非エルミートハバード模型の量子モンテカルロ計算

早田智也
慶應義塾大学

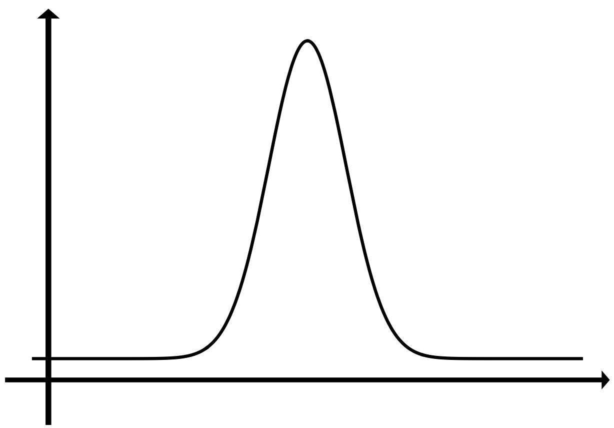
非エルミート系
量子相転移: TH-Yamamoto, arXiv:2106.06192 [cond-mat.str-el]
時間発展: TH-Hidaka-Yamamoto, arXiv:2111.03893 [cond-mat.quant-gas]
開放系
時間発展: TH-Hidaka-Yamamoto, arXiv:2111.04937 [hep-lat]

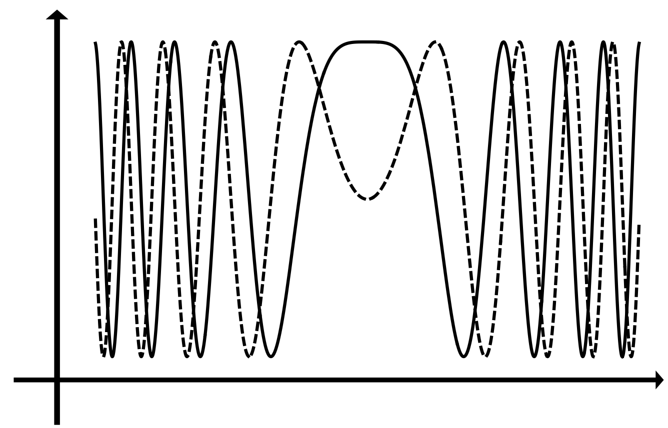
実時間モンテカルロは難しい

○ よくある説明

$$Z = \int dx\, e^{-x^2}$$

$$Z = \int dx\, e^{ix^2}$$





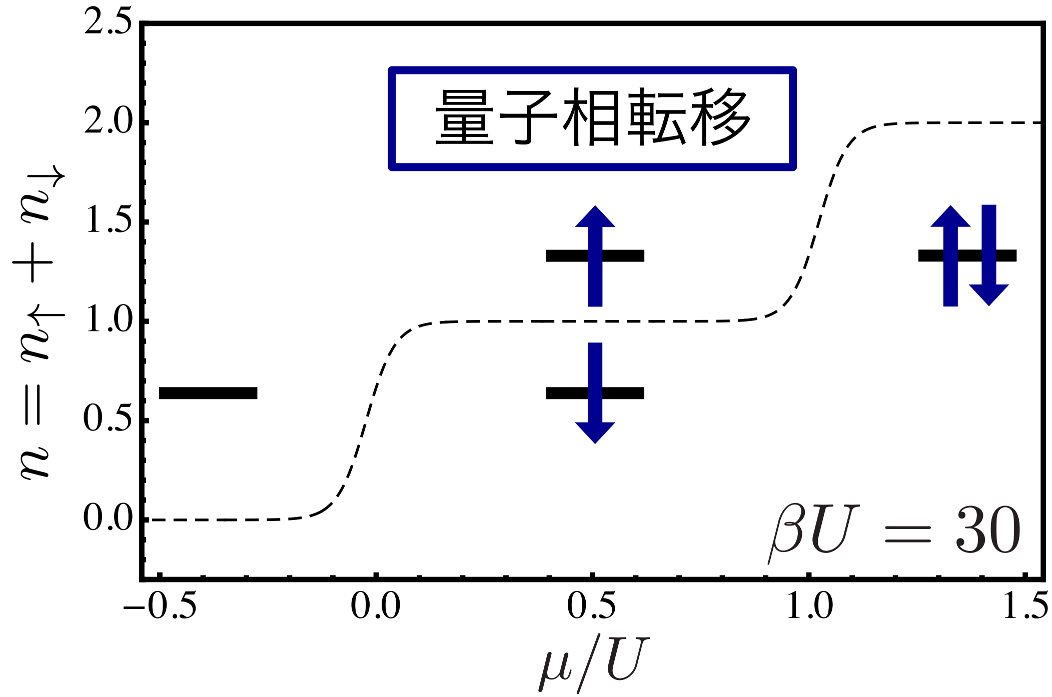
- 実時間問題は振動積分だから重点サンプリングできない

そもそも虚時間モンテカルロも難しい

○ 1サイトハバード模型

TH, Y. Hiadaka, Y. Tanizaki, Nucl. Phys. B911 (2016) 94-105 [arXiv:1511.02437 [hep-lat]]
Y. Tanizaki, Y. Hiadaka, TH, New J. Phys. 18 (2016) 033002 [arXiv:1509.07146 [hep-th]]

$$H = U n_\uparrow n_\downarrow - \mu \left(n_\uparrow + n_\downarrow \right)$$



• 符号問題のミニマル模型

そもそも虚時間モンテカルロも難しい

○ 1サイトハバード模型

TH, Y. Hiadaka, Y. Tanizaki, Nucl. Phys. B911 (2016) 94-105 [arXiv:1511.02437 [hep-lat]]
Y. Tanizaki, Y. Hiadaka, TH, New J. Phys. 18 (2016) 033002 [arXiv:1509.07146 [hep-th]]

$$Z = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi U}} \int \mathrm{d}\varphi \left(1 + \mathrm{e}^{\beta(\mathrm{i}\varphi + \mu + U/2)}\right)^2 \mathrm{e}^{-\beta\varphi^2/2U}$$

- フェルミオンは虚時間でも振動積分である
- 位相の干渉が量子相転移の起源

そもそも虚時間モンテカルロも難しい

○ 1サイトハバード模型

TH, Y. Hiadaka, Y. Tanizaki, Nucl. Phys. B911 (2016) 94-105 [arXiv:1511.02437 [hep-lat]]
Y. Tanizaki, Y. Hiadaka, TH, New J. Phys. 18 (2016) 033002 [arXiv:1509.07146 [hep-th]]

$$Z = \sqrt{\frac{8\beta}{\pi U}} \int \mathrm{d}\tilde{\varphi} \left(\cos \frac{\beta \tilde{\varphi}}{2} \right)^2 \mathrm{e}^{-\beta\left(\tilde{\varphi}^2 - U^2\right)/2U}$$

- フェルミオンは虚時間でも振動積分である
- 特別な場合には符号問題がない

e.g., half-filling, isospin chemical potential

まとめ

- フェルミオンは基本的に振動積分である
- 特別な場合には符号問題がない

振動がペアで起きる
=
アイソスピン化学ポテンシャル
（クラマース縮退）

まとめ

- フェルミオンは基本的に振動積分である
- 特別な場合には符号問題がない

アイソスピン化学ポテンシャルに対応する実時間問題は？

- Schwinger-Keldysh 経路積分 → 行きと帰りが複素共役
- 非エルミート量子系→ スピンの時間発展が複素共役

非エルミートハバード模型

TH-Hidaka-Yamamoto, arXiv:2111.03893 [cond-mat.quant-gas]

$$H_{\text{eff}} =$$

$$-w \sum_{\boldsymbol{r},j,\sigma} \left[c^\dagger_{\boldsymbol{r}\sigma} c_{\boldsymbol{r}+\hat{j}\,\sigma} + c^\dagger_{\boldsymbol{r}+\hat{j}\,\sigma} c_{\boldsymbol{r}\sigma} \right] - i\gamma \sum_{\boldsymbol{r}} c^\dagger_{\boldsymbol{r}\uparrow} c^\dagger_{\boldsymbol{r}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}\uparrow}$$

- 正方格子
- 相互作用のない格子ハミルトニアン
- 二体粒子衝突ロス　$\Gamma_{\boldsymbol{r}} = c_{\boldsymbol{r}\uparrow} c_{\boldsymbol{r}\downarrow}$

$$\boxed{\text{時間発展を考える}\ e^{-iH_{\text{eff}}t}}$$

非エルミートハバード模型

TH-Hidaka-Yamamoto, arXiv:2111.03893 [cond-mat.quant-gas]

$$-iH_{\mathrm{eff}} = -iH_{\uparrow} - iH_{\downarrow} - \sum_{\boldsymbol{r}} \frac{1}{2\gamma} \varphi_{\boldsymbol{r}}^2$$

$$H_{\uparrow} = -\sum_{\boldsymbol{r},i} w c^{\dagger}_{\boldsymbol{r}\uparrow} c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i\uparrow} + w c^{\dagger}_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i\uparrow} c_{\boldsymbol{r}\uparrow} + \varphi_{\boldsymbol{r}} c^{\dagger}_{\boldsymbol{r}\uparrow} c_{\boldsymbol{r}\uparrow}$$

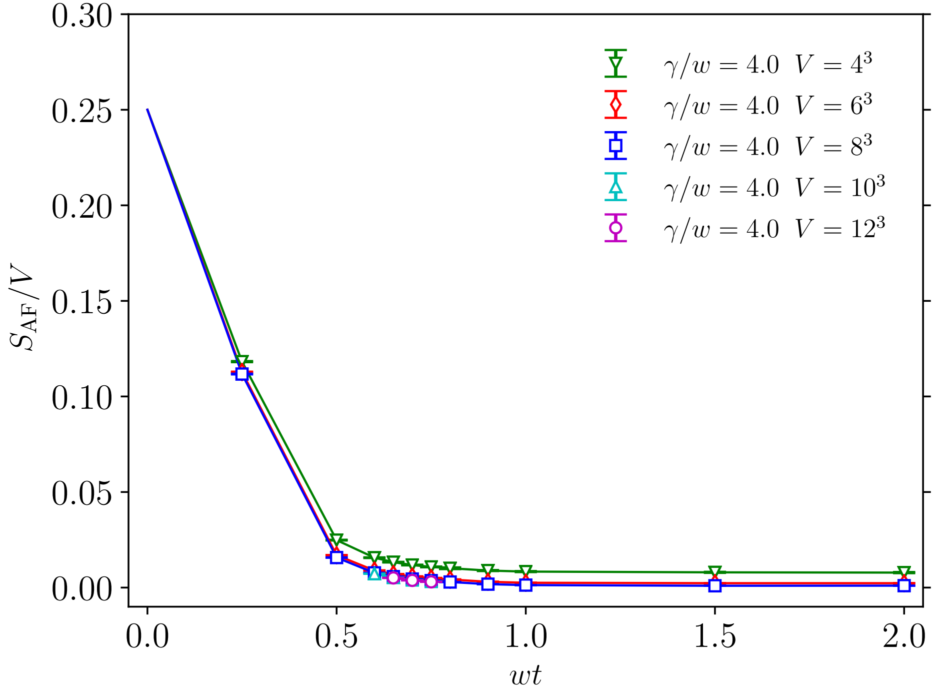
$$H_{\downarrow} = \sum_{\boldsymbol{r},i} w c^{\dagger}_{\boldsymbol{r}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i\downarrow} + w c^{\dagger}_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i\downarrow} c_{\boldsymbol{r}\downarrow} + \varphi_{\boldsymbol{r}} c^{\dagger}_{\boldsymbol{r}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}\downarrow}$$

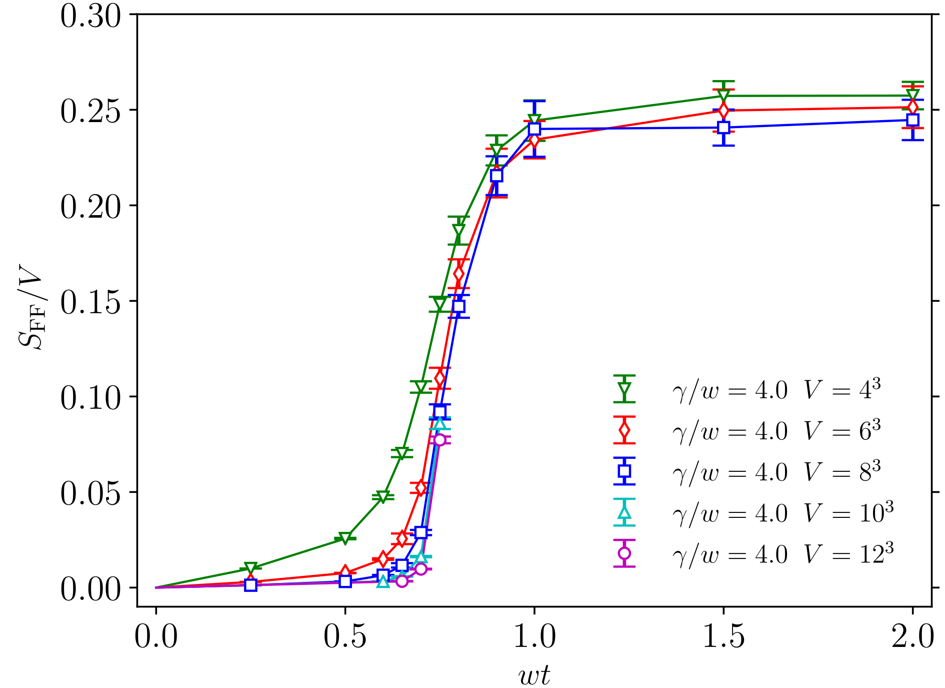
スピン入れ換え=複素共役

- ハバード-ストラトノビッチ変換 + 粒子正孔変換
- 符号問題がない

スピン構造因子（モンテカルロ）

$$\frac{S_{\mathrm{AF}}}{V} = \left\langle \left[\frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{r}} (-)^{x+y+z} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{r}} \right]^2 \right\rangle \qquad \frac{S_{\mathrm{FF}}}{V} = \left\langle \left[\frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{r}} \right]^2 \right\rangle$$

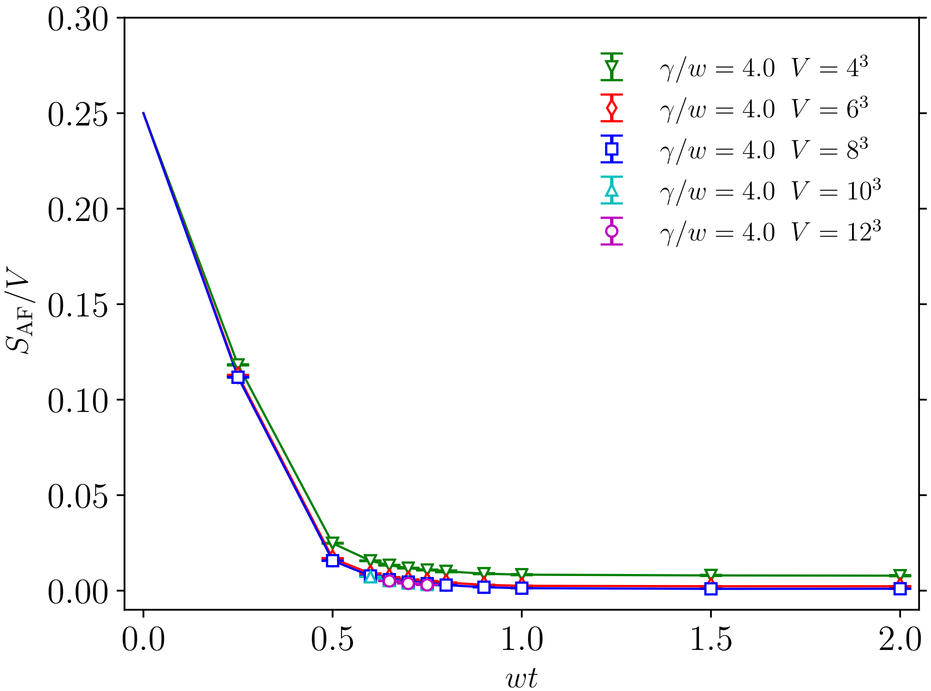


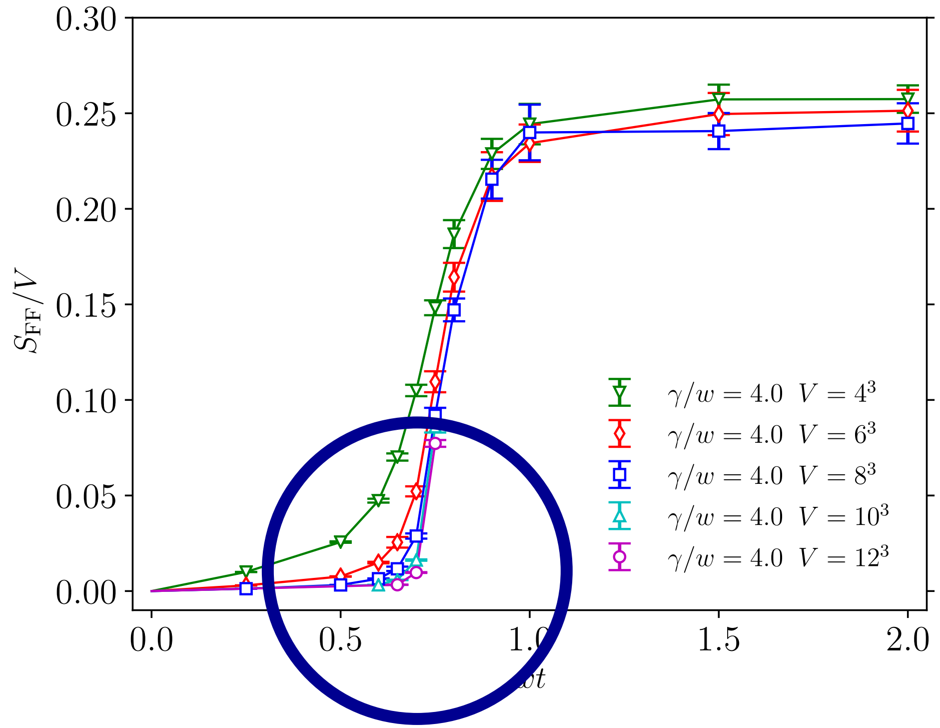


- 初期状態はNeel状態

スピン構造因子（モンテカルロ）

$$\frac{S_{\mathrm{AF}}}{V} = \left\langle \left[\frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{r}} (-)^{x+y+z} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{r}} \right]^2 \right\rangle \qquad \frac{S_{\mathrm{FF}}}{V} = \left\langle \left[\frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{r}} \right]^2 \right\rangle$$

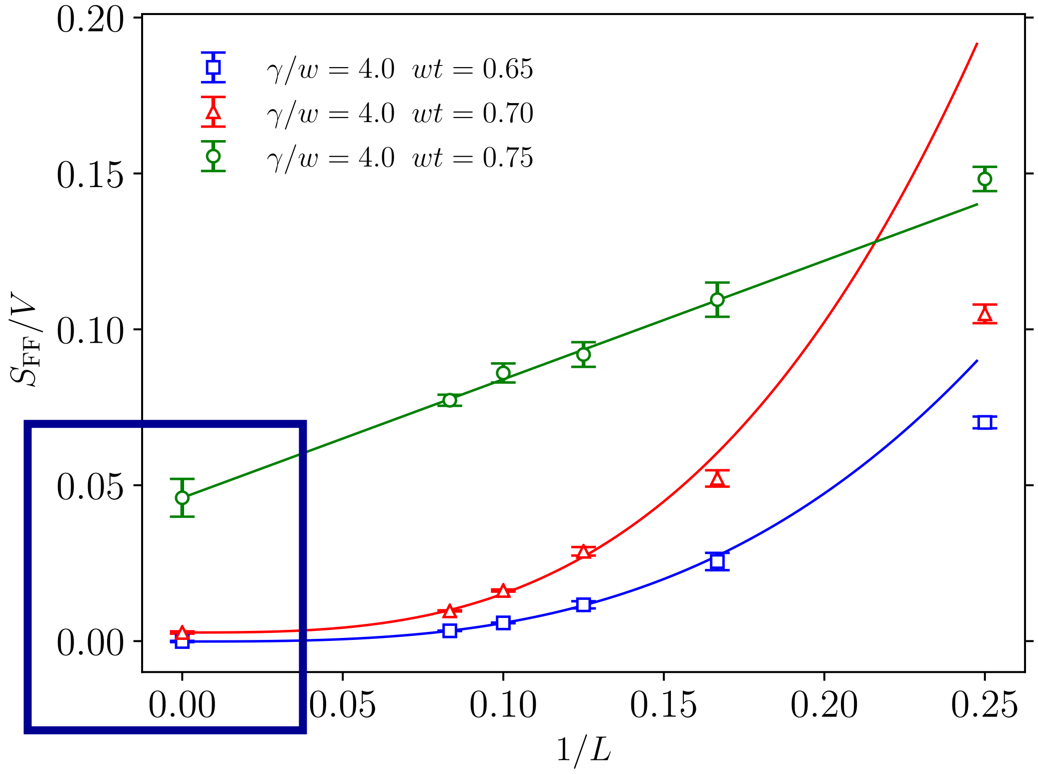




- 時間発展に伴う自発的な対称性の破れ

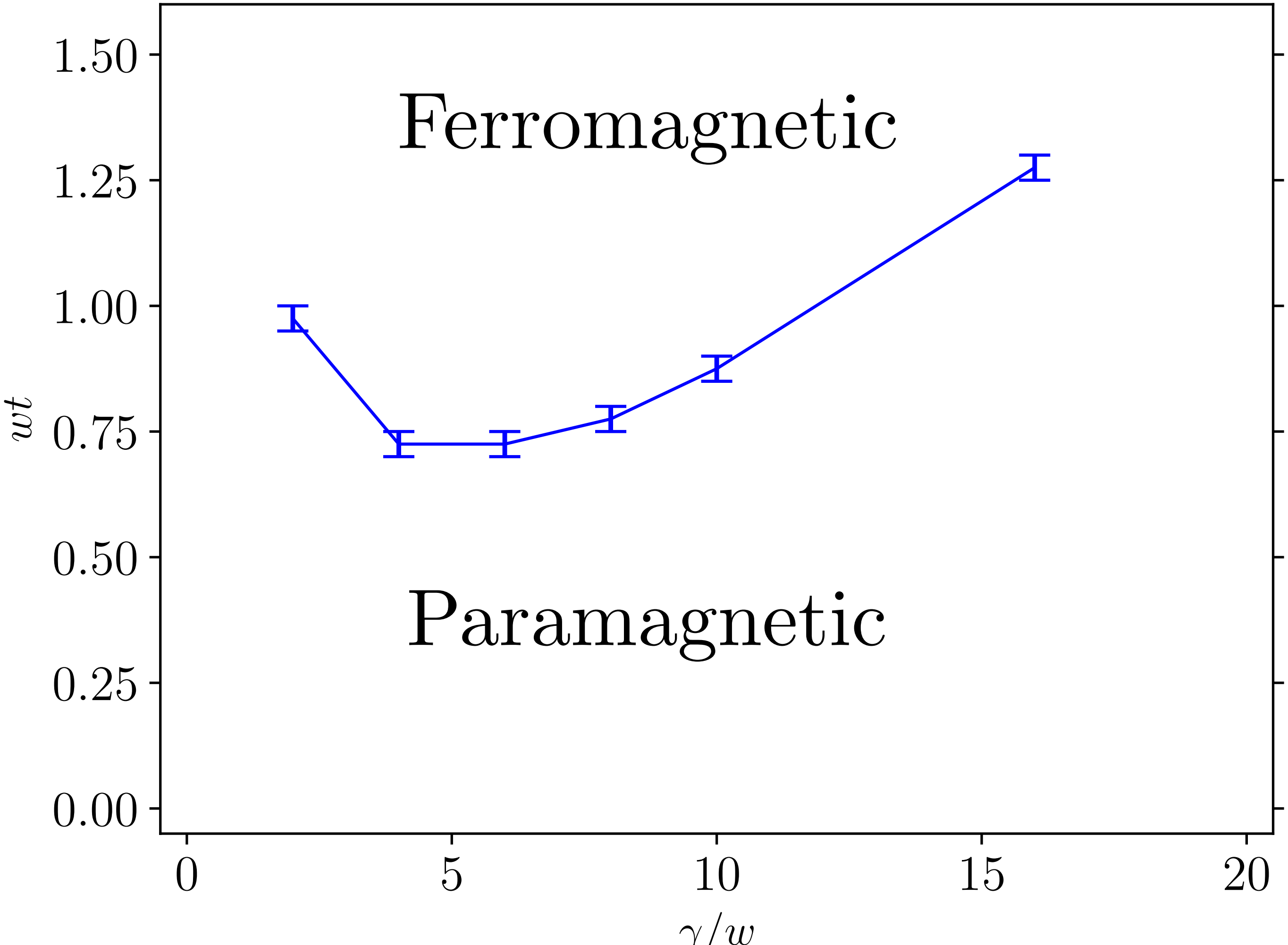
臨界時間

$$\frac{S_{\mathrm{FF}}}{V} = \left\langle \left[\frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{r}} \right]^2 \right\rangle$$



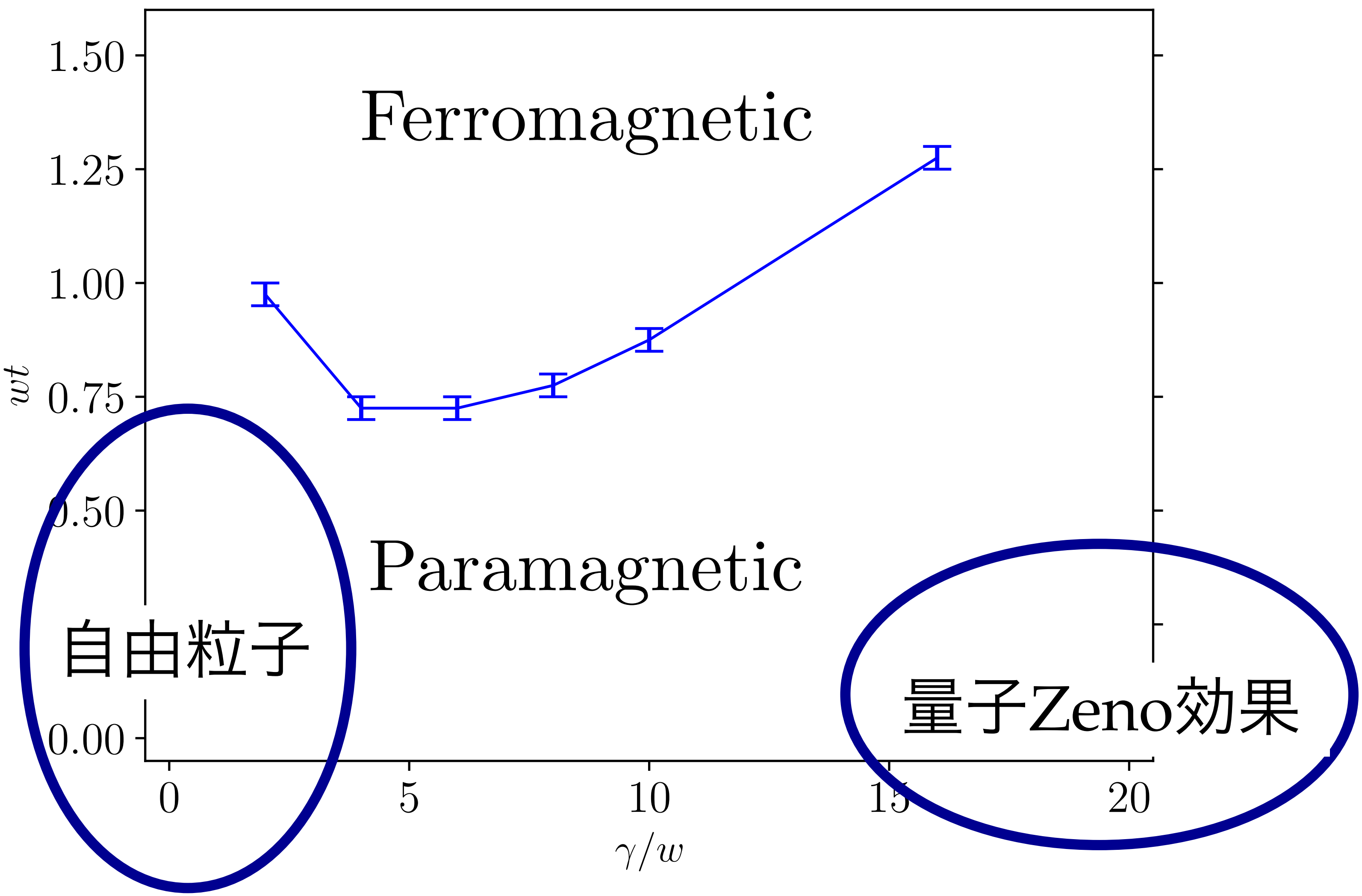
- 有限サイズスケーリング　$V = 6^3,\ 8^3,\ 10^3,\ 12^3$

相図



- $\gamma \sim 5w$で最も早く相転移する

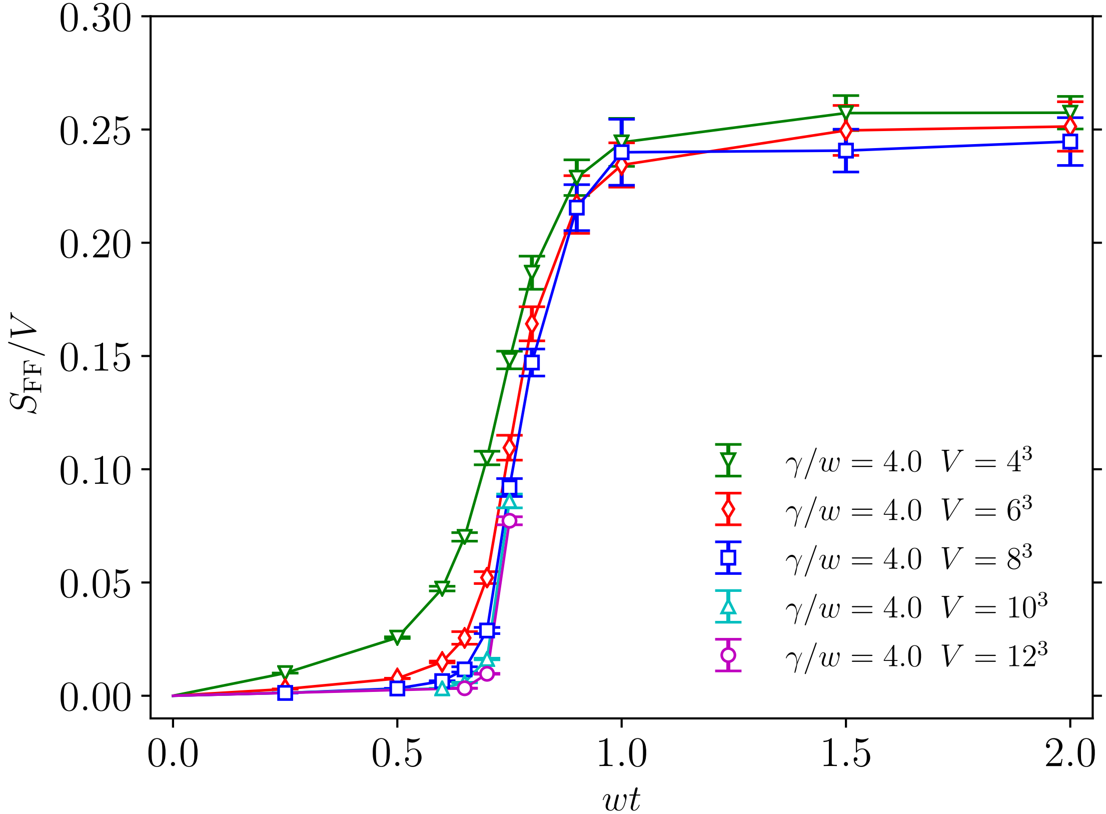
相図



1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.00
wt
Ferromagnetic
Paramagnetic
自由粒子
量子Zeno効果
0
5
10
15
20
γ/w

ユニバーサリティクラス

$$\frac{S_{\mathrm{FF}}}{V} = \left\langle \left[\frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{r}} \right]^2 \right\rangle$$



- 二次相転移？ユニバーサリティクラスは？

（虚）時間発展

$$c_{\boldsymbol{r}\uparrow} \to i^{x+y+z} c_{\boldsymbol{r}\uparrow} \qquad c_{\boldsymbol{r}\downarrow} \to (-i)^{x+y+z} c_{\boldsymbol{r}\downarrow}$$

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{eff}} = & -w \sum_{\boldsymbol{r},j} c^\dagger_{\boldsymbol{r}\uparrow} c_{\boldsymbol{r}+\hat{j}\uparrow} + c^\dagger_{\boldsymbol{r}+\hat{j}\uparrow} c_{\boldsymbol{r}\uparrow} \\ & -w \sum_{\boldsymbol{r},j} c^\dagger_{\boldsymbol{r}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}+\hat{j}\downarrow} + c^\dagger_{\boldsymbol{r}+\hat{j}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}\downarrow} \\ & -i\gamma \sum_{\boldsymbol{r}} c^\dagger_{\boldsymbol{r}\uparrow} c^\dagger_{\boldsymbol{r}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}\uparrow} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{new}} = & -w \sum_{\boldsymbol{r},j} c^\dagger_{\boldsymbol{r}\uparrow} c_{\boldsymbol{r}+\hat{j}\uparrow} - c^\dagger_{\boldsymbol{r}+\hat{j}\uparrow} c_{\boldsymbol{r}\uparrow} \\ & -w \sum_{\boldsymbol{r},j} -c^\dagger_{\boldsymbol{r}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}+\hat{j}\downarrow} + c^\dagger_{\boldsymbol{r}+\hat{j}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}\downarrow} \\ & +\gamma \sum_{\boldsymbol{r}} c^\dagger_{\boldsymbol{r}\uparrow} c^\dagger_{\boldsymbol{r}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}\downarrow} c_{\boldsymbol{r}\uparrow} \end{aligned}$$

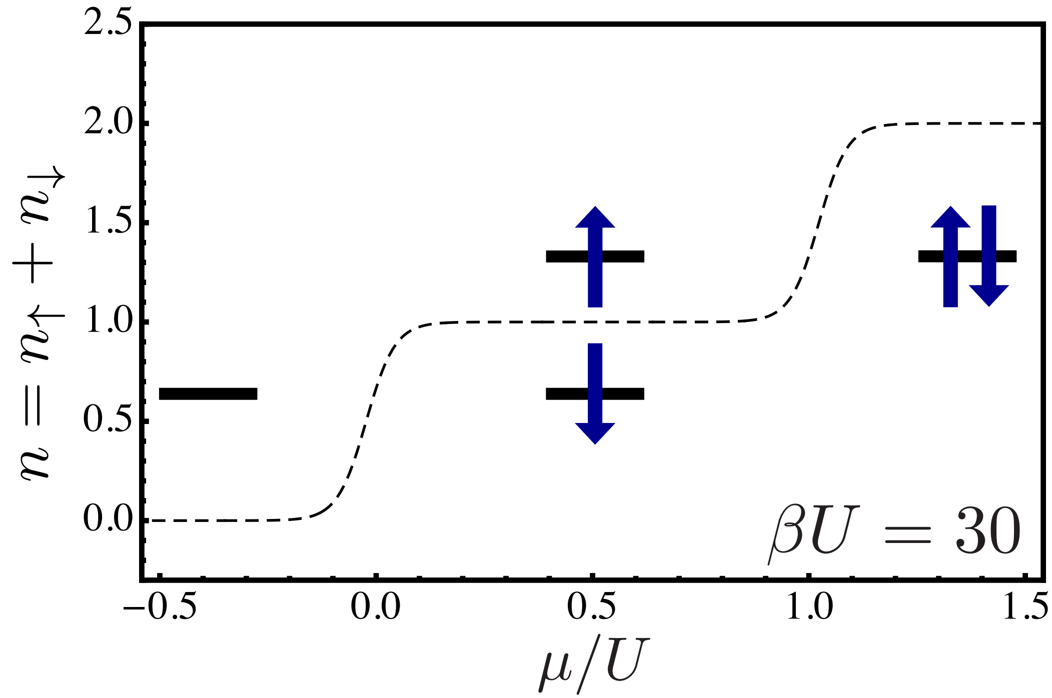
$$e^{-iH_{\mathrm{eff}}t} \to e^{-tH_{\mathrm{new}}}$$

- 非対称ホッピングするハバード模型の虚時間発展

（虚）時間発展（強結合展開）

- $\gamma \to \infty$

$$H = U n_\uparrow n_\downarrow - \mu \left(n_\uparrow + n_\downarrow \right)$$



$$\boxed{n = 1}$$

（虚）時間発展（強結合展開）

- 二次摂動（強磁性Heisenberg模型）

$$H_{\rm spin} = -4w^2/\gamma \sum_{\boldsymbol{r},j} (\boldsymbol{S_r} \cdot \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{r}+\hat{j}} - 1/4)$$

$$e^{-iH_{\rm eff}t} \to e^{-tH_{\rm spin}}$$

- (classical) XY ユニバーサリティクラス

- 有限サイズスケーリングの振る舞いはU(1)の自発的対称性の破れとコンシステント
- ユニバーサリティクラスは初期条件に依存する(かもしれない)

まとめ

○ 非エルミートハバード模型の実時間モンテカルロ

○ 非エルミート性に誘起された動的臨界現象

展望

○ 新しい量子相転移

- 非平衡系の相転移（平衡系では不可能なオーダー）
- 場の理論的な系では？