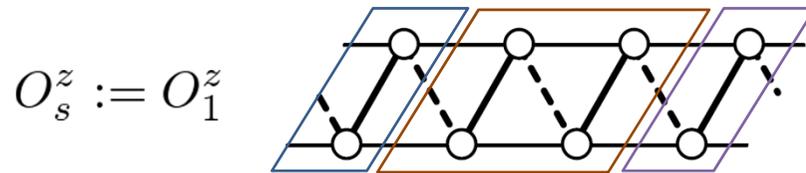


スピン1/2フラストレート交替鎖の概要

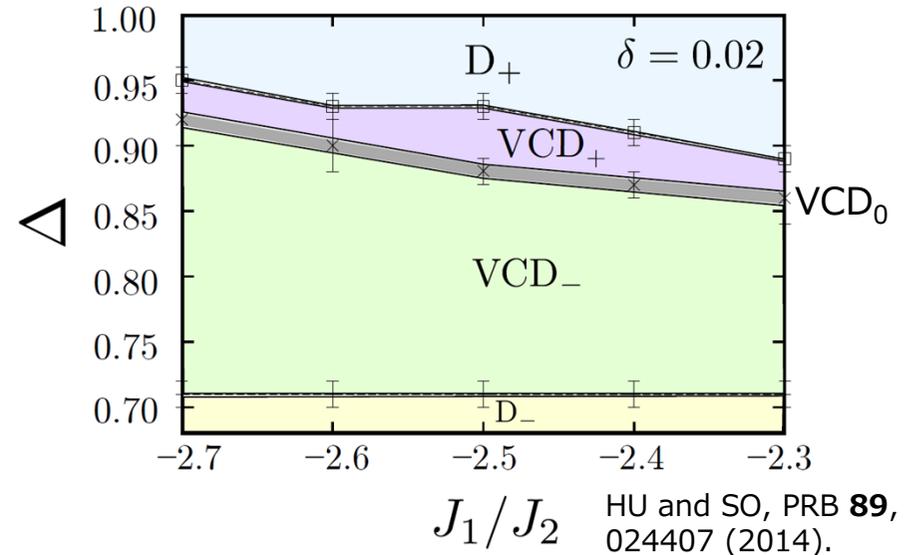
- スtring秩序変数

den Nijs and Rommelse, (1989).

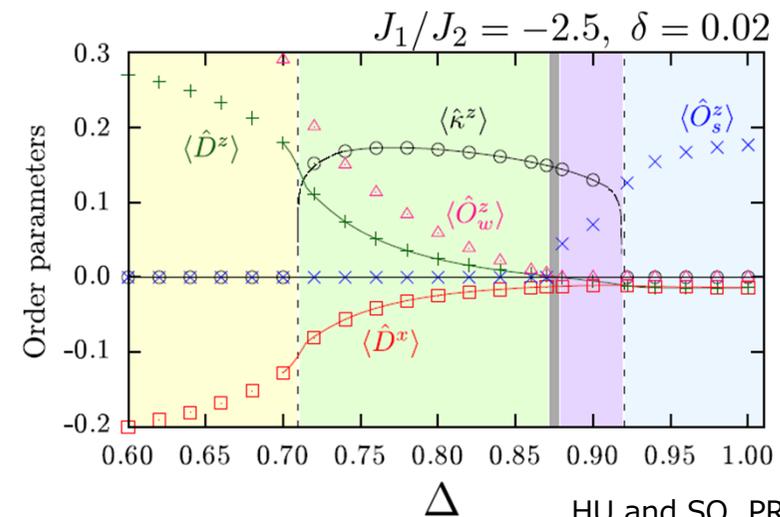
$$O_n^z = - \lim_{r \rightarrow \infty} \langle (\hat{S}_{2j+n}^z + \hat{S}_{2j+n+1}^z) \exp(i\pi \sum_{k=2j+n+2}^{2(j+r)+n-1} \hat{S}_k^z) \times (\hat{S}_{2(j+r)+n}^z + \hat{S}_{2(j+r)+n+1}^z) \rangle \quad (n = 1, 2).$$



- 自発的対称性の破れが伴わない相転移



HU and SO, PRB **89**, 024407 (2014).



HU and SO, PRB **90**, 214425 (2014).

本研究の目的



- Chenらによる1次元SPT相の分類手続に従って
 - D_{\pm} および VCD_{\pm} の相の分類
 - VCD_{\pm} 間のトポロジーの違いを守っている対称性の同定

A. 時間反転対称性

- VCD_{\pm} 間に現れるSPT相転移の臨界性の議論

A. セントラルチャージ $c=1$

計算結果

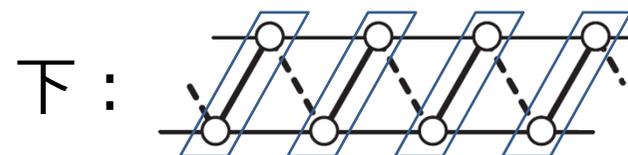
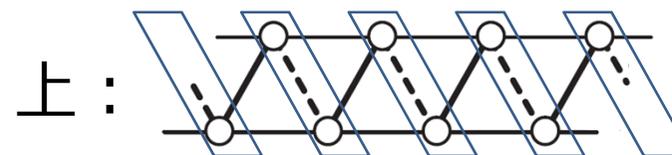


Phase	p	$\alpha(p)$	$\alpha(h)$		$\beta(p)$	$\beta(\Theta)$	$\gamma(p, h)$		$\gamma(\Theta, h)$		$\omega(R_{2x}, R_{2z})$
			R_{2x}	R_{2z}			R_{2x}	R_{2z}	R_{2x}	R_{2z}	
D_+	I	-1	+1	+1	± 1	± 1	± 1	± 1	± 1	± 1	± 1
D_-	I	+1	-1	+1	+1	∓ 1	+1	∓ 1	∓ 1	∓ 1	∓ 1
VCD_+	IR_{2x}	-1	0	+1	+1	± 1	0	+1	0	± 1	0
VCD_-	IR_{2x}	-1	0	+1	+1	∓ 1	0	+1	0	∓ 1	0

計算結果

Phase	p	$\alpha(p)$	$\alpha(h)$		$\beta(p)$	$\beta(h)$	$\gamma(p)$	$\gamma(h)$	$\delta(p)$	$\delta(h)$	$\epsilon(p)$	$\epsilon(h)$
			R_{2x}	R_{2z}								
D_+	I	-1	+1	+1	± 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 1	± 1	0	0
D_-	I	+1	-1	+1	+1	∓ 1	∓ 1	± 1	± 1	∓ 1	∓ 1	0
VCD_+	IR_{2x}	-1	0	+1	+1	± 1	0	+1	0	± 1	0	0
VCD_-	IR_{2x}	-1	0	+1	+1	∓ 1	0	+1	0	∓ 1	0	0

● ユニットセルの取り方で値が異なる

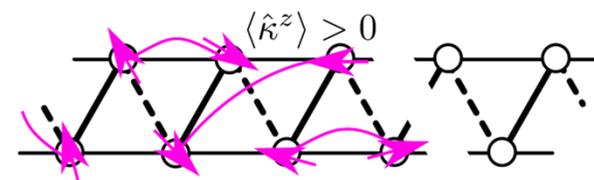


計算結果

Phase	p	$\alpha(p)$	$\alpha(h)$		$\beta(p)$	$\beta(h)$	γ	δ	ϵ	ζ	η	θ
			R_{2x}	R_{2z}								
D_+	I	-1	$+1$	$+1$	± 1	∓ 1	0	$+1$	0	± 1	0	0
D_-	I	$+1$	-1	$+1$	$+1$	∓ 1	0	$+1$	0	∓ 1	0	0
VCD_+	IR_{2x}	-1	0	$+1$	$+1$	± 1	0	$+1$	0	± 1	0	0
VCD_-	IR_{2x}	-1	0	$+1$	$+1$	∓ 1	0	$+1$	0	∓ 1	0	0

● その対称操作に対して不変でない

VCD₊相の基底状態の模式図



x軸周りの2回回転操作: カイラリティが逆 ($\langle \hat{k}^z \rangle < 0$) の基底状態に変換される.

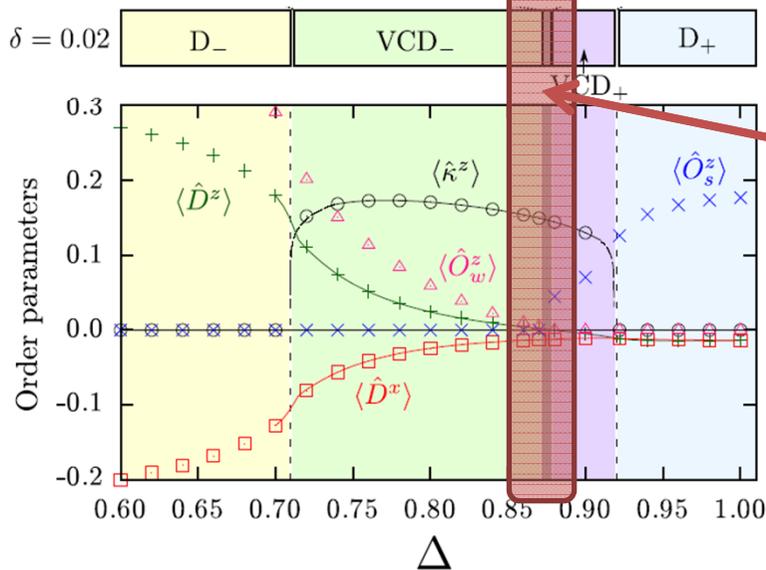
計算結果



Phase	p	$\alpha(p)$	$\alpha(h)$		$\beta(p)$	$\beta(\Theta)$	$\gamma(p, h)$		$\gamma(\Theta, h)$		$\omega(R_{2x}, R_{2z})$
			R_{2x}	R_{2z}			R_{2x}	R_{2z}	R_{2x}	R_{2z}	
D_+	I	-1	+1	+1	± 1	± 1	± 1	± 1	± 1	± 1	± 1
D_-	I	+1	-1	+1	+1	∓ 1	+1	∓ 1	∓ 1	∓ 1	∓ 1
VCD_+	IR_{2x}	-1	0	+1	+1	± 1	0	+1	0	± 1	0
VCD_-	IR_{2x}	-1	0	+1	+1	∓ 1	0	+1	0	∓ 1	0

時間反転対称性で守られるSPT相転移

計算結果



有限の磁場下で
時間反転対称性が破れた
相が現れる。

$$\beta(\Theta) = 0$$

$$\omega(R_{2x}, R_{2z})$$

$$\pm 1$$

$$\mp 1$$

VCD ₊	IR_{2x}	-1	0	+1	+1	± 1	0	+1	0	± 1	0
VCD ₋	IR_{2x}	-1	0	+1	+1	∓ 1	0	+1	0	∓ 1	0

時間反転対称性で守られるSPT相転移

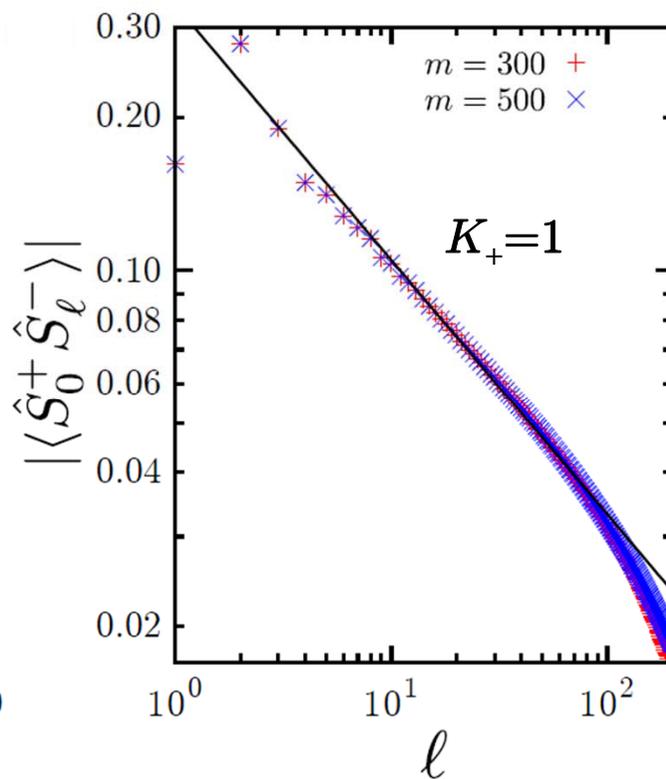
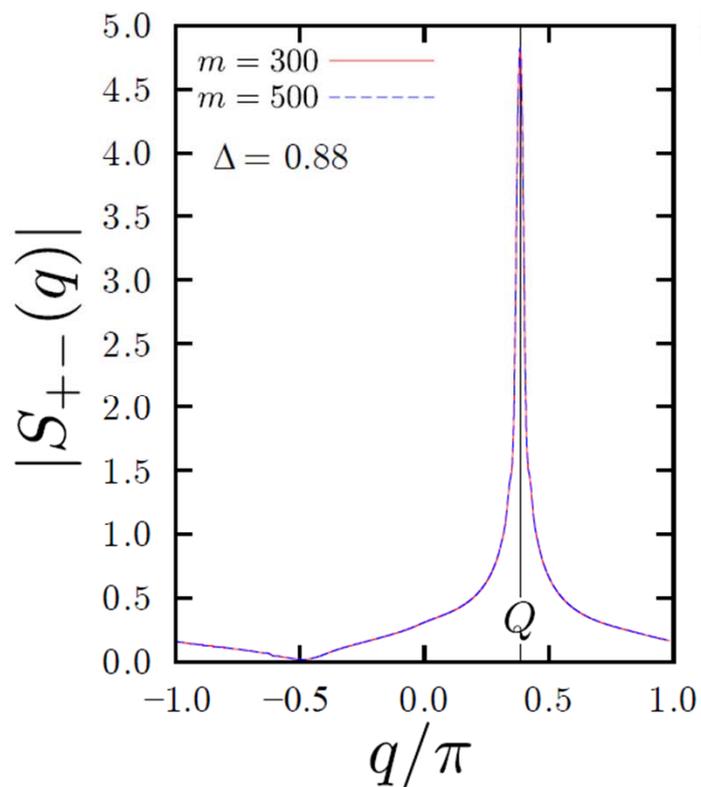
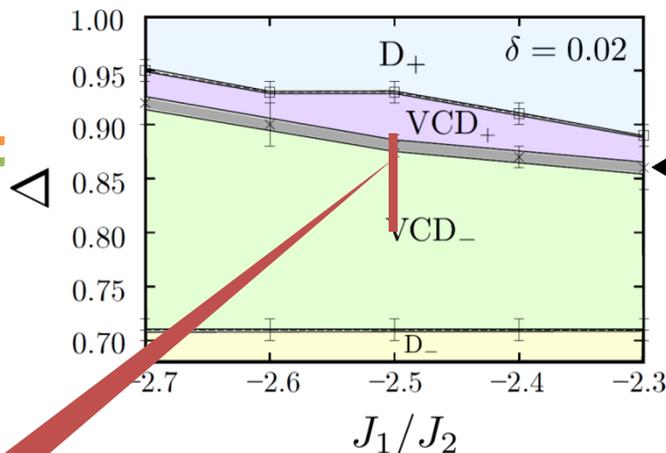
計算結果



- 相関関数

$$\langle \hat{S}_0^x \hat{S}_\ell^x \rangle \simeq A e^{iQ\ell} |\ell|^{-1/(2K_+)}$$

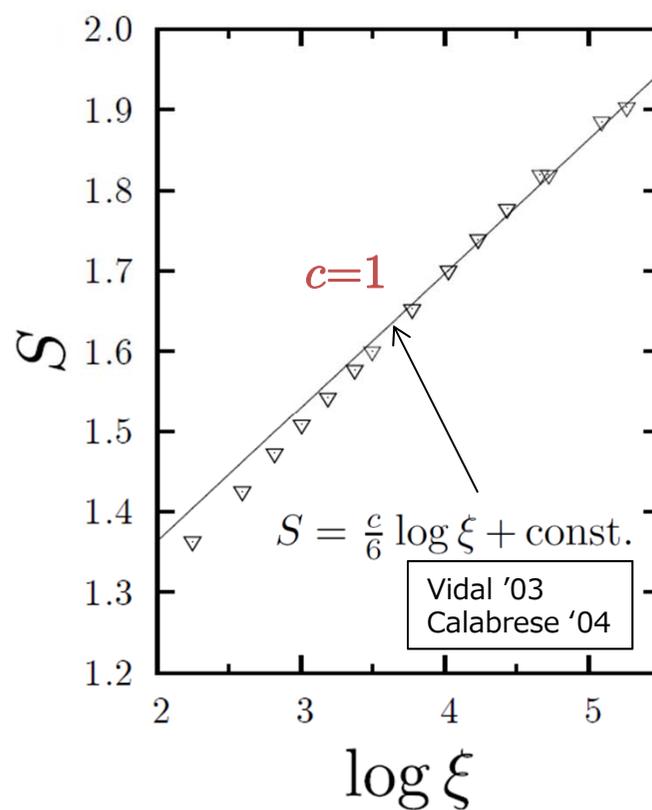
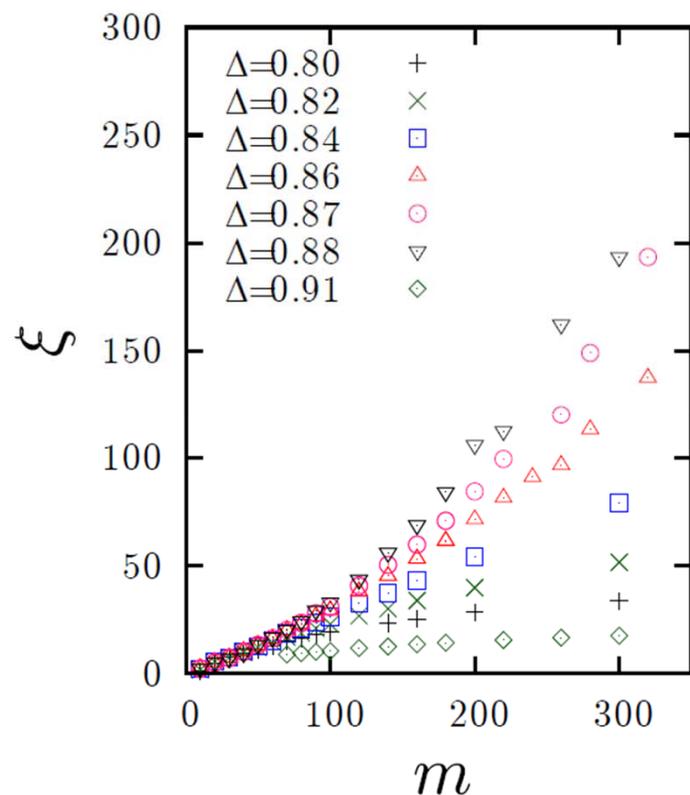
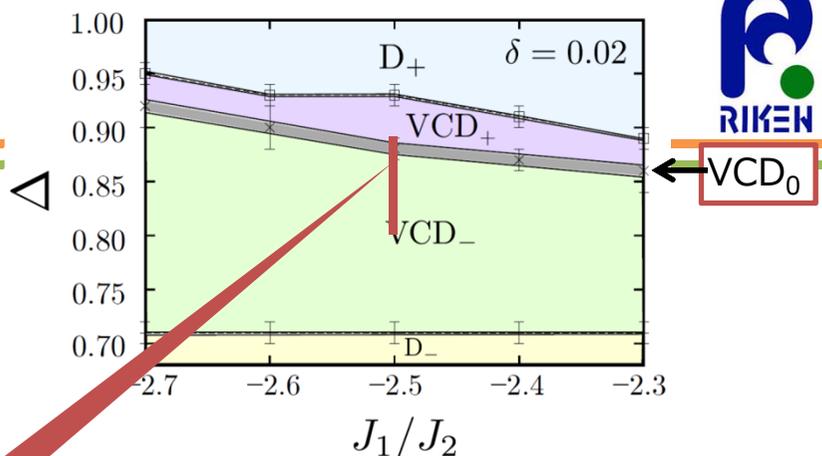
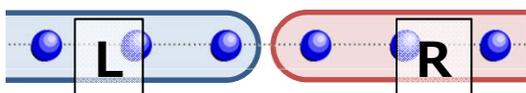
HU and SO, PRB **89**,
024407 (2014).



計算結果

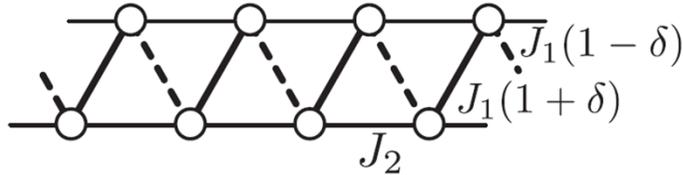
- エンタングルメントエントロピー

$$S = \text{Tr}[-\hat{\rho} \log \hat{\rho}], \quad \hat{\rho} = \text{Tr}_L |\Psi\rangle\langle\Psi|$$



まとめ

$J_1/J_2 = -2.5, m=300$

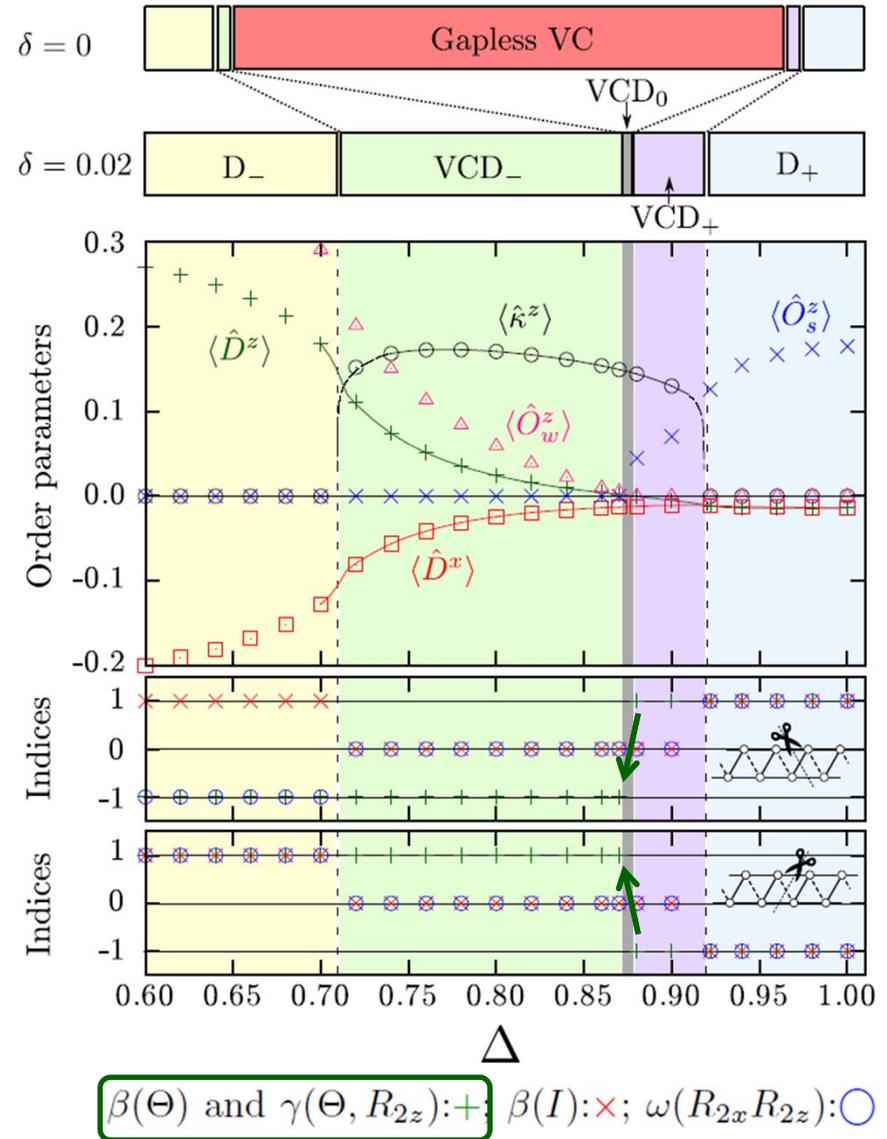


- $$\hat{\mathcal{H}} = J_1 \sum_i (1 - (-1)^i \delta) \times [\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + \Delta \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z]$$

$$+ J_2 \sum_i [\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+2}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+2}^y + \Delta \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+2}^z]$$

($J_1 < 0, J_2 > 0, |\delta| \ll 1$)

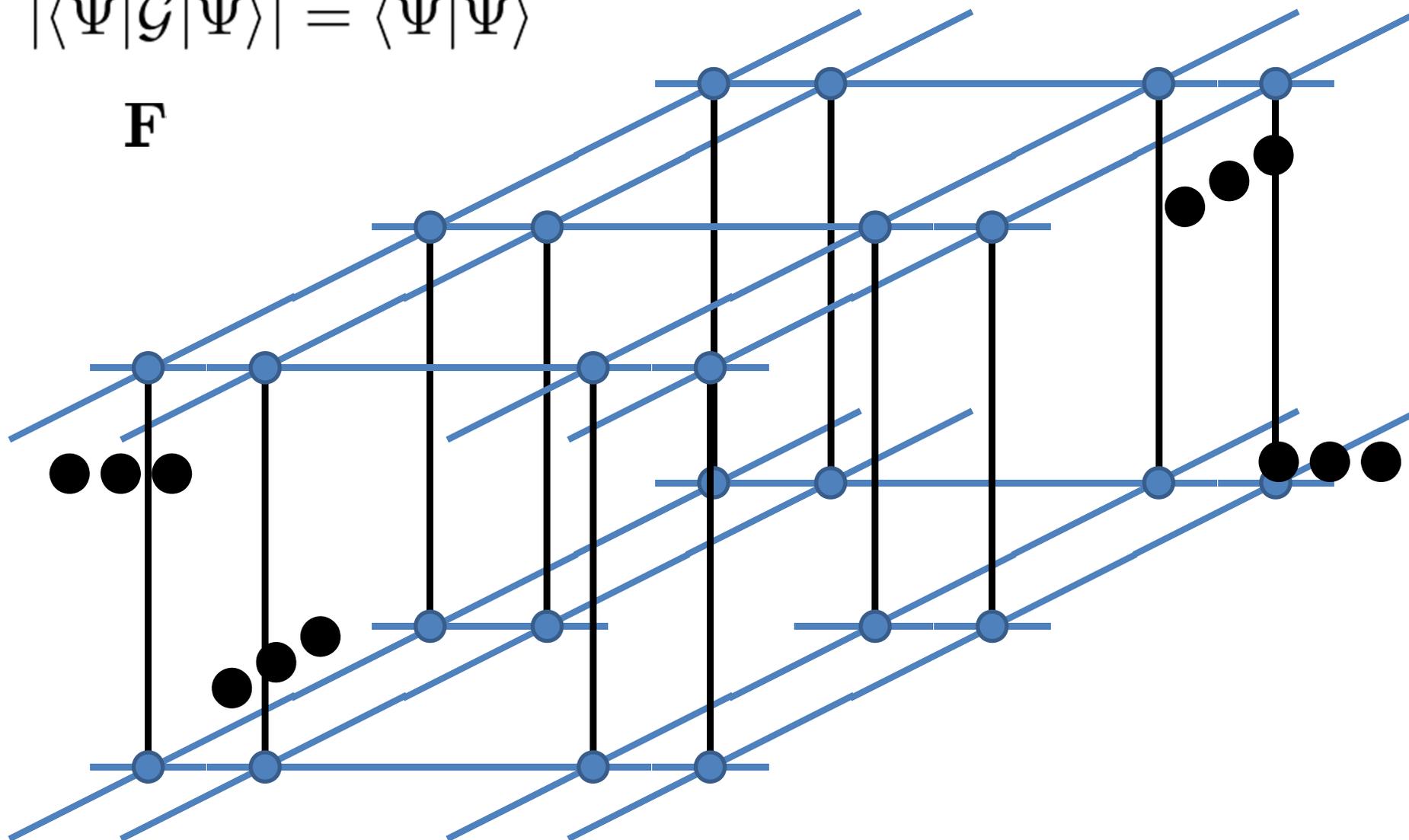
- VCD_±間の相転移**
 - 時間反転対称性
によって守られる
 - 臨界性: $c=1$



iPEPSの場合

$$|\langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle| = \langle \Psi | \Psi \rangle$$

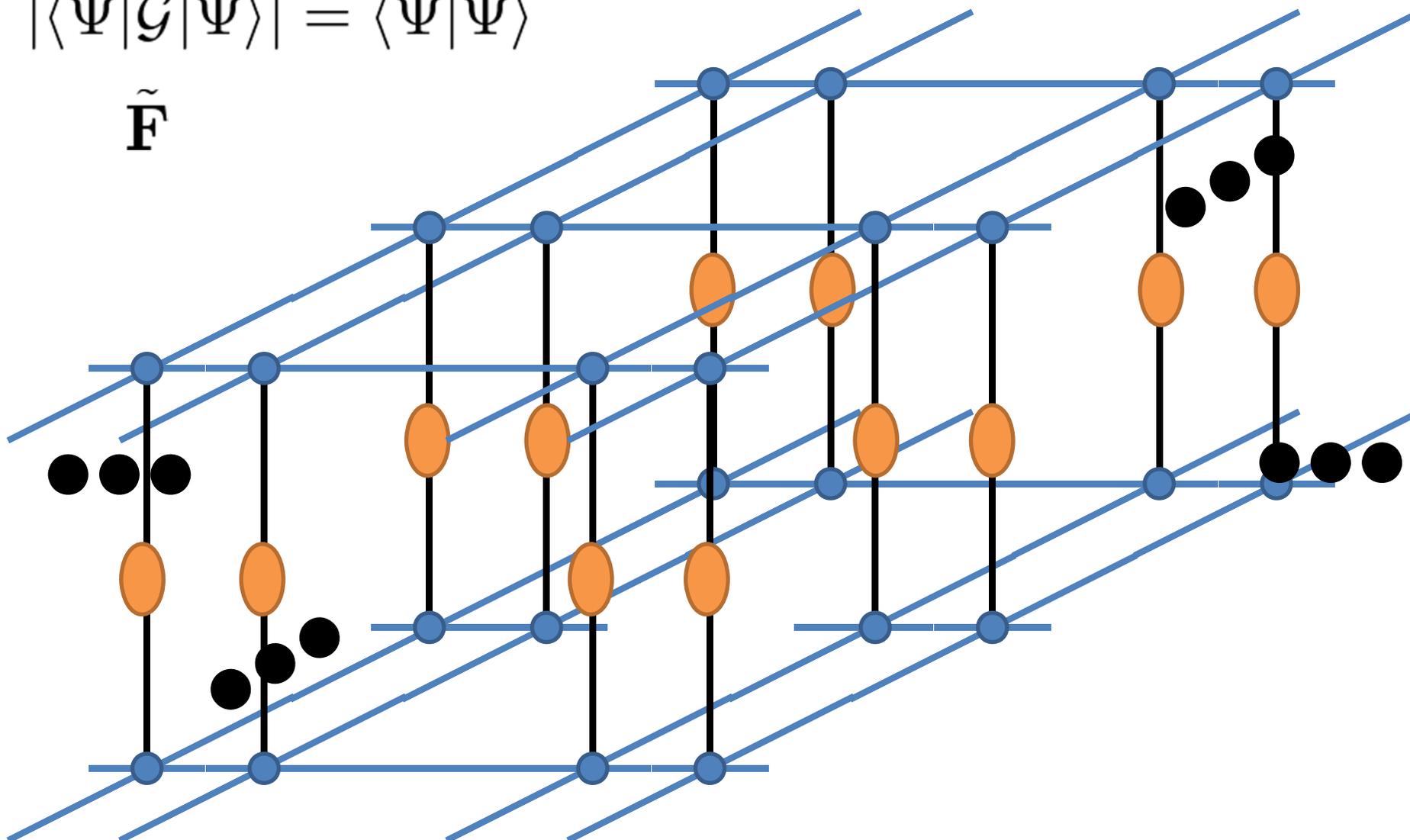
F



iPEPSの場合

$$|\langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle| = \langle \Psi | \Psi \rangle$$

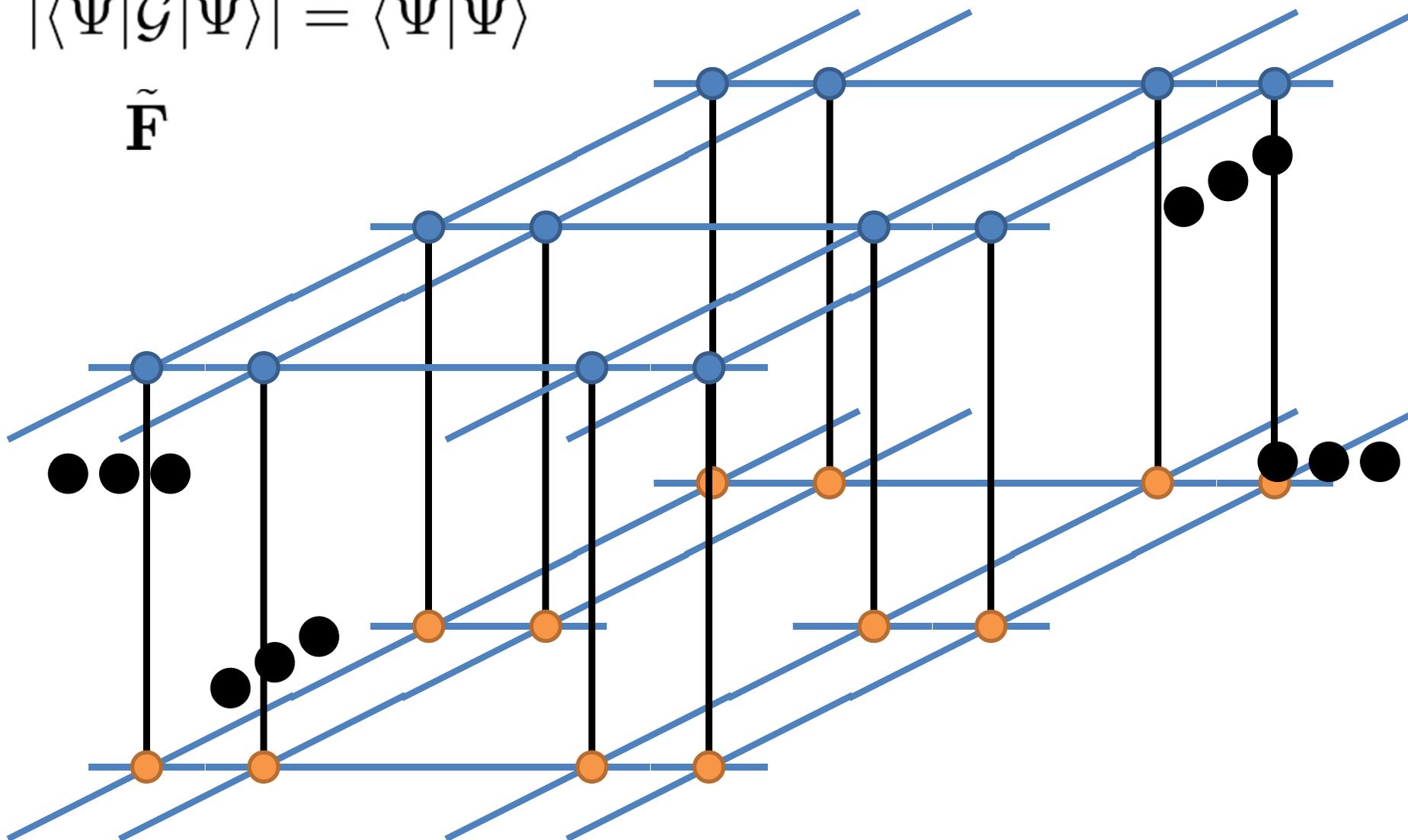
\tilde{F}



iPEPSの場合

$$|\langle \Psi | \hat{\mathcal{G}} | \Psi \rangle| = \langle \Psi | \Psi \rangle$$

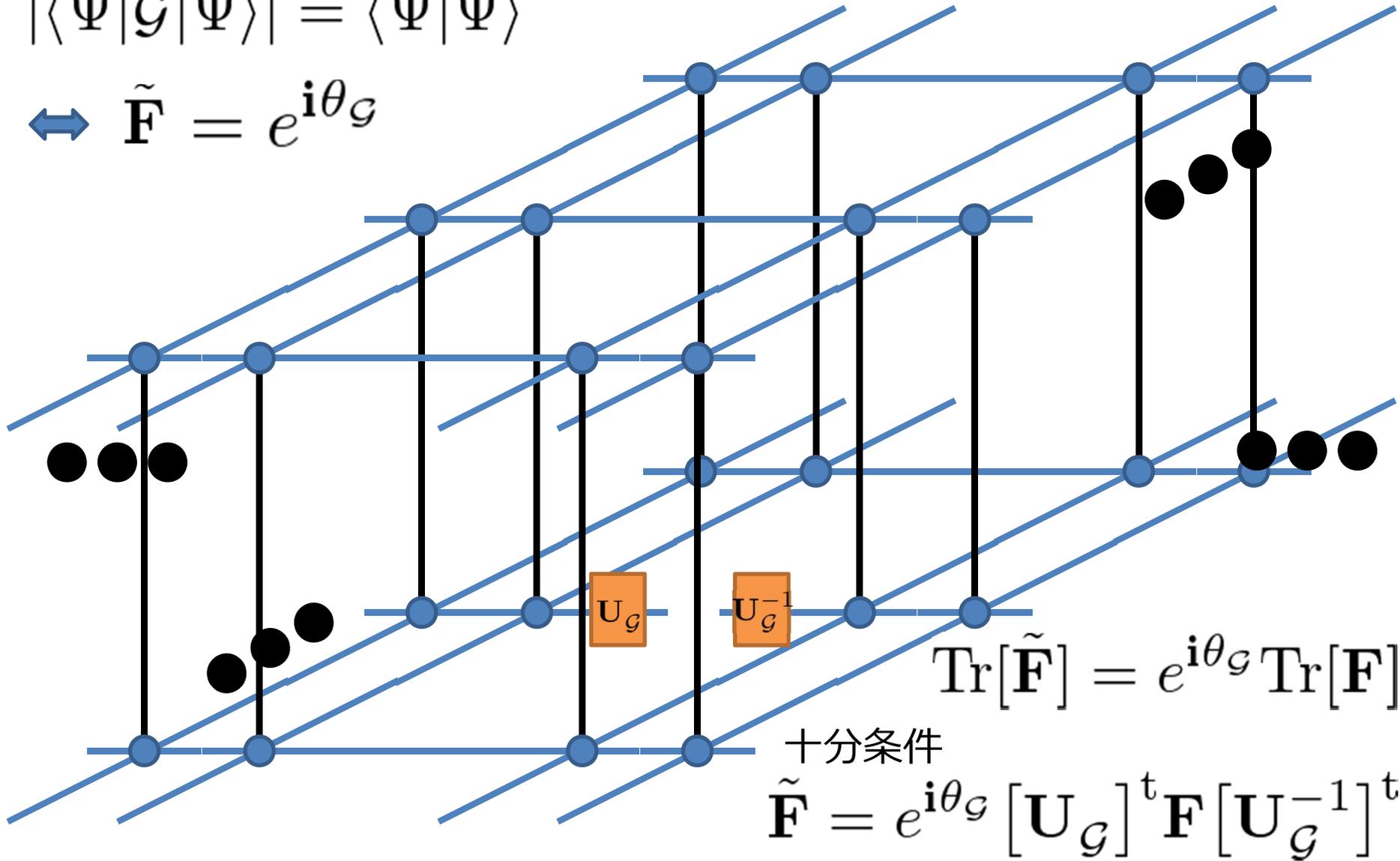
\tilde{F}



iPEPSの場合

$$|\langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle| = \langle \Psi | \Psi \rangle$$

$$\Leftrightarrow \tilde{\mathbf{F}} = e^{i\theta_G}$$



iPEPSの場合

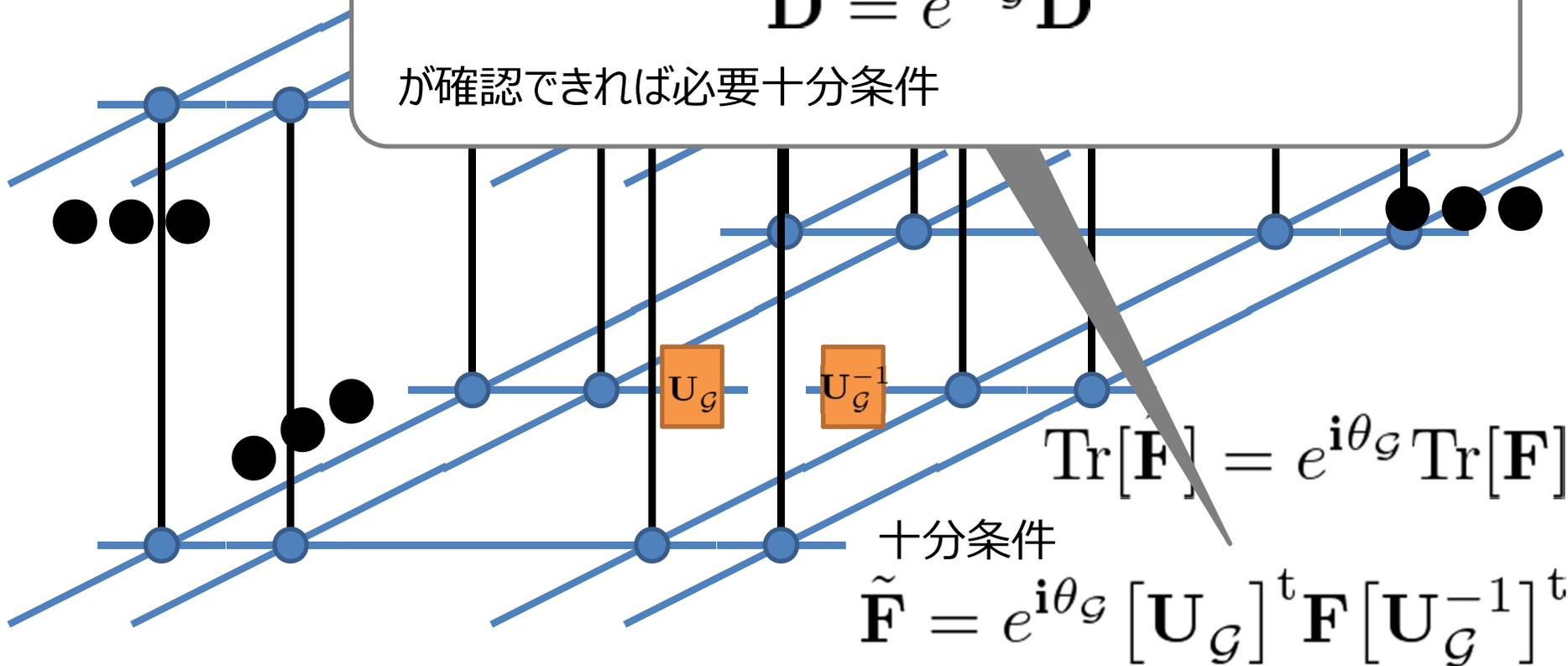
$$|\langle \Psi | \hat{\mathcal{G}} | \Psi \rangle| = \mathbf{D} = \mathbf{X}^{-1} \mathbf{F} \mathbf{X}, \quad \mathbf{D} = \text{diag}(d_1, d_2, \dots)$$

$$\leftrightarrow \tilde{\mathbf{F}} = e^{i\theta_{\mathcal{G}}} \tilde{\mathbf{D}} = \mathbf{Y}^{-1} \tilde{\mathbf{F}} \mathbf{Y}, \quad \tilde{\mathbf{D}} = \text{diag}(\tilde{d}_1, \tilde{d}_2, \dots)$$

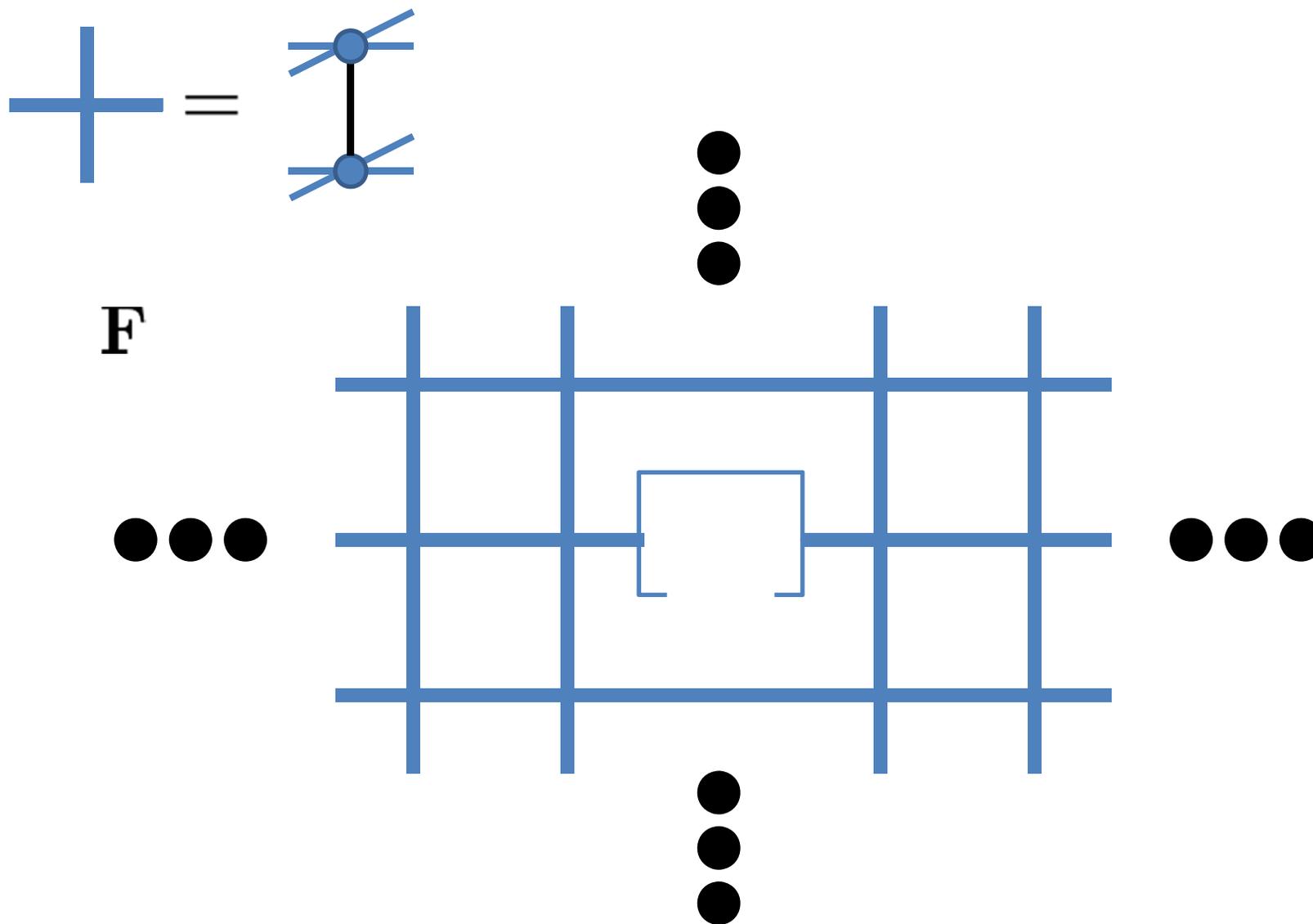
と共に対角化でき、かつ

$$\tilde{\mathbf{D}} = e^{i\theta_{\mathcal{G}}} \mathbf{D}$$

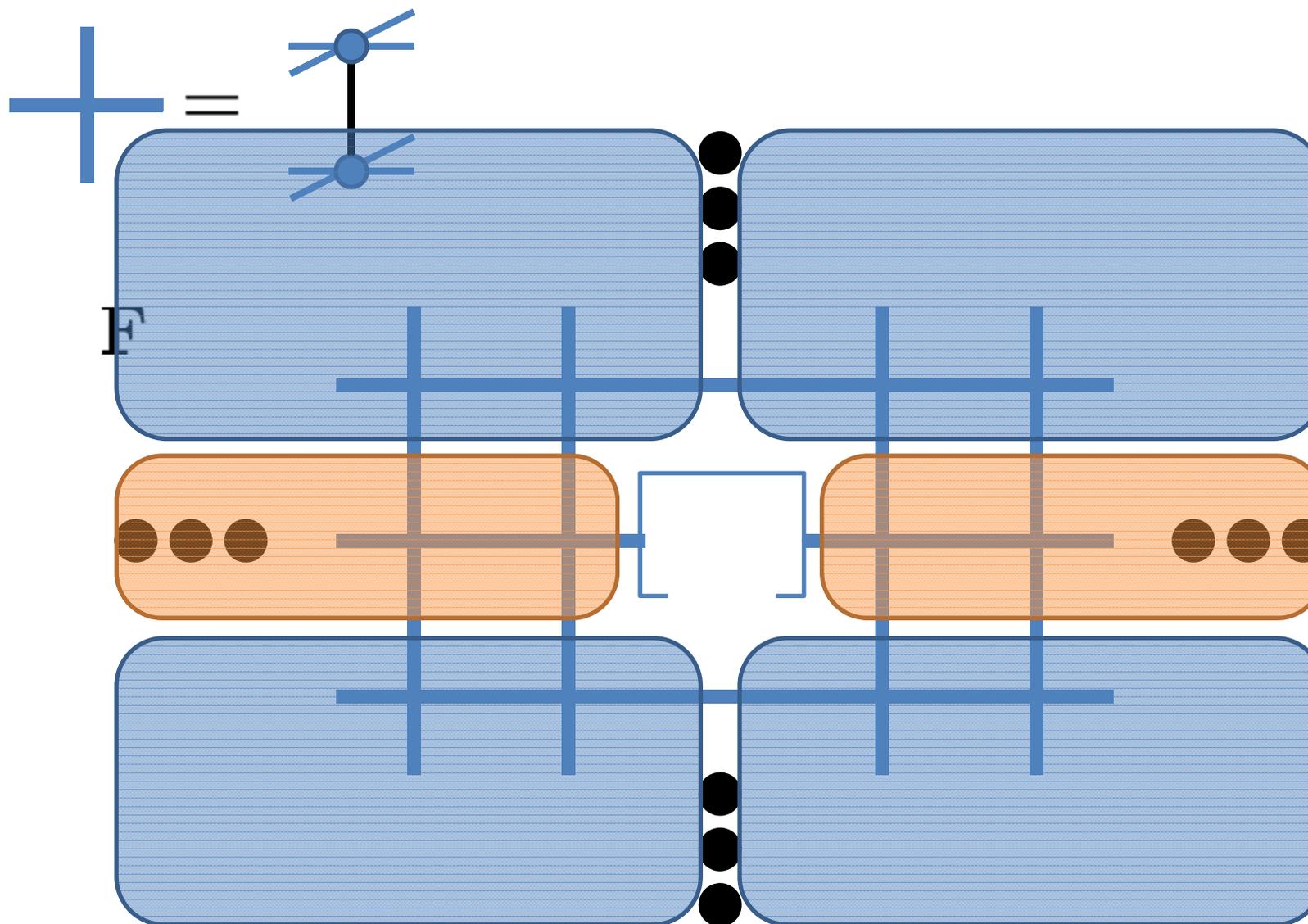
が確認できれば必要十分条件



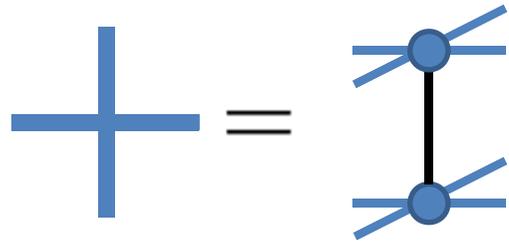
CTMRGによる評価



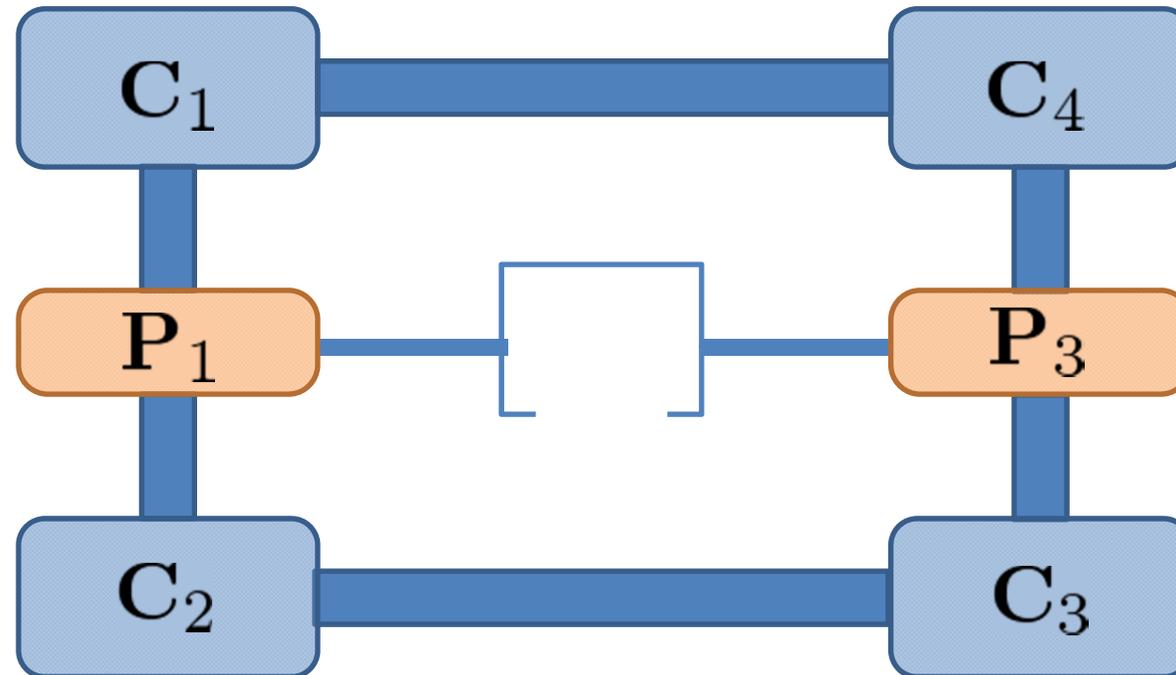
CTMRGによる評価



CTMRGによる評価



F



CTMRGによる評価

