# 論文の内容の要旨

# Fundamental inequalities in quantum many-body systems
# (量子多体系における基礎不等式)

氏名: 桑原 知剛

量子物理における一大目標として挙げられるのが、量子多体系における最低エネルギー状態、すなわち基底状態における性質を理解することである。基底状態を得ることは絶対零度に近い低温下の物理的性質を解析する上で重要であるだけでなく、量子アニーリングを始めとした量子計算においても本質的な問題となってくる。ところが、量子力学の基本原理から、$N$ 体物理系の任意の状態を記述するためには一般に $e^{\mathcal{O}(N)}$ 個のパラメータが必要であり、ハミルトニアンの行列を直接対角化することによって基底状態を得ることはほとんど不可能であることが知られている。より具体的には、数多くのハミルトニアンで基底状態を計算する問題はQMA 完全と呼ばれる最も困難な複雑性クラスに属することが A. Kitaev らによって示されている。

このように一般的に基底状態を得ることは非常に難しい問題であるが、現実的に基底状態を計算する際には指数的に増大するパラメータを扱う必要がないことも多々ある。例えば、平均場近似や密度行列繰り込み群法 (DMRG) が有効であるような系が挙げられ、この場合には、基底状態は高々 Poly($N$) 個程度のパラメータを用いれば良い近似で計算できる。ではどのような場合に、基底状態を少数のパラメータで (近似的に) 記述することが正当化されるのであろうか。この問題を解決することが我々の研究の最大の目標である。経験的には、系のエンタングルメントが少ない系でこのような近似が有効であることが分かっており、それを理論的に理解することがこの問題の解決の鍵になると見られている。

実用的に、基底状態の記述がシンプルであるようなクラスで最も重要かつ有名な例として、ギャップを持つハミルトニアンの非縮退な基底状態が挙げられるだろう。ここで「ギャップを持つ」とは第一励起エネルギーの大きさがシステムサイズに依存しない定数で下から抑えられることを意味する。ここで問題とするのは、「任意のギャップを持つ基底状態を含み ($|E_0\rangle \in G$)、かつ Poly($N$) 個のパラメータ集合で記述できるような状態クラス $G$ が存在するかどうか」である。先行研究として、有限レンジで相互作用する一次元量子系については近年この問題が完全に解決された。一次元のギャップ系においては、行列積状態 (MPS) と呼ばれる状態クラスを用いることによって任意の基底状態が $\mathcal{O}(N)$ 個程度のパラメータで近似的に記述できることが分かっている。しかし多次元においては短距離離相互作用系に対しても未だ完全な理解は得られていない。

ギャップを持つ基底状態が少数のパラメータのみで記述できる可能性があるのは、状態に局所的な性質のみが現れることに起因している。つまりギャップを持つ基底状態において非局所的な性質は強く制限されている。このことは、ハミルトニアン自体が少数スピン間のカップリングしか含まないという事実と深く関係している。より具体的に、短距離相互作用系のギャップを持つ基底状態の記述複雑性を解析する際には、(1a) 2 体相関の指数的な減衰やエンタングルメントエントロピーの面積則を基にして、(1b) 行列積状態や Projected Entangled Pair State (PEPS) による記述の近似精度を理解するという方式がこれまで取られてきた。そこで、基底状態の記述複雑性の解析では以下の二つのステップを取ることが考えられる：

(1a) ギャップの存在が基底状態に与える基本的制限を理解する。

(1b) 上記で得た条件を基にして、基底状態の効率的な記述方法を見つける。

本論文では、これまでの短距離相互作用系に代わって、$k$-local と呼ばれるクラスでギャップを持つ基底状態を調査する。ここで、$k$-local ハミルトニアンとは相互作用のカップリングが高々 $k$ 体であるようなハミルトニアンを指す ($k = \mathcal{O}(1)$)：

$$H = \sum_{i_1<i_2<\cdots<i_k}^{N} \sum_{\mu_1,\ldots,\mu_k} J_{i_1,\ldots,i_k}^{\mu_1,\ldots,\mu_k} \overbrace{s_{i_1}^{\mu_1} \otimes \cdots \otimes s_{i_k}^{\mu_k}}^{k}, \tag{1}$$

ここで $N$ はスピン数、$\{s_i^{\mu}\}_{\mu,i}$ はスピン $i$ の演算子基底である。例えば (1/2) スピン系であれば、パウリ行列を用いて $\{s_i^{\mu}\}_{\mu,i} = \{\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z\}$ と表せる。$k$-local ハミルトニアンは長距離相互作用系を含んでいることに注意されたい。

$k$-local なハミルトニアンを調査する動機としては以下の 3 点が挙げられる:

(2a) 先行研究においての結果は主に短距離相互作用におけるものであり、長距離相互作用系に対してはほとんど何も分かっていない。

(2b) $k$-local 系のハミルトニアンはそれ自体が物理的に自然なモデルではないが、このクラスのハミルトニアンは計算論で複雑性を研究する際には非常にありふれたモデルである。例えば、5-local ハミルトニアンの基底状態のシミュレーション問題に対して初めて QMA 完全性が証明された。

(2c) $k$-local 系の研究を通して、ギャップを持つ基底状態の局所的性質に対して新しい視点を得られることが期待される。

本研究においては $k$-local ハミルトニアンで、記述複雑性の解析のステップ (1a)、(1b) の内の最初のステップ (1a) に取り組む。

ここで我々が直面する困難としては、これまでと定性的に異なるハミルトニアンのクラスを扱っているために従来の手法や考え方が適用できないということにある。従って、$k$-local のハミルトニアンの解析のためには以下の 2 点に関して新しい枠組みを構築する必要性が生じる。

(3a) 解析のための出発点として何を持ってくるべきか？

(3b) ギャップを持つ基底状態を特徴づける性質として何を採用するべきか？

短距離相互作用系において上記の 2 点は明確である：(3a) Lieb-Robinson bound という不等式を基に、ほぼ全ての重要な結果を得ることができ、(3b) 基底状態の局所的な性質としてエンタングルメントエントロピー及び 2 体間相関に関する基礎的な不等式が基底状態を特徴づける。本研究における主要な成果は以下で述べるように一般の $k$-local 系で新しい基礎不等式を得たことにある。

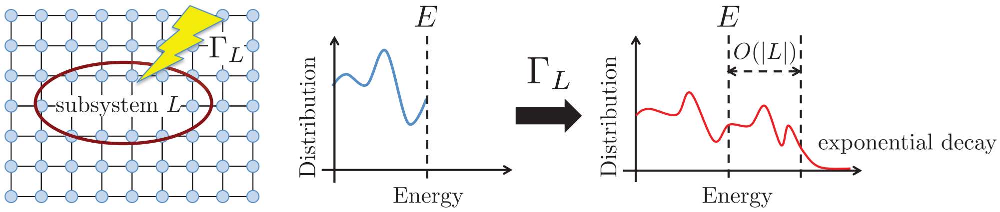


図 1　初期状態がエネルギー $E$ 以下の状態 (青曲線)。外部演算子 $\Gamma_L$ によりエネルギー分布が変化する (赤曲線)。このときエネルギー励起は $\mathcal{O}(|L|)$ を超えると指数的に減衰する。ここで、$|L|$ は領域 $L$ のサイズを指すものとする。

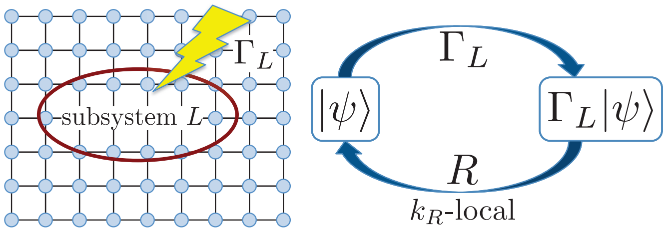


図 2　局所可逆性の概念図。 $|\psi\rangle$ が局所可逆性を満たす場合、$\mathcal{O}(\sqrt{|L|})$-local の演算子 $R$ で近似的に元の状態に戻すことが可能である。

以下では、本論文の各章の概要について簡潔に述べる。まず、第 1 章では本研究の基本的な問題設定を行い、第 2 章では短距離相互作用系におけるこれまでの結果の中で重要なものを与える。続いて、第 3 章では本研究における解析の出発点となる定理を導く。本質的なアイデアを以下で簡単に述べる (図 1)。まず、エネルギー $E$ 以下の状態の重ね合わせ状態で記述されるある状態 (青曲線) を考える。このとき、ある領域 $L$ (サイズ $|L|$) で定義される演算子 $\Gamma_L$ をこの状態にかけると、状態のエネルギー分布は変化して (赤曲線)、エネルギー $E$ 以上の励起状態が非零で含まれてくる。ここで、我々は励起状態の分布が $\mathcal{O}(|L|)$ を超えると指数的に減衰することを証明した。我々が得た定理は局所的な演算によって大域的な影響が出ないということを意味している。第 4 章〜第 6 章で、この定理を基に様々な不等式を導出する。

第 4 章では本研究の主結果の一つである局所可逆性という概念を導入する。これはある状態の中に非局所的な性質がどの程度存在するのかを定量的に表すものであり以下のように定義される。任意の量子状態 $|\psi\rangle$ に対して、ある領域 $L$ で定義される演算子 $\Gamma_L$ をかけ、この状態をある $k_R$-local の演算子 $R$ で元に戻すことを考える (図 3)。このとき、$|\psi\rangle$ が局所可逆性を満たすのであれば任意の $\Gamma_L$ と $k_R$ に対して、以下の誤差で状態を元に戻す演算子 $R$ が存在する：

$$\|R\Gamma_L|\psi\rangle - |\psi\rangle\| \le \frac{\|\Gamma_L\|}{|\langle\psi|\Gamma_L|\psi\rangle|} f\left(\frac{k_R}{\sqrt{|L|}}\right), \tag{2}$$

ここで、$f(x)$ はどのような冪より早く減衰する関数とする。この性質は系のエンタングルメントの性質に強い制限を課すと期待される。なぜならエンタングルメントが一度壊されてしまうと局所的な演算によって元に戻すことはできないと考えられるからである。局所可逆性に関して、我々は以下の結果を数学的に導出した。

(4a) ギャップを持つ基底状態は局所可逆性を満たす。

(4b) 局所可逆性はマクロな量子性の一つの指標である量子フィッシャー情報量に強い制限を与える。この結果を基にして量子臨界指数に対する新しい不等式、及び平均場近似の誤差に関する不等式を導出

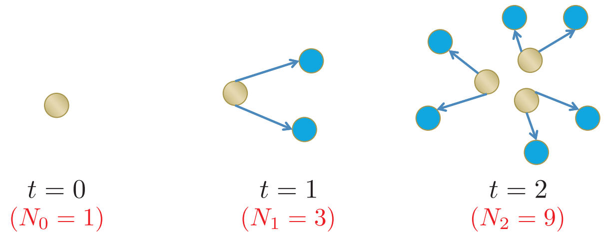


図 3　古典的な情報共有の概念図。ある一つの情報源を出発点として、情報を持つスピンが単位時間当たり他の $\kappa$ 個のスピンに情報を送れるとする。このとき、時間 $n$ 後には $(\kappa+1)^n$ のスピンが情報を共有できることになる。上では $\kappa = 2$ の場合を示している。

した。

(4c) トポロジカルオーダーを持つ状態は局所可逆性を満たさないことを Kitaev モデルの基底状態において示した。

これまでのところ、状態に存在するいかなる大域的な量子性も局所可逆性によって検出されることを確認している。第 5 章においては (4b) の結果をより一般化し、基底状態だけでなく任意の低エネルギー状態に対して拡張された不等式を導出した。

続いて第 6 章では、$k$-local ハミルトニアンの本質的な性質として時間発展に対する制限に着目する。既に述べたように短距離相互作用系では Lieb-Robinson bound という不等式が基底状態の解析における重要な道具となっている。我々は $k$-local 系の時間発展においても同等の制限が得られるのかどうかを調査した。Lieb-Robinson bound は 2 スピン間で情報を転送するためにはある有限の時間がかかるということを基にしているが、長距離相互作用系も含む $k$-local 系においては任意の 2 スピン間がつながり得るため、情報転送の速度はあまり意味をなさない。そこで我々は情報転送に代わって情報を共有する速度は長距離相互作用系でも有限になるだろうという点に着目した。図 3 に示すように古典的な場合を考えると情報を共有するスピンの数は $e^{\mathcal{O}(N)}$ 個となる。我々はこのような直感的議論を量子系に適用して、Lieb-Robinson bound に代わる新しい不等式を $k$-local ハミルトニアンの時間発展に対して導出した。さらに、この不等式を適用することにより以下の結果を得た。

(5a) 短距離相互作用系の時間発展と同様に、$k$-local 系の時間発展に対してもトポロジカルオーダーは安定である。

(5b) 直積状態を $k$-local ハミルトニアンで時間発展させた状態 $e^{-iHt}|\mathrm{Prod}\rangle$ $(t = \mathcal{O}(1))$ を考えると、この状態は short-range entanglement (SRE) を持つ状態の自然な拡張となる。本研究では、物理量のスペクトルの観点からこの状態に対して基礎的な不等式を得た。

第 7 章でまとめるように、本研究は $k$-local 系のギャップを持つ基底状態を理解するための最初の知見を与えたと言える。しかし現段階では未だ多くの問題が残されており、特にどのような状態クラスを用いれば基底状態を近似的に記述できるのかについては今後の研究が期待される。本研究は従来の短距離相互作用系における基底状態の理解に対しても一石を投じた。ギャップを持つ基底状態を特徴づける性質として知られている 2 体間相関やエンタングルメントエントロピーではある種の不完全性が存在するが、ここで導入した局所可逆性の概念はその不完全性を部分的に補完するものとなっている。