




# テンソルネットワーク状態による二次元フラストレート 磁性体の解析と有限温度への拡張

東大理 量子ソフトウェア寄付講座 大久保毅



東京大学  
THE UNIVERSITY OF TOKYO

Computational  
Science  
Alliance   
The University of Tokyo

SQAI 

サステイナブル量子AI研究拠点

# コンテンツ

---

- テンソルネットワーク状態による量子多体系の表現
- テンソルネットワーク状態を使った基底状態計算
- iTPSによる二次元フラストレート磁性体の研究  
—キタエフモデルを例に—
- 有限温度計算への展開
- まとめ

テンソルネットワーク状態による量子多体系の表現

# 多体問題と統計力学：磁性体の例

## (量子) スピン模型：

相互作用するスピン自由度が  
格子の上に存在している

例1：(古典) イジング模型

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_{i,z} S_{j,z}$$

$$S_{i,z} = \pm 1$$

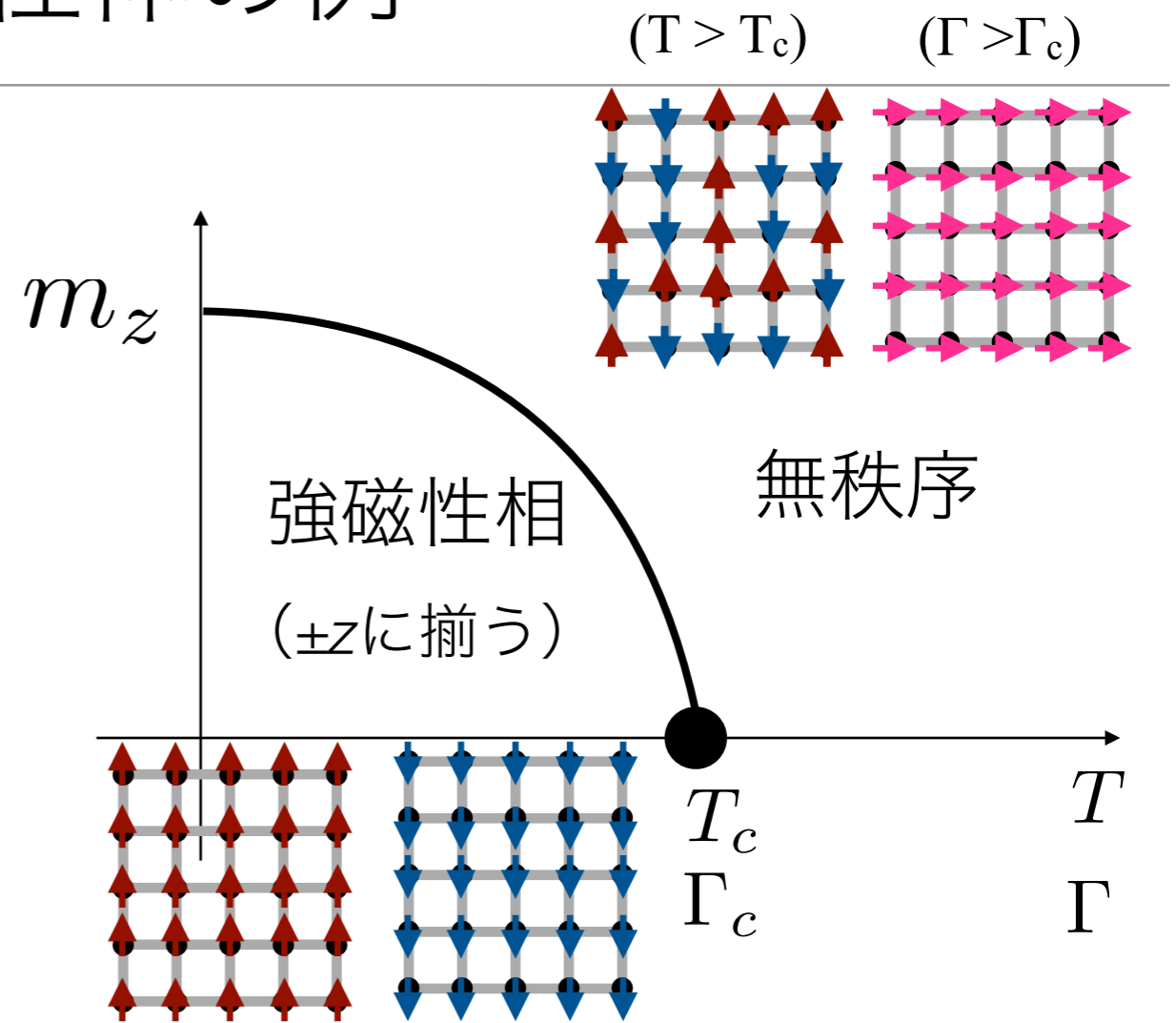
温度を変えると相転移

例2：横磁場イジング模型

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_{i,z} S_{j,z} - \Gamma \sum_i S_{i,x}$$

$$S_{i,z}, S_{i,x} : \text{スピン演算子}$$

絶対零度で $\Gamma$ を変えると相転移



物性物理の研究対象の一つ

- どんな相があるか？
- 長距離秩序、トポロジカル秩序、...
- それらに分ける相転移の性質は？

# 磁性体の多様な物理の源：フラストレーション

- 複数の最適化条件を同時に満たせない状態
- あちらを立てればこちらが立たず

## 磁性体におけるフラストレーション

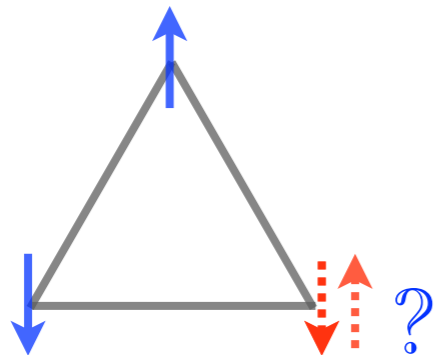
最適化条件：エネルギーを最小にしたい

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad J < 0$$

反強磁性

局所的なエネルギー最小：各ペアでスピンを反平行

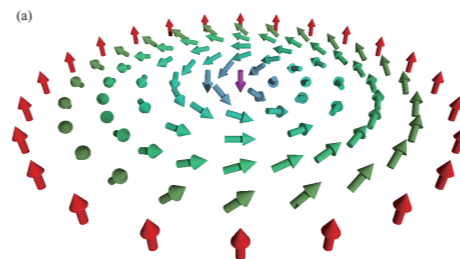
### \*イジングスピン



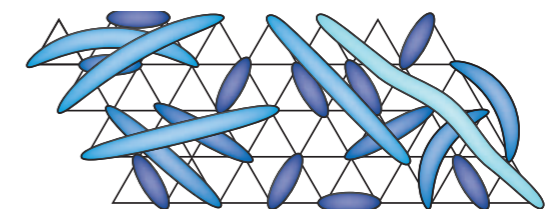
全ての辺で同時にスピンを反平行に出来ない

ゆらぎの増大！

- 大規模な縮重により絶対零度でも磁気秩序なし
- 弱い摂動による新奇秩序の創出
- 量子揺らぎによるスピン液体の安定化
- 隠れた秩序、トポロジー



スカイミオン



(L. Balents, Nature (2010))

スピン液体

# 磁性体の多様な物理の源：フラストレーション

複数の問い（研究対象）

あちら

磁性体におけるフラ

最適化条

局所的な

・ 新奇な状態がどうやって安定化するか？

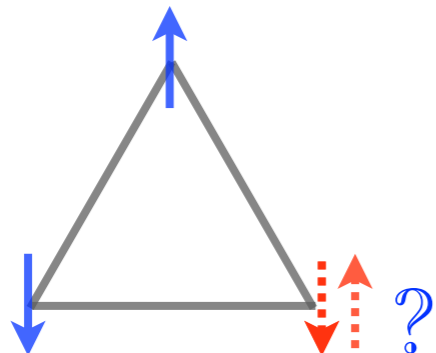
・ 相転移の性質？重要な相互作用は？

・ 新規な状態はどう特徴づけられるか？

・ トポロジー、隠れた秩序の探索

→ 大規模（～アボガドロ数）な数値計算が必要！

\*イジングスピン



全ての辺で同時にスピンを反平行に出来ない

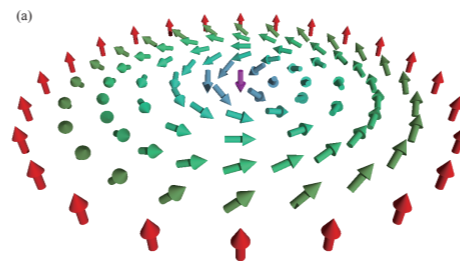
ゆらぎの増大！

・ 大規模な縮重により絶対零度でも磁気秩序なし

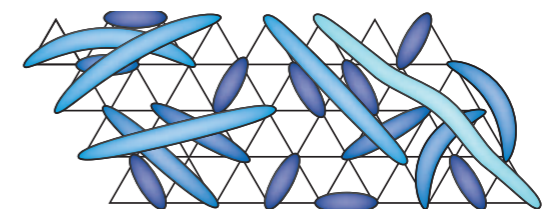
・ 弱い摂動による新奇秩序の創出

・ 量子揺らぎによるスピン液体の安定化

・ 隠れた秩序、トポロジー



スカイミオン



(L. Balents, Nature (2010))

スピン液体

# 量子多体系と解析の困難

## 量子スピン模型

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

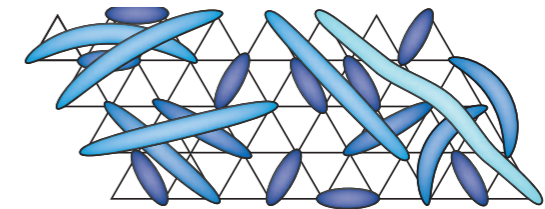
$\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  : スピン演算子

$J_{ij}$  のフラストレーション



どう解析する？

非磁性状態の安定化？



(L. Balents, Nature (2010))

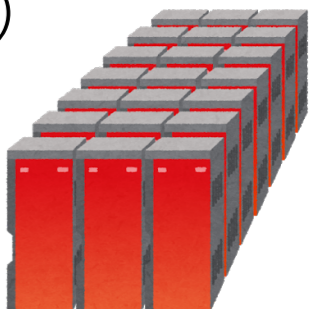
スピン液体

シュレディンガー方程式： $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

$N$ 個の  $S=1/2$  量子スピンの場合  $|\Psi\rangle$  :  $2^N$ 次元のベクトル  
 $\mathcal{H}$  :  $2^N \times 2^N$ の行列

- ベクトル空間の次元はスピン数に対して指数関数的に大きい
- 量子多体問題～「巨大な行列」の固有値問題
- フラストレーションがあると、モンテカルロ法は精度が出ない（符号問題）

（古典）コンピュータで量子多体問題を厳密に解くには、  
膨大なメモリと膨大な計算時間が必要



# テンソルネットワークによる情報圧縮

指数関数的に大きな状態空間を全て扱うことは不可能

➡ 実効的な次元を減らしたい

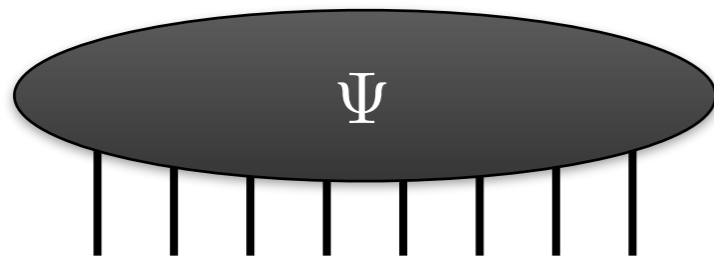
テンソルネットワーク状態：

情報のエンタングルメントに注目することで、適切な部分空間を構成

ヒルベルト空間

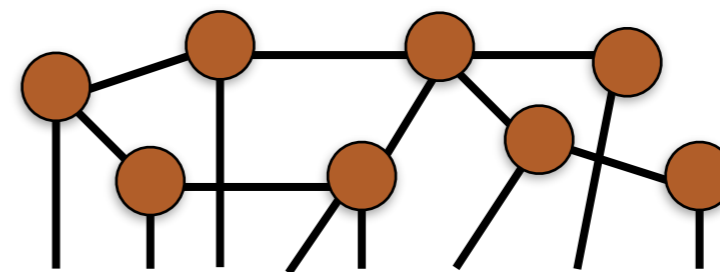
● ← 部分空間

一般の量子状態



➡  
量子エンタングルメントの構造を利用

テンソルネットワーク分解





# 量子多体状態のテンソルネットワーク表現

量子多体状態：  $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_N\}} \Psi_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle$$

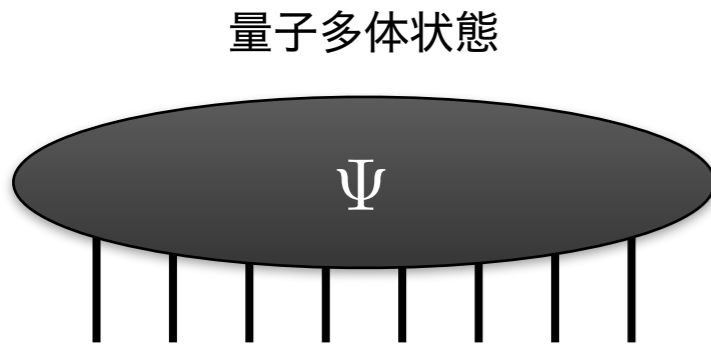
基底

量子スピン・bit :  $i = \uparrow, \downarrow = |0\rangle, |1\rangle$   
 $|010100 \dots 0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes \dots$

量子化学：

$i =$  原子軌道・分子軌道の占有数

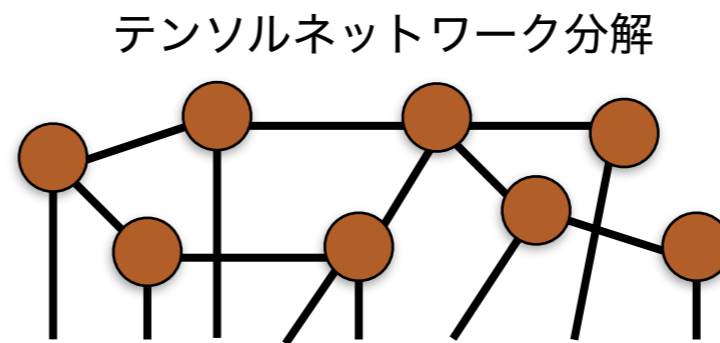
係数はテンソル



量子多体状態

$\sim e^N$ の独立要素

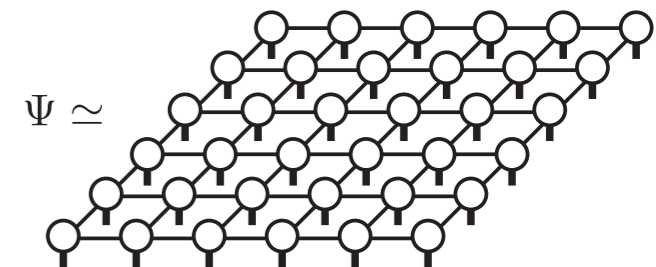
エンタングルメント構造を利用した近似



テンソルネットワーク分解

$\sim O(N)$ の独立要素

PEPS, TPS (for 2d system)



$\Psi \simeq$

$$T_{ijkl}[s] = \begin{array}{c} i \\ \diagup \\ \bigcirc \\ \diagdown \\ l \end{array} \begin{array}{c} j \\ \diagup \\ \bigcirc \\ \diagdown \\ k \end{array} \begin{array}{c} s \\ \diagdown \\ \bigcirc \\ \diagup \end{array}$$

良いネットワーク？ = 量子的な相関を適切に捉えているもの

量子相関が小さい：  $|\Psi\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$

(直積状態)

量子相関が大きい：  $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle)$

(ベル状態)

良いネットワークの選び方：

## エンタングルメントエントロピーの面積則

エンタングルメントエントロピー (**EE**) :

部分系の縮約密度行列:  $\rho_A = \text{Tr}_B |\Psi\rangle\langle\Psi|$

EE =  $\rho_A$  の von Neumann エントロピー

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A)$$

一般の状態ベクトル: (c.f. ランダムベクトル)

EE は 部分系の体積 (スピン数) に比例

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A) \propto L^d$$

基底状態ベクトル:

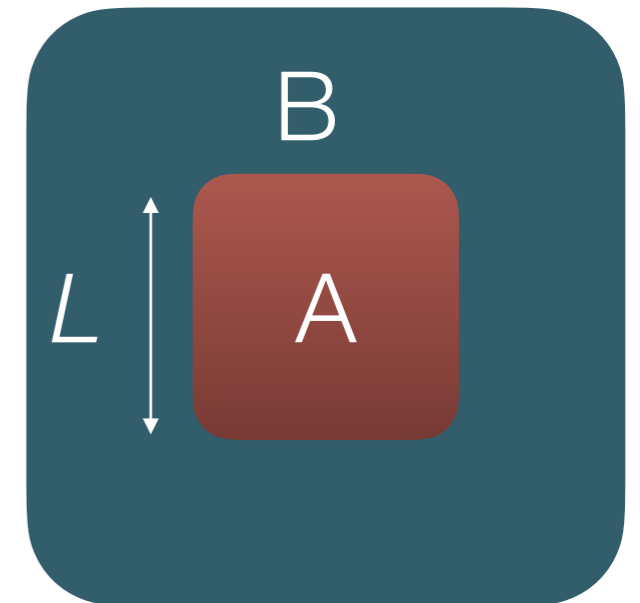
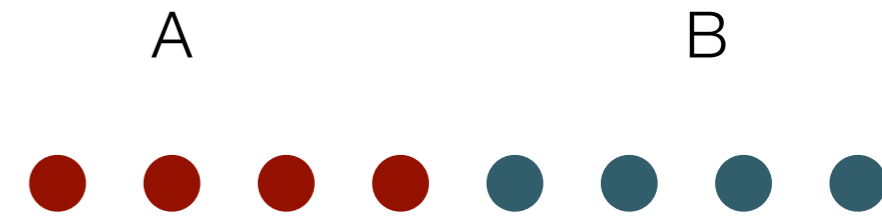
多くの低エネルギー状態では, EE は面積に比例

J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio, Rev. Mod. Phys, 277, **82** (2010)

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A) \propto L^{d-1}$$

自然界に現れる量子状態は広大なヒルベルト空間のうち

面積則を満たす小さな空間内にいる！



# テンソル積状態 (TPS) : 面積則を満たすTNS

**TPS (Tensor Product State)** (AKLT, T. Nishino, K. Okunishi, ...)

**PEPS (Projected Entangled-Pair State)**

(F. Verstraete and J. Cirac, arXiv:cond-mat/0407066)

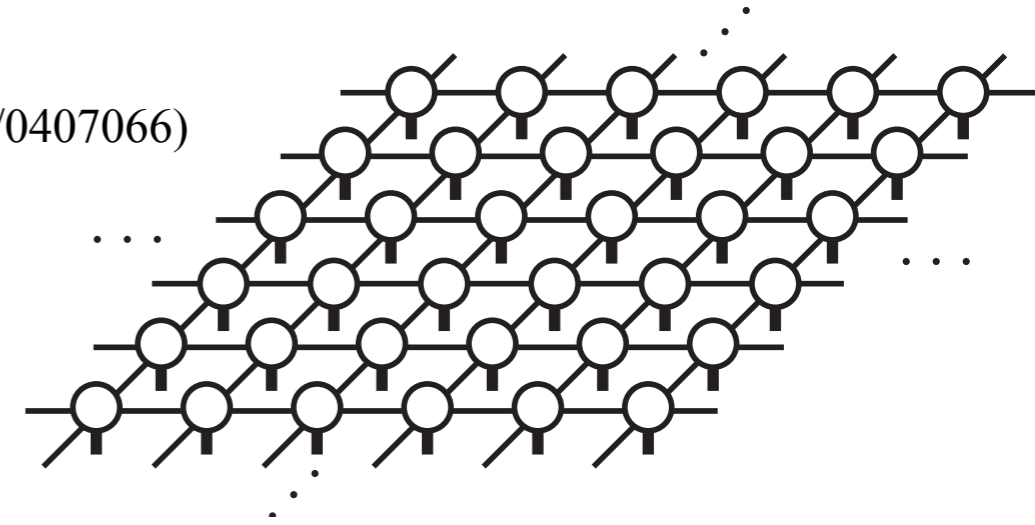
例 : 2次元正方格子のTPS

4+1 階のテンソルが敷き詰められたネットワーク

局所自由度 :  $s$

$$T_{ijkl}[s] = \begin{array}{c} i \\ \diagup \\ \bigcirc \\ \diagdown \\ l \quad k \\ \quad s \end{array}$$

Virtual自由度 :  $i, j, k, l$



各インデックスの次元 = **ボンド次元 (D)**

変分波動関数としての精度に関するパラメタ ( **$D \rightarrow \infty$  で厳密に**)

**TPSを変分波動関数とする変分法** : (TPS表現の範囲で最低エネルギーを探す)

- 面積則を満たすため、有限 $D$ でも精度の良い近似
- $S \leq 4L \log D \propto L$
- 無限系も直接、有限の $D$ で計算できる : **iTPS**
- テンソルネットワークのみを仮定した、**バイアスの少ない**変分波動関数
- ボンド次元の増大により、**系統的に精度を改善**できる

# 無限系のテンソル積状態：iTPS (iPEPS)

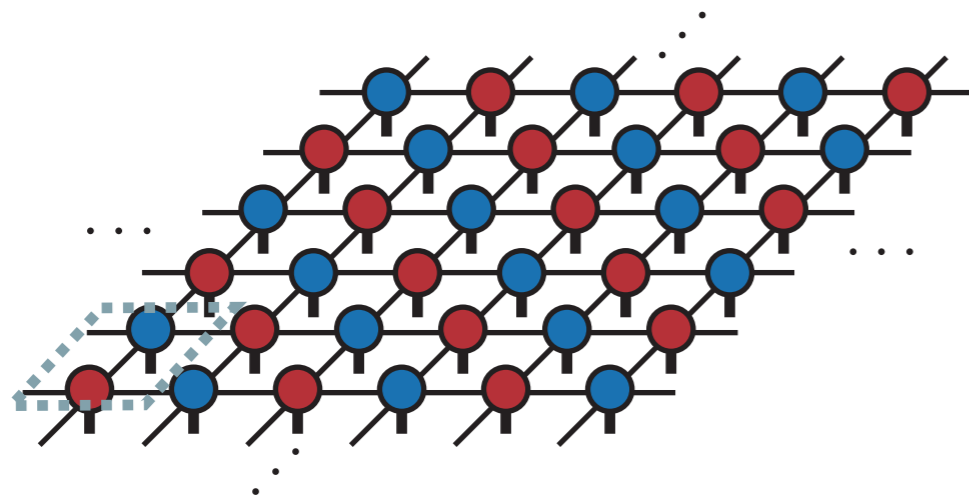
状態ベクトルに並進対称性がある場合：

$$\underline{T}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$$

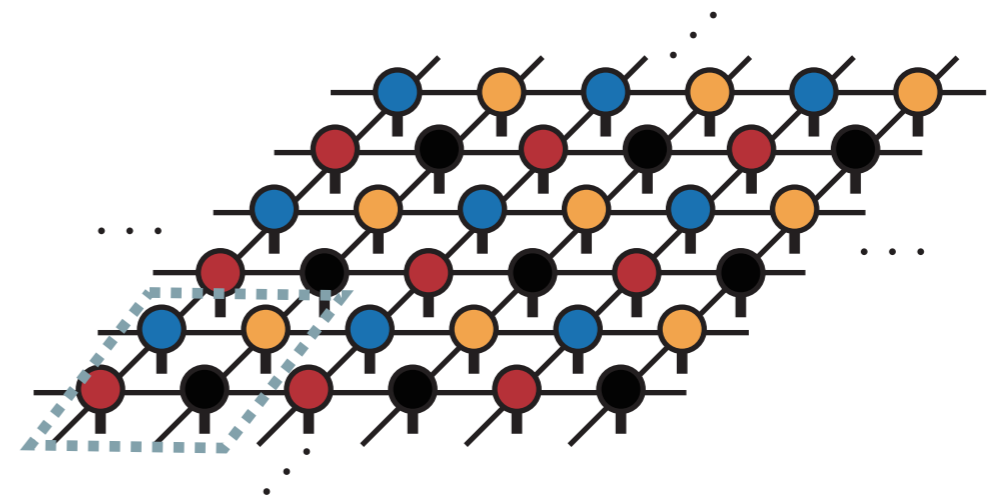
並進の演算子 ↑ 位相はつかない

同じテンソルを周期的に（無限に）並べることで、

無限系の波動関数が有限の自由度で表現可能



2サイトユニットセル



4サイトユニットセル

\*対象の周期が不明な場合は、複数のユニットセルで計算したエネルギーを比較し、適切なユニットセルを探す

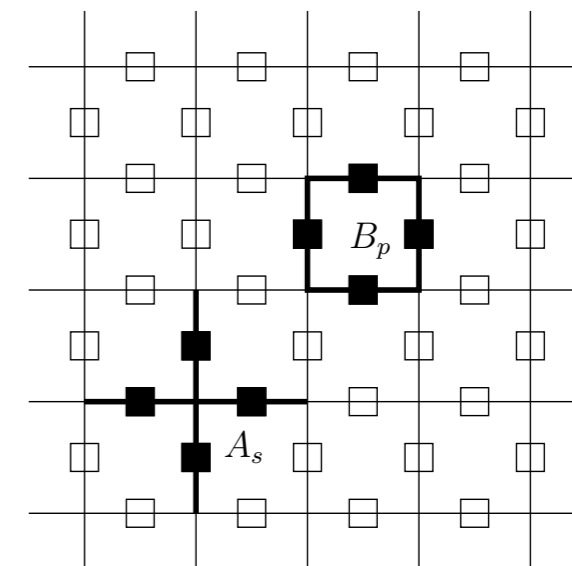
# iTPSの例：可解模型の基底状態

## Toric code

(A. Kitaev, Ann. Phys. **303**, 2 (2003).)

$$\mathcal{H} = - \sum_s A_s - \sum_p B_p$$

$$A_s = \prod_{j \in \text{star}(s)} \sigma_j^x \quad B_p = \prod_{j \in \partial p} \sigma_j^z$$



この模型の基底状態は  $Z_2$  スピン液体

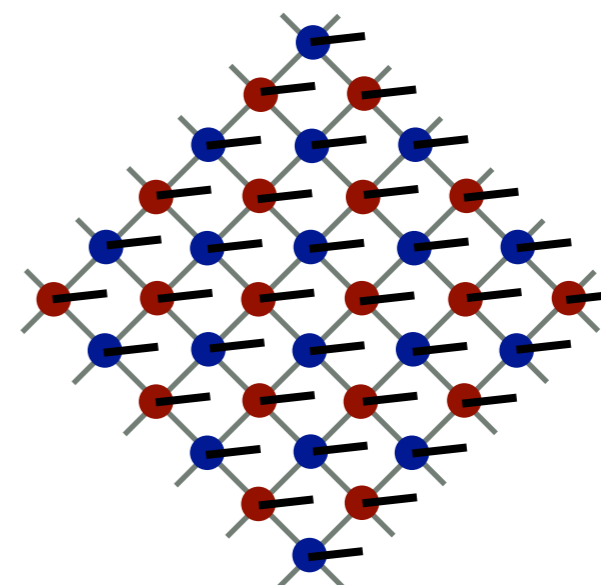
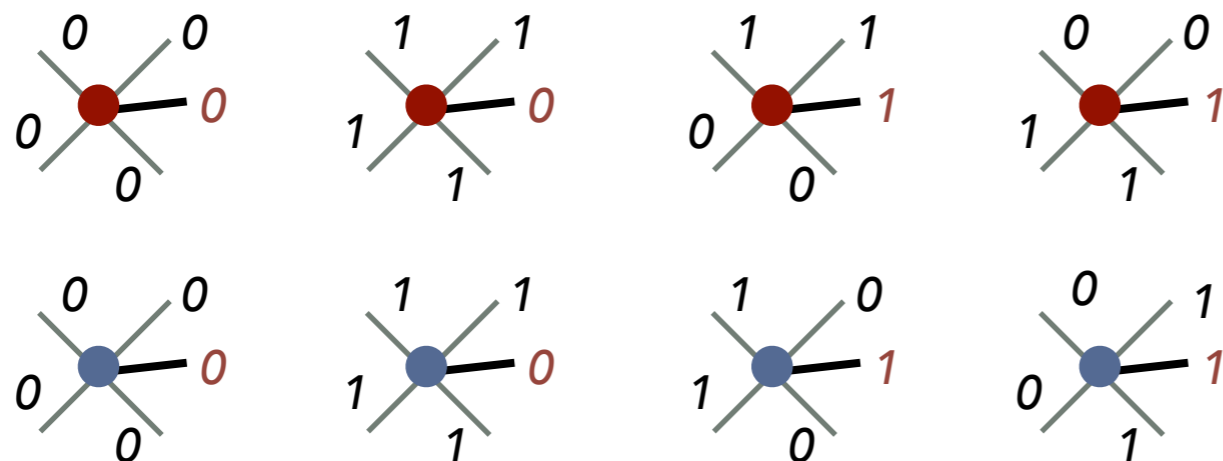
\*量子コンピュータの誤り訂正にも使われる

このスピン液体状態は  $D=2$  TPS で厳密に表現可能

$$|\Psi\rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} e^{\beta \sum_p B_p} |++\cdots+\rangle \quad (\text{F. Verstraete, et al, Phys. Rev. Lett. } \mathbf{96}, 220601 (2006).)$$

0,1: eigenstate of  $\sigma_z$

(Non-zero elements of tensor)



# テンソルネットワーク状態を使った基底状態計算 (の概略)

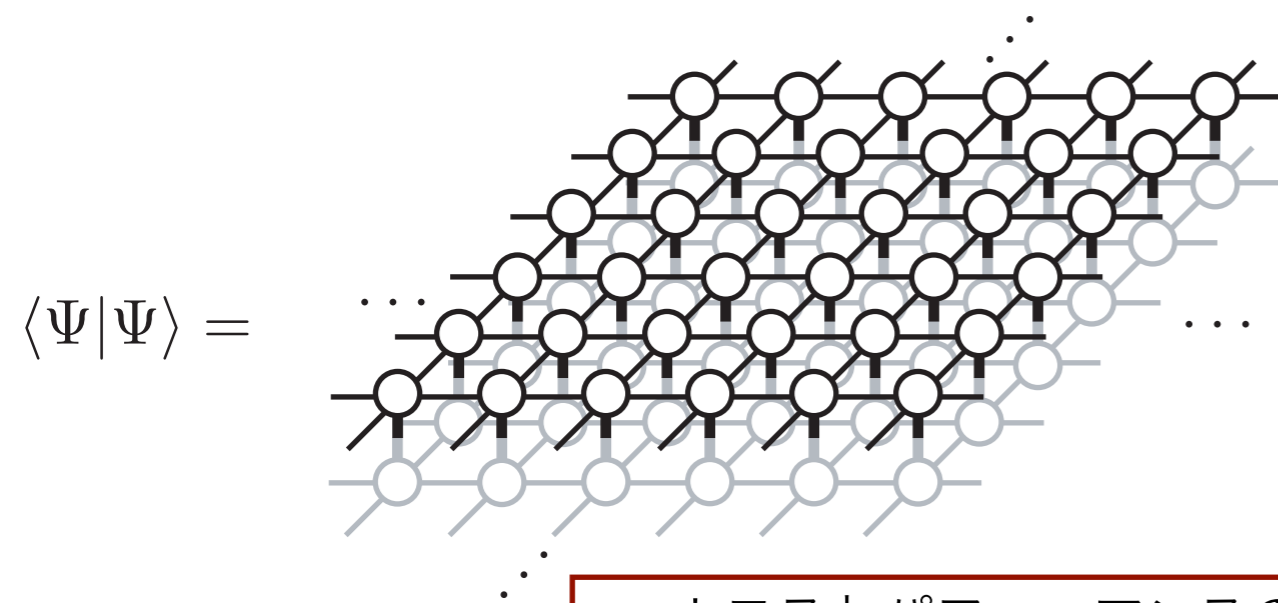
# iTPSを用いた計算アルゴリズム

基底状態の物性を調べるためには、

1. エネルギー期待値などの物理量計算
2. iTPSの最適化

の二つの計算が少なくとも必要

\*TPSでは「テンソルネットワークの縮約」の厳密計算は困難



\*コストパフォーマンスの観点で  
テンソル繰り込み群はあまり使われない

このネットワークの縮約には、  
指数関数的に大きな計算量が必要

近似的な縮約

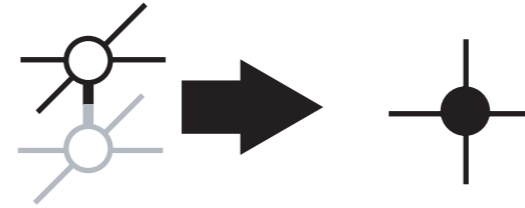
- テンソル繰り込み
- 境界MPS法
- 角転送行列法
- 平均場環境

# 角転送行列法による近似的な縮約

(T. Nishino and K. Okunishi, JPSJ **65**, 891 (1996))

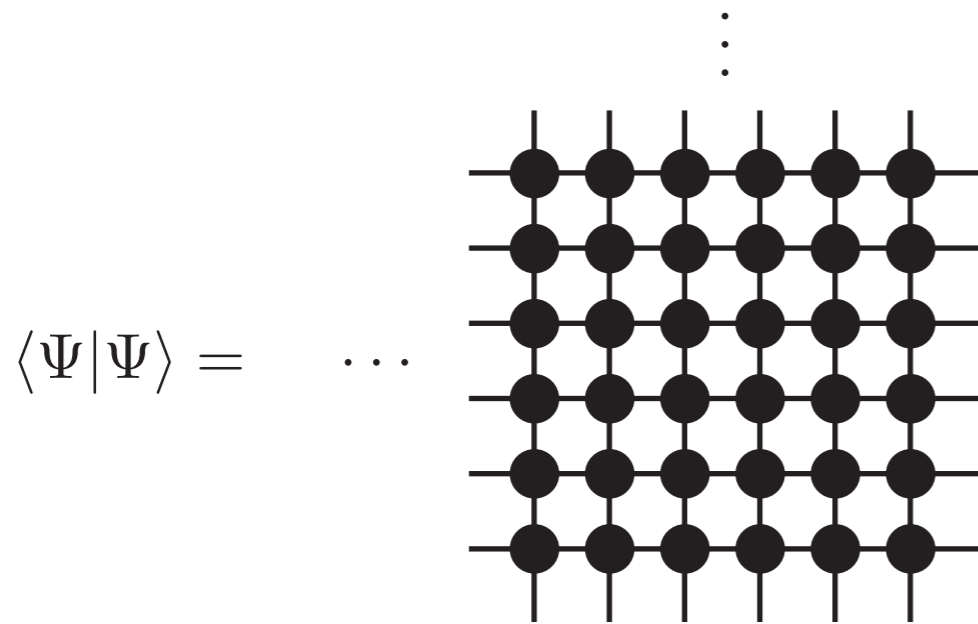
(R. Orus *et al*, Phys. Rev. B **80**, 094403 (2009))

先ほどのネットワークを簡略化：

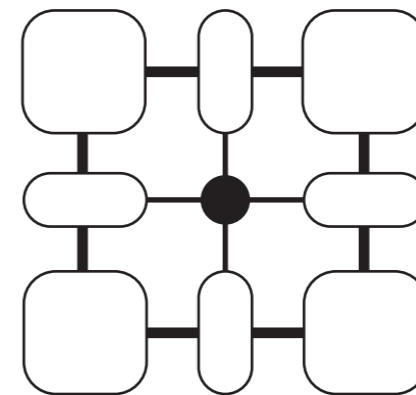


ボンド次元： $D$

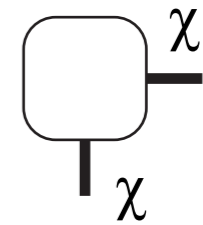
ボンド次元： $D^2$



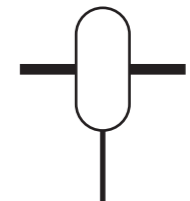
角転送行列表現



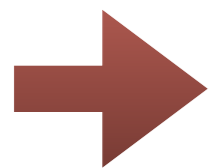
角転送行列



エッジテンソル



無限に広がった環境を"ボンド次元" $\chi$ の角転送行列で近似的に表現



角転送行列とエッジテンソルは、 $O(\chi^2 D^6), O(\chi^3 D^4)$   
 のコストで計算可能

\* $\chi$ は物理量が収束するように十分に大きく取る

\*通常、 $\chi \propto O(D^2)$ でスケールするため縮約コストは $O(D^{10})$



# iTPSの最適化

## iTPSの典型的な最適化法

### 1. 変分最適化法

エネルギー期待値を最小にする様に  
テンソルを変化させる

$$\min_A E(A) = \min_A \frac{\langle \Psi(A) | \hat{H} | \Psi(A) \rangle}{\langle \Psi(A) | \Psi(A) \rangle}$$

\*微分の計算が困難だったが、最近発展

P. Corboz, Phys. Rev. B **94**, 035133 (2016).

L. Vanderstraeten *et al*, Phys. Rev. B **94**, 155123 (2016).

H.-J. Liao *et al*, Phys. Rev. X **9**, 31041 (2019).

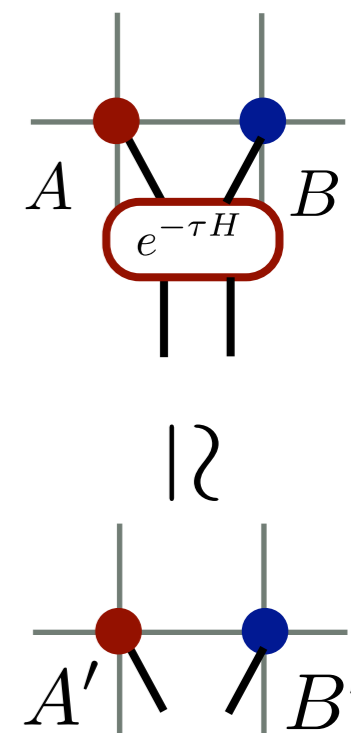
### 2. 虚時間発展法

長時間の虚時間発展で基底状態を得る

$$\lim_{M \rightarrow \infty} (e^{-\tau \mathcal{H}})^M |\psi\rangle = \text{ground state}$$

虚時間発展演算子をかけると、iTPSのボンド次元が増大

➡ 同じボンド次元のiTPSに再度近似



**Full update:**  $O(D^{10})$  global近似 (cf. R. Orus *et al*, Phys. Rev. B **80**, 094403 (2009))

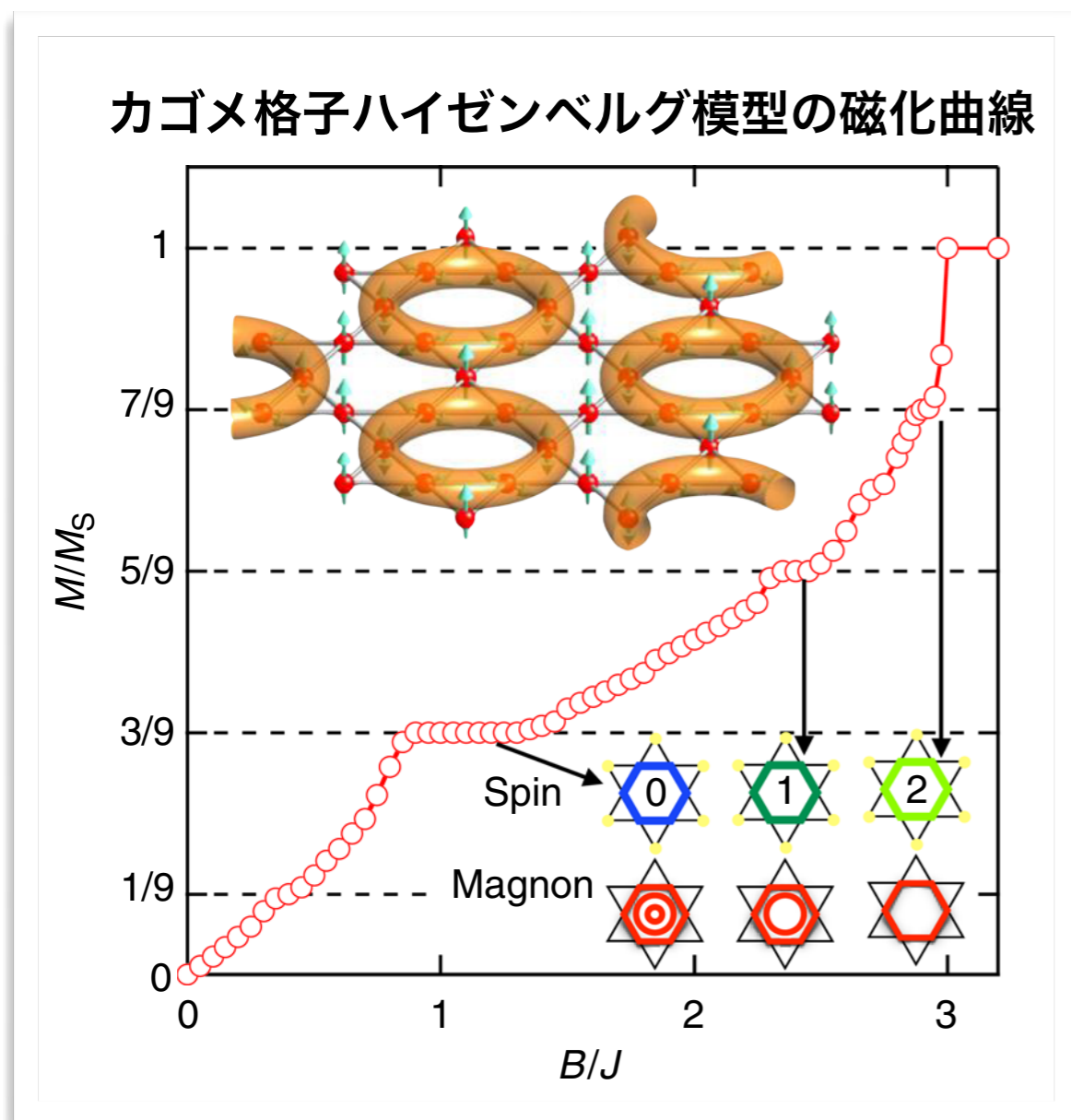
**Simple update:**  $O(D^5)$  local近似 (H. G. Jiang *et al*, Phys. Rev. Lett. **101**, 090603 (2008))

# iTPS(iPEPS)の適用例

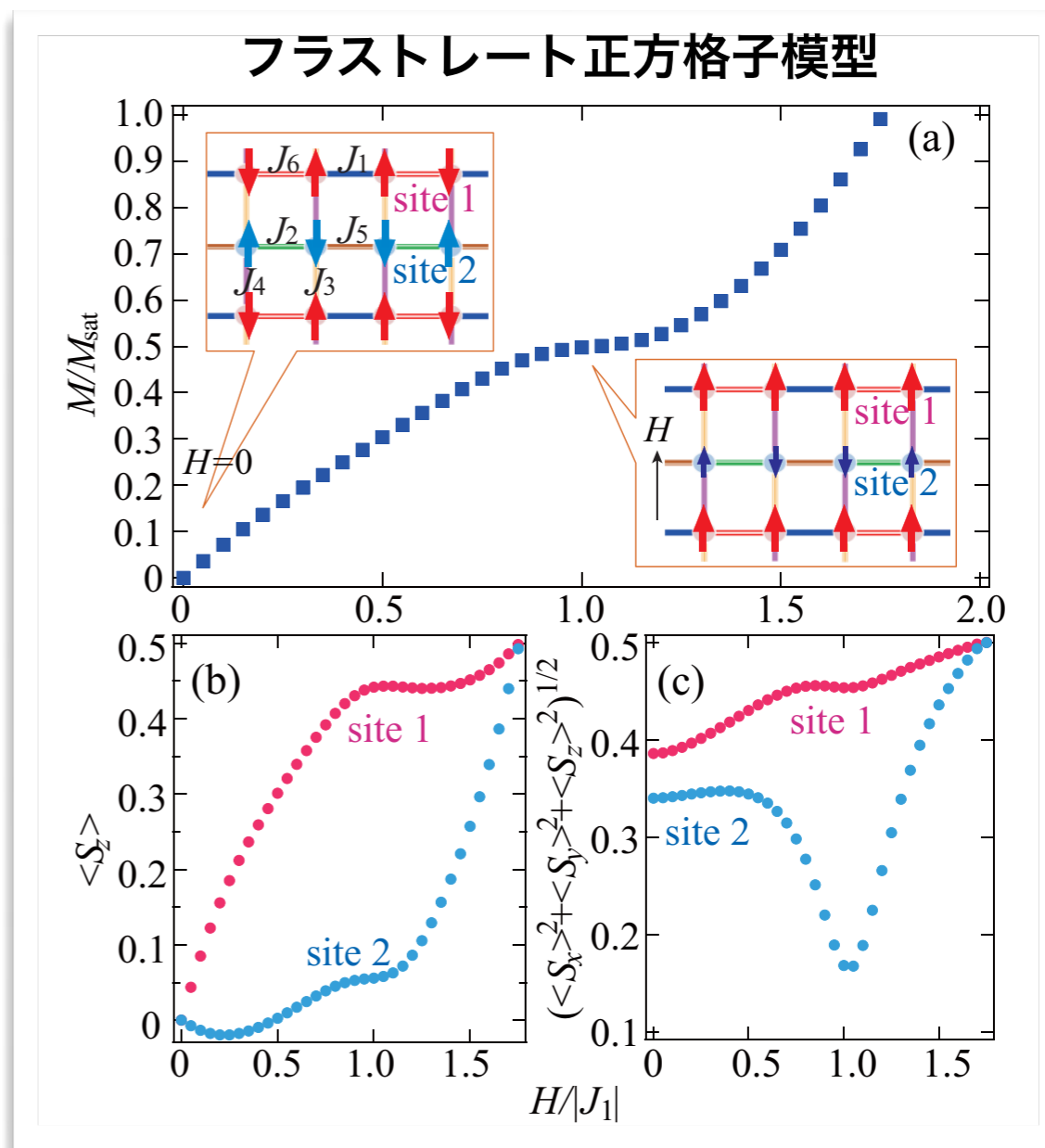
## ハイゼンベルグ模型

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - h_z \sum_i S_i^z$$

例：(QMCのできない) フラストレート磁性体



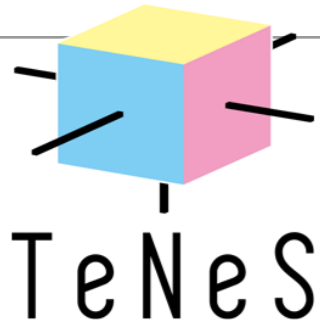
R. Okuma, D. Nakamura, T. Okubo et al,  
Nat. Commun. **10**, 1229 (2019).



H. Yamaguchi, Y. Sasaki, T. Okubo,  
Phys. Rev. B **98**, 094402 (2018).

# Tensor Network Solver (TeNeS)

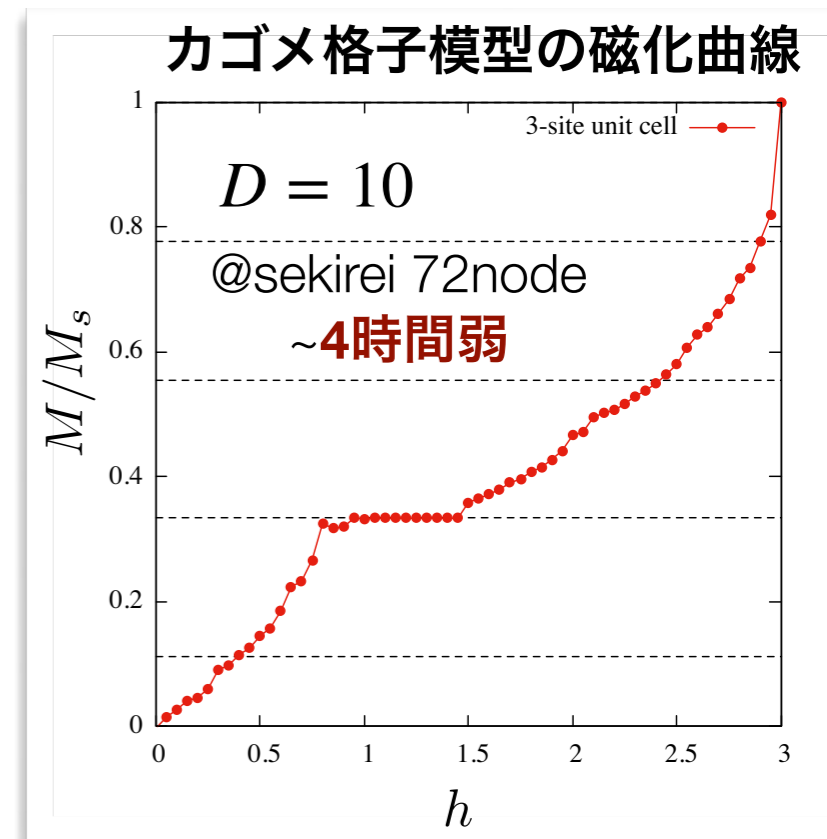
Y. Motoyama, T. Okubo, et al., Comput. Phys. Commun. 279, 108437 (2022).



<https://github.com/issp-center-dev/TeNeS>

無限系のTPS (iTPS) を用いた変分法による基底状態計算

- ✓ 虚時間発展法によるテンソルの最適化
- ✓ MPI/OpenMPによる大規模並列計算に対応
  - ✓ mptensor (森田) によるテンソル演算の並列化
- ✓ 二次元の量子スピン系やボゾン系が簡単に計算可能
  - ✓ mVMCやHPhiと類似のinput file
- ✓ 標準的な二次元格子にデフォルトで対応
  - ✓ 原理的には任意の二次元格子に対応可能



## 開発チーム

- ・ 大久保毅 (東大理) : アルゴリズム部分の実装
- ・ 森田悟史 (物性研) : 関連ライブラリ・ツール作成
- ・ 本山裕一 (物性研) : メインプログラム等の設計・実装
- ・ 吉見一慶 (物性研) : ユーザーテスト・サンプルの作成、マネージメント
- ・ 加藤岳生 (物性研) : ユーザーテスト・サンプルの作成
- ・ 川島直輝 (物性研) : プロジェクト統括

【物性研高度化プロジェクト】

# iTPSを用いたフラストレート磁性体の研究 —キタエフ模型を例に—

# ハニカム格子キタエフ模型

A. Kitaev, Annals of Physics **321**, 2 (2006)

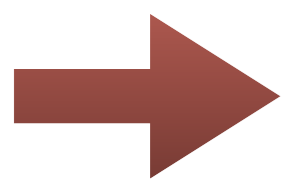
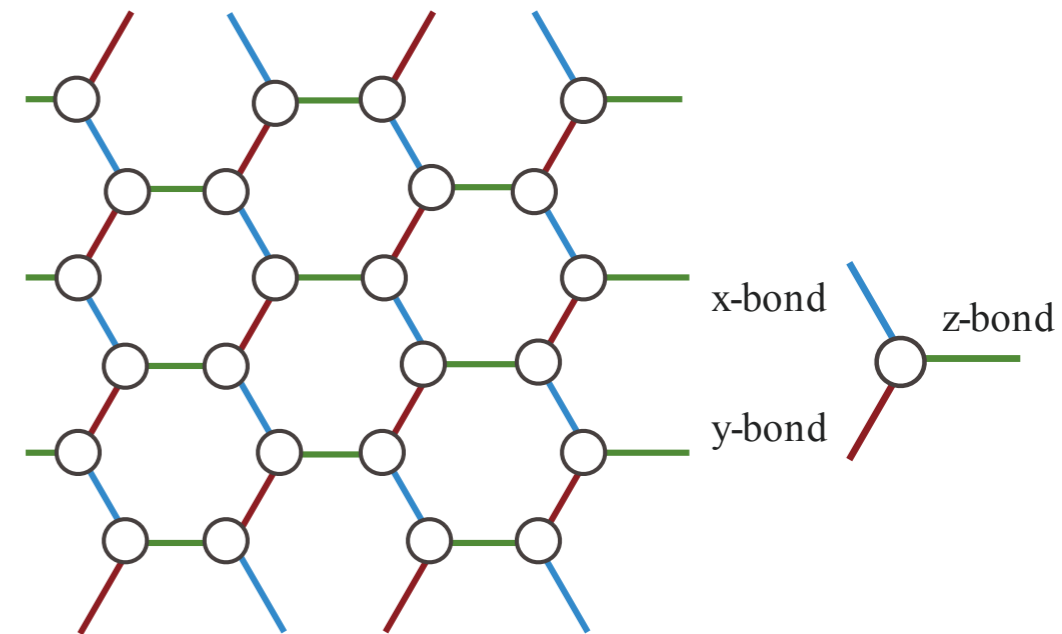
## キタエフ模型

$$\mathcal{H} = - \sum_{\gamma, \langle i, j \rangle_{\gamma}} J_{\gamma} S_i^{\gamma} S_j^{\gamma}$$

$\gamma$ : 相互作用の方向

相互作用の方向に応じて、異なるスピン成分がイジング型に相互作用

## ハニカム格子



この模型は「マヨラナフェルミ粒子」を用いて、自由粒子の問題に変換可能

Spin

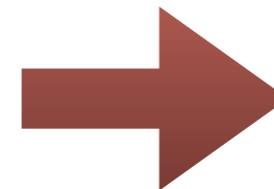
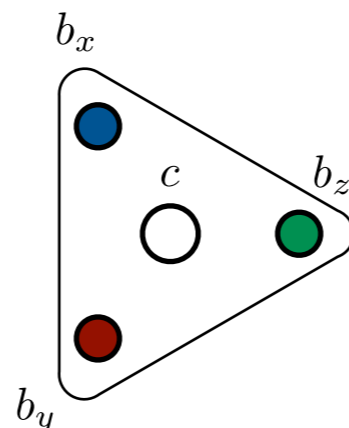
$\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$

Majorana fermions:

$2S^{\gamma} = \sigma^{\gamma} = ib^{\gamma}c$

$(b^{\gamma})^{\dagger} = b^{\gamma}$   
 $c^{\dagger} = c$

Four Majorana fermions



量子スピン液体

# キタエフ物質とテンソルネットワークでの計算例

T. Okubo, K. Shinjo, Y. Yamaji et al, Phys. Rev. B **96**, 054434 (2017).

強いスピン軌道相互作用  $\rightarrow$  実際の物質でキタエフ相互作用が実現

G. Jackeli, et al., PRL 102, 017205 (2009)

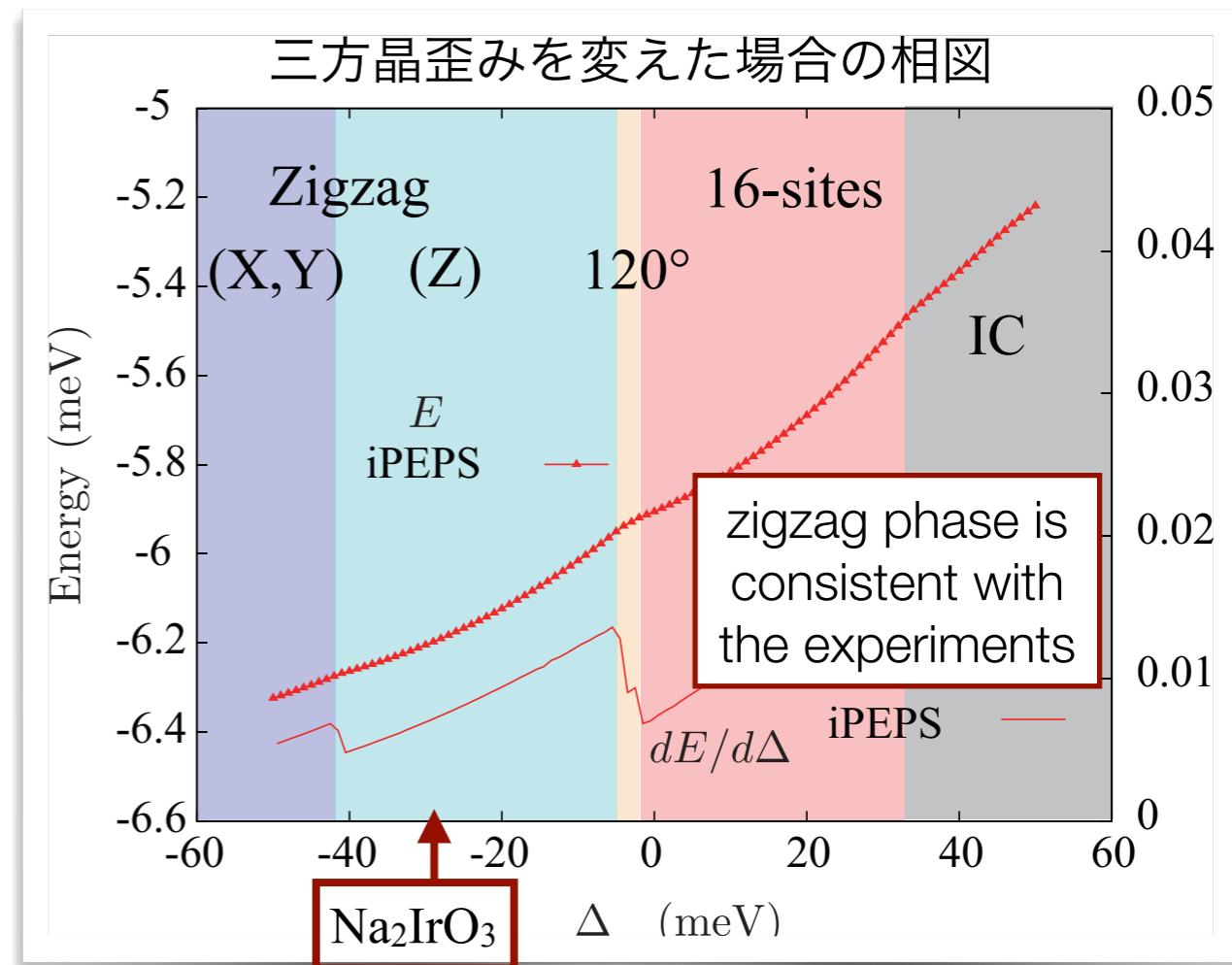
## Na<sub>2</sub>IrO<sub>3</sub>の第一原理スピンハミルトニアン

(Y. Yamaji et al. Phys. Rev. Lett. **113**, 107201(2014))

Kitaev + Heisenberg + Off-diagonal interactions  
+  
2nd and 3rd nearest neighbor interactions

$\rightarrow$  この物質の基底状態をiTPS  
を使って明らかに

- キタエフ相互作用以外の相互作用の影響で、基底状態はスピン液体ではなく磁気秩序状態
- その場合、iTPSでの計算は、第一原理ハミルトニアンの基底状態を正しく実現できる



# キタエフ物質とテンソルネットワークでの計算例

T. Okubo, K. Shinjo, Y. Yamaji et al, Phys. Rev. B **96**, 054434 (2017).

強いスピン軌道相互作用



実際

スピン軌道相互作用が実現

Na<sub>2</sub>IrO<sub>3</sub>の第一原理スピンハミルトニアン

(Y. Yamaji et al. Phys. Rev. Lett. **107**, 077205 (2009))

Kitaev + Heisenberg + Off-diagonal

+

2nd and 3rd nearest neighbor interactions

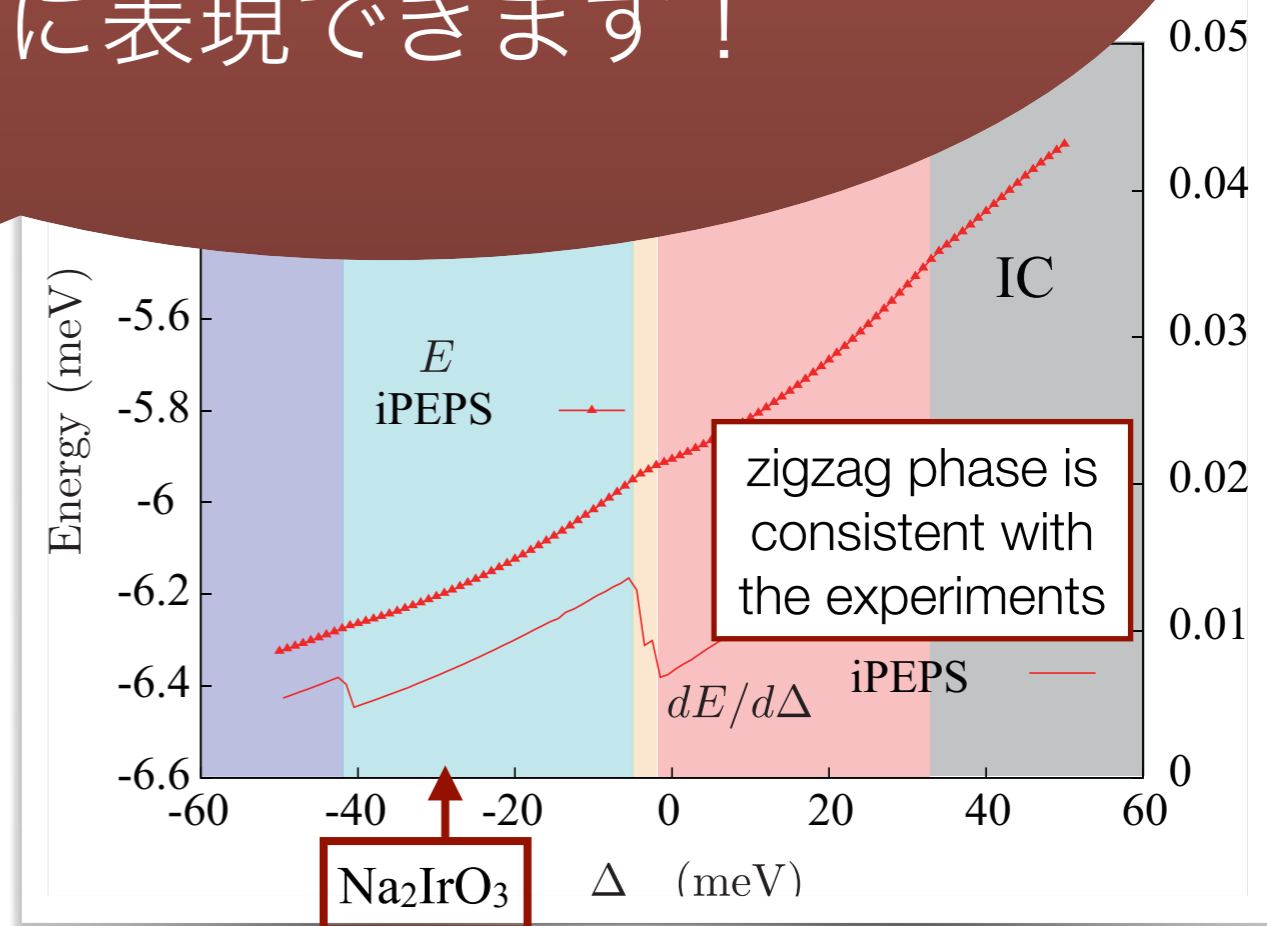
スピン液体は？

→キタエフスピン液体は

テンソルネットワークでコンパクト

に表現できます！

- キタエフ相互作用以外の相互作用の影響で、基底状態はスピン液体ではなく磁気秩序状態
- その場合、iTPSでの計算は、第一原理ハミルトニアンの基底状態を正しく実現できる

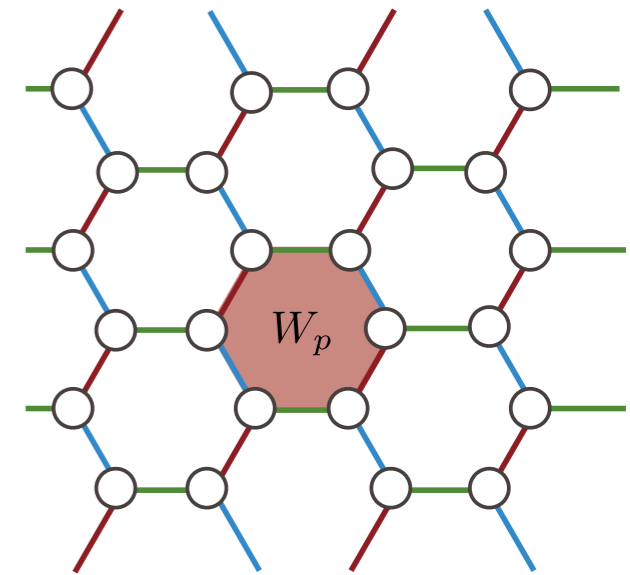
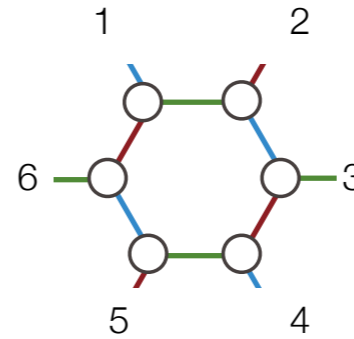


# キタエフ模型の保存量とテンソルネットワーク

フラックス演算子:  $W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z$

- 固有値は $\pm 1$
- ハミルトニアンと可換 = 保存量
- 異なる場所のフラックスも可換

$$[\mathcal{H}, W_p] = 0, [W_p, W_{p'}] = 0$$



★キタエフスピン液体は、全ての六角形でフラックスが1

"Vortex free"

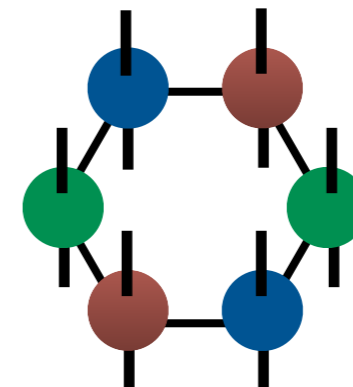
$W_i = 1$ への射影演算子? :

$$P_{i,+} = \frac{I + W_i}{2}$$

➡ この演算子は  $D=2$  のテンソルネットワークで表現できる

$$P_{i,+} = \text{Tr} (O_1^x O_2^y O_3^z O_4^x O_5^y O_6^z)$$

$$O_i^\alpha = \frac{1}{2^{1/6}} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \sigma_i^\alpha \end{pmatrix}$$



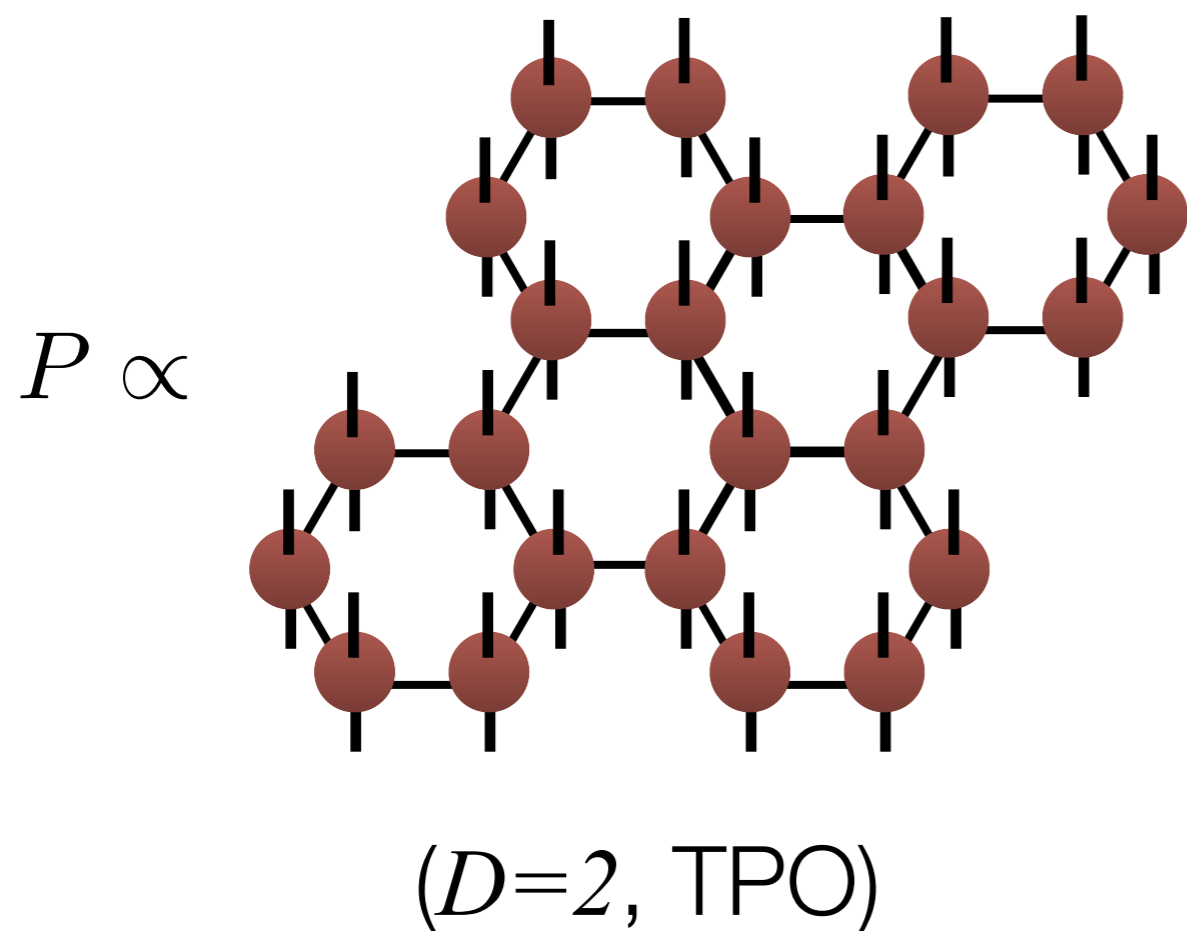


# Vortex free への射影演算子

H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019)

Vortex free 状態への射影演算子： $P = \prod_p \frac{I + W_p}{2}$

➡ "loop gas" 演算子で記述できる



$$Q_{ijk}^{ss'} = \text{diagram} \quad i, j, k = 0, 1$$

Non zero elements:

$$0 \text{---} 0 = I$$

$$0 \text{---} 1 = \sigma^x$$

$$1 \text{---} 1 = \sigma^y$$

$$1 \text{---} 0 = \sigma^z$$



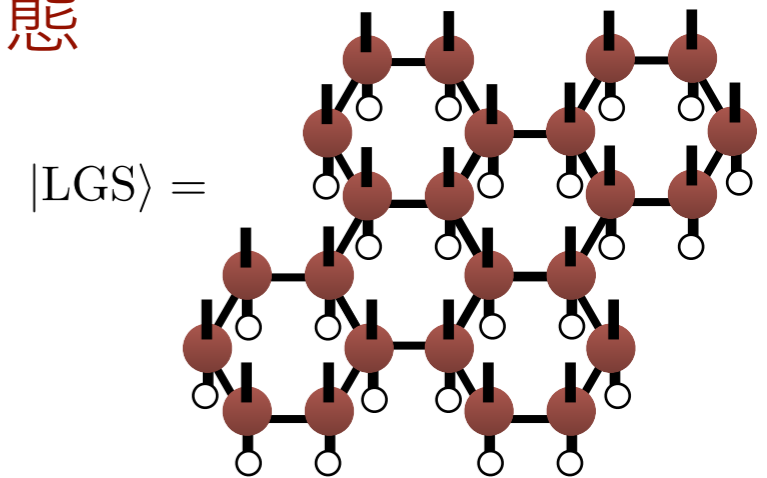
# Loop gas state (LGS) : ほぼキタエフスピン液体

H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL 123, 087203 (2019)

等方的なキタエフ模型に対応する単純なvortex free状態

$$|\text{LGS}\rangle = \hat{Q}_{LG} \prod_i \otimes |111\rangle_i$$

(1,1,1) 方向に揃った強磁性状態



$$D=2, \text{iTPS} \quad |111\rangle = \begin{array}{c} \uparrow \\ \circ \end{array}$$
$$\langle 111 | \sigma^\gamma | 111 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

対称性 :

Q と  $|111\rangle$  の対称性より LGS は

- 格子の並進
- $C_6$  格子の回転 (+ スピン回転)
- 反転 + 時間反転

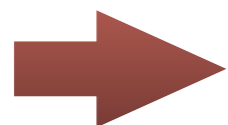
に関して対称

磁性 :

Vortex free 条件により、LGS は必ず非磁性

臨界性 :

波動関数の内積 =  $2d$  イジングの臨界普遍性を持つ分配関数と一致



LGSはキタエフスピン液体定性的に同じ状態！

Cf. ハルデン相に対するAKLT状態と類似の対応

# 局所励起による系統的な改善

$n$ 次のstring gas state (SGS) (H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019))

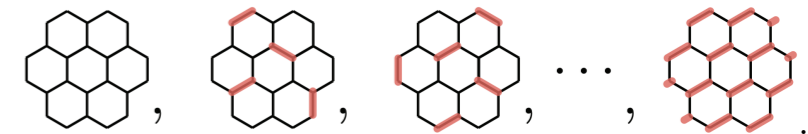
$$|\psi_n\rangle = \left[ \prod_i^n \hat{R}_{DG}(\phi_i) \right] |\text{LGS}\rangle$$

- $|\psi_n\rangle$  は  $D = 2^n$  iTPS.

	$ \psi_0\rangle =  \text{LGS}\rangle$	$ \psi_1\rangle$	$ \psi_2\rangle$	Exact
D	2	4	8	
# of	0	1	2	
E/J	-0.16349	-0.19643	-0.19681	-0.19682
$\Delta E/E_{\text{ex}}$	0.17	0.002	<b>0.00007</b>	-

$\{\phi_i\}$ : 変分パラメタ

$\hat{R}_{DG}$  は"局所" ダイマー励起を導入



— : local dimer  $S_i^\gamma S_j^\gamma$

$\phi_i$  determines density of the dimers

たった二つの変分パラメタで、非常に精密なエネルギーを得ることができる！

- 重要な長距離のエンタングルメントは (単純な) テンソルネットワークで表現できる。
- 短距離の相関を考えることでエネルギーは大幅に改善される。

# LGSの応用

H.-Y. Lee, R. Kanako, et al, Nat. Commun. **11**, 1639 (2020).

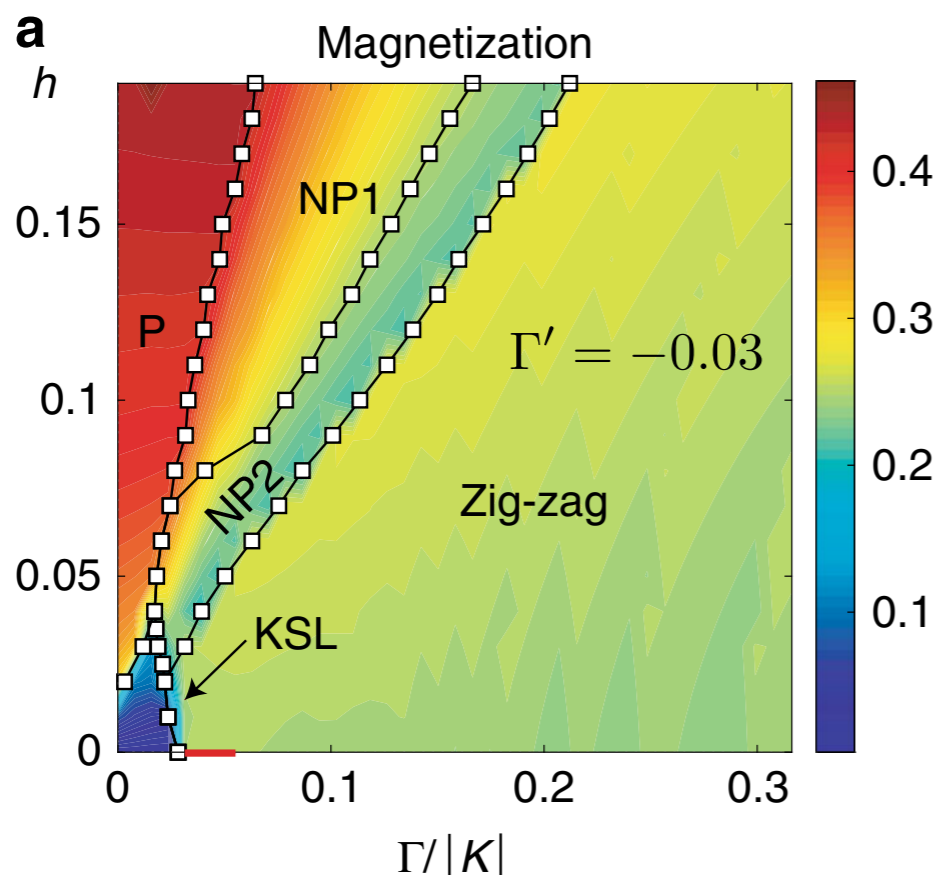
H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRB **101**, 035140 (2020)

## $K\Gamma\Gamma'$ model: $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub>の有効模型

$$\mathcal{H}_{ij}^z = K S_i^z S_j^z + \Gamma(S_i^x S_j^y + S_i^y S_j^x) + \Gamma'(S_i^z(S_j^x + S_j^y) + (S_i^x + S_i^y)S_j^z)$$

キタエフスピン液体“相”の決定と  
新しい非磁性相（ネマチック相）の発見

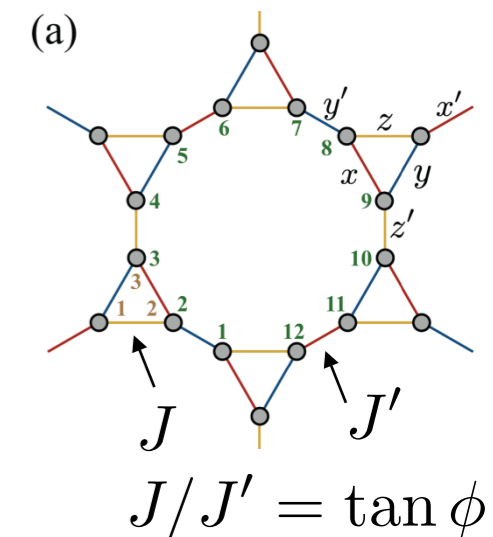
### 磁場中基底状態相図



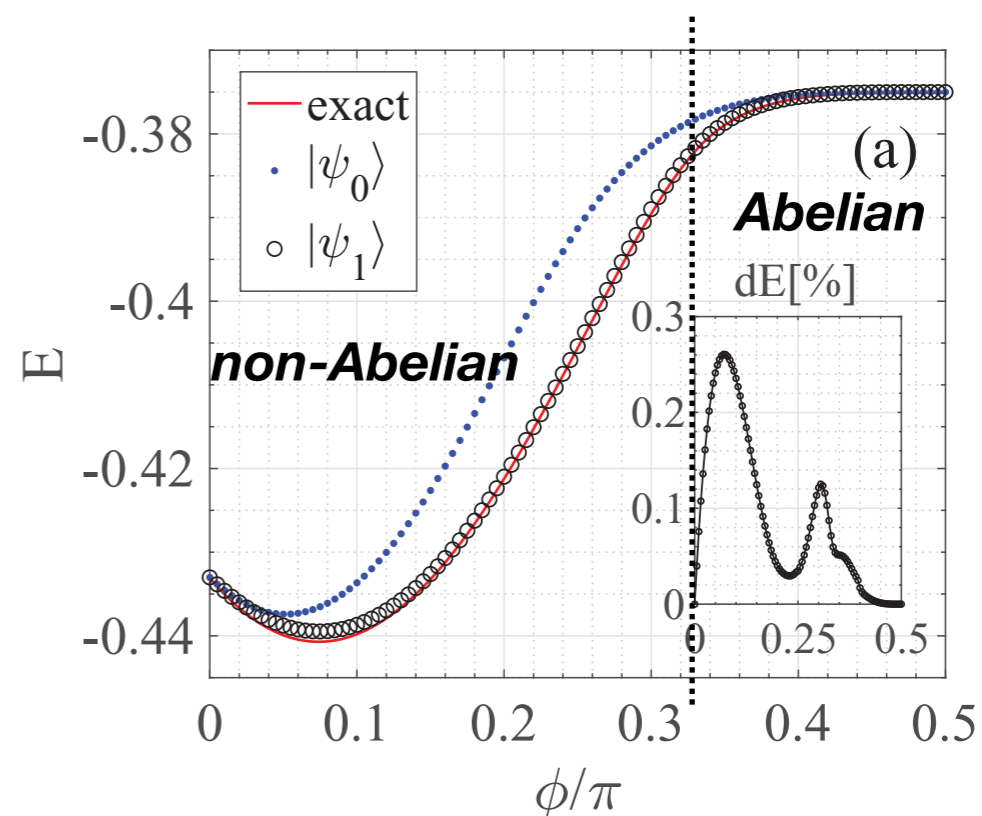
## スター格子キタエフ模型

## スター格子

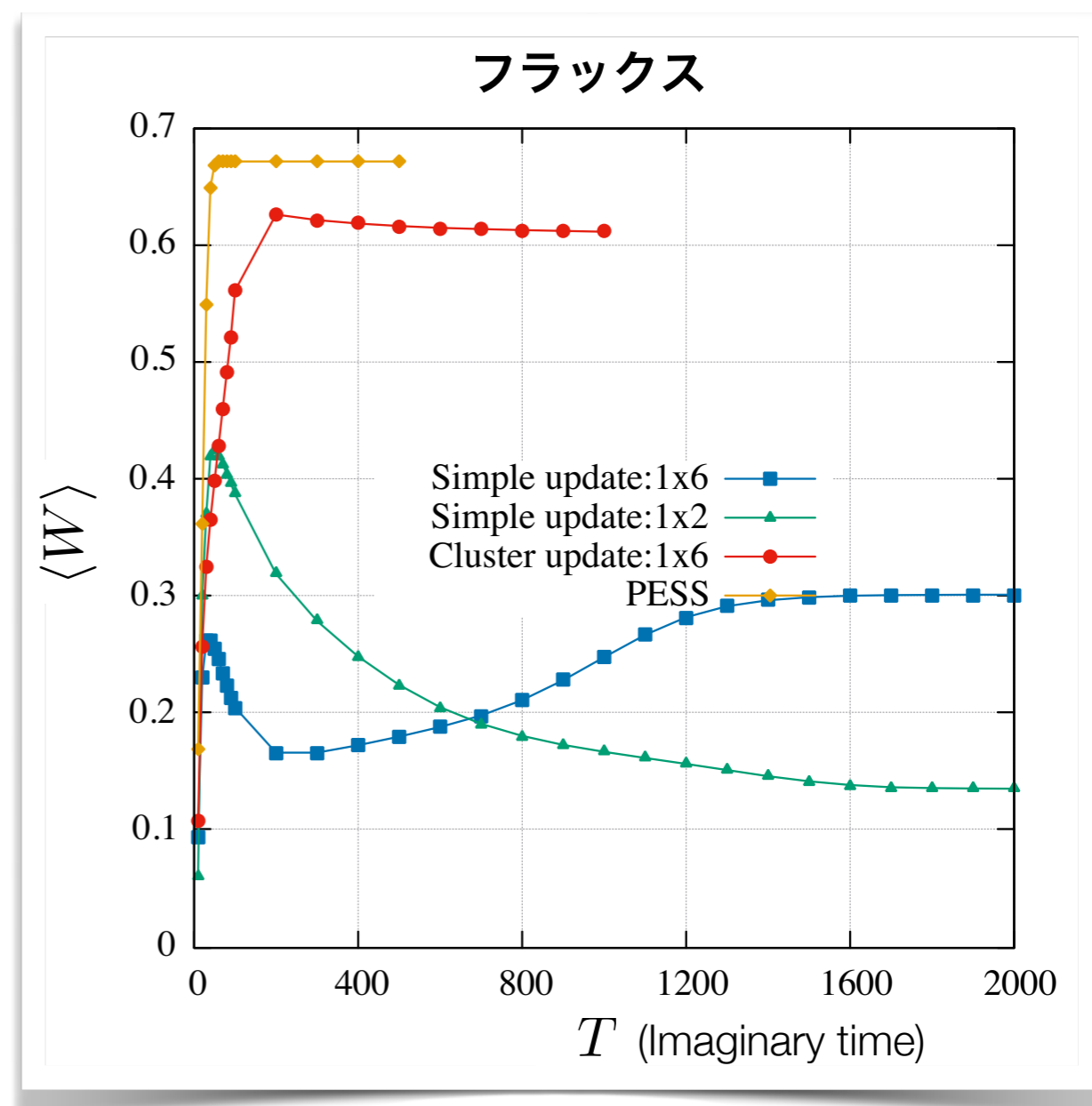
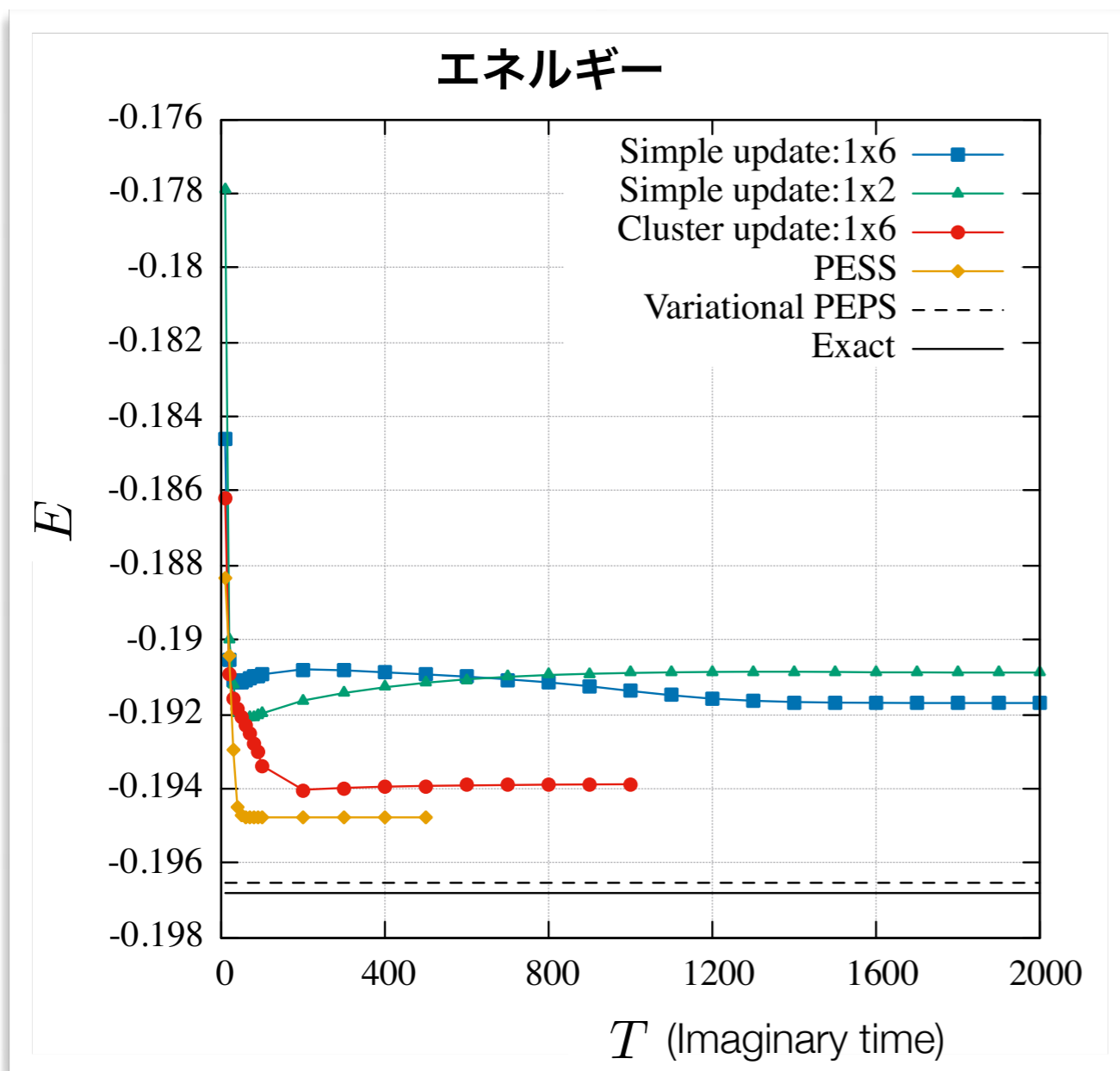
LGSと同種の表現で  
カイラルスピン液体を  
高精度に近似



### エネルギー



# (余談) 最適化によるKitaev スピン液体の研究



- 虚時間発展では、フラックスが局所解に引っかかる
- それに対応して、エネルギーが下がらない  
(Variational updateだとこの問題は改善する)

有限温度計算への展開

# 有限温度物性の計算

期待値

$$\langle \hat{O} \rangle_\beta = \text{Tr}[\rho(\beta)\hat{O}]$$

密度演算子  $\rho(\beta) = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta\mathcal{H}}$

分配関数  $\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}$

期待値をどう計算する？

1. ハミルトニアンに対角化:  $\langle \hat{O} \rangle_\beta = \frac{\sum_n \langle n | e^{-\beta E_n} \hat{O} | n \rangle}{\sum_n \langle n | e^{-\beta E_n} | n \rangle}$

- 次元が  $O(e^M)$  で大きくなるため、扱えるサイズが制限される

2. 量子モンテカルロ:

- 大きい系を扱えるが、符号問題のために、適用できる系が限られる

3. 密度演算子を近似する → テンソルネットワーク表現

(3.2 分配関数を近似計算する → テンソル繰り込み等)



# 密度行列のテンソルネットワーク表現

## 2種類のテンソルネットワーク表現が考えられる

1. 直接 TPO で表す (cf. A. Kshetrimayum et al, PRL **122**, 070502 (2019))

$$\rho(\beta) = \text{[Diagram: A solid green rectangle with 6 vertical red lines extending from its top and bottom edges]} \simeq \text{[Diagram: A horizontal blue line with 6 green circles on it, and 6 vertical red lines passing through each circle]}.$$

**Pros:** ・ アルゴリズムがシンプル

**Cons:** ・ 近似された密度演算子は負や複素数の固有値を含み得る  
・ Full update法を適用する場合、計算コストが増大

2. 局所的な純粋化 (cf. Czarnik et al, PRB **99**, 035115 (2019))

$$\rho(\beta) = \text{[Diagram: A green rectangle with two rows. The top row is labeled } |\psi(\beta)\rangle \text{ and the bottom row is labeled } \langle\psi(\beta)| \text{. Vertical lines connect the two rows. To the right of the rectangle is the word 'ancilla'. There are 6 vertical red lines extending from the top and bottom edges of the rectangle.]} \simeq \text{[Diagram: A horizontal blue line with 6 green circles on it, and 6 vertical red lines passing through each circle, with a second horizontal blue line below it, also with 6 green circles, and 6 vertical red lines passing through each circle.]}.$$

**Pros:** ・ 近似された密度行列は半正定値性が保証される

**Cons:** ・ Ancilla 自由度の最適化が複雑  
・ 直接表現に比べてボンド次元が大きくなる可能性

# 密度行列のテンソルネットワーク表現

## 2種類のテンソルネットワーク表現が考えられる

### 1. 直接 TPO で表す

(cf. A. Kshetrimayum et al, PRL **122**, 070502 (2019))

$$\rho(\beta) = \text{[Diagram: A solid green rectangle with 6 vertical red lines extending from its top and bottom edges]} \simeq \text{[Diagram: A horizontal blue line with 6 green circles on it, each connected to a vertical red line]} \quad \text{今日はこっち}$$

**Pros:** ・ アルゴリズムがシンプル

**Cons:** ・ 近似された密度演算子は負や複素数の固有値を含み得る  
・ Full update法を適用する場合、計算コストが増大

### 2. 局所的な純粋化

(cf. Czarnik et al, PRB **99**, 035115 (2019))

$$\rho(\beta) = \text{[Diagram: A green rectangle with two rows labeled } |\psi(\beta)\rangle \text{ and } \langle\psi(\beta)| \text{, and 6 vertical red lines extending from its top and bottom edges, with the word 'ancilla' to the right]} \simeq \text{[Diagram: A horizontal blue line with 6 green circles on it, each connected to a vertical red line]} \quad \text{[Diagram: A second horizontal blue line with 6 green circles on it, each connected to a vertical red line]}$$

**Pros:** ・ 近似された密度行列は半正定値性が保証される

**Cons:** ・ Ancilla 自由度の最適化が複雑  
・ 直接表現に比べてボンド次元が大きくなる可能性

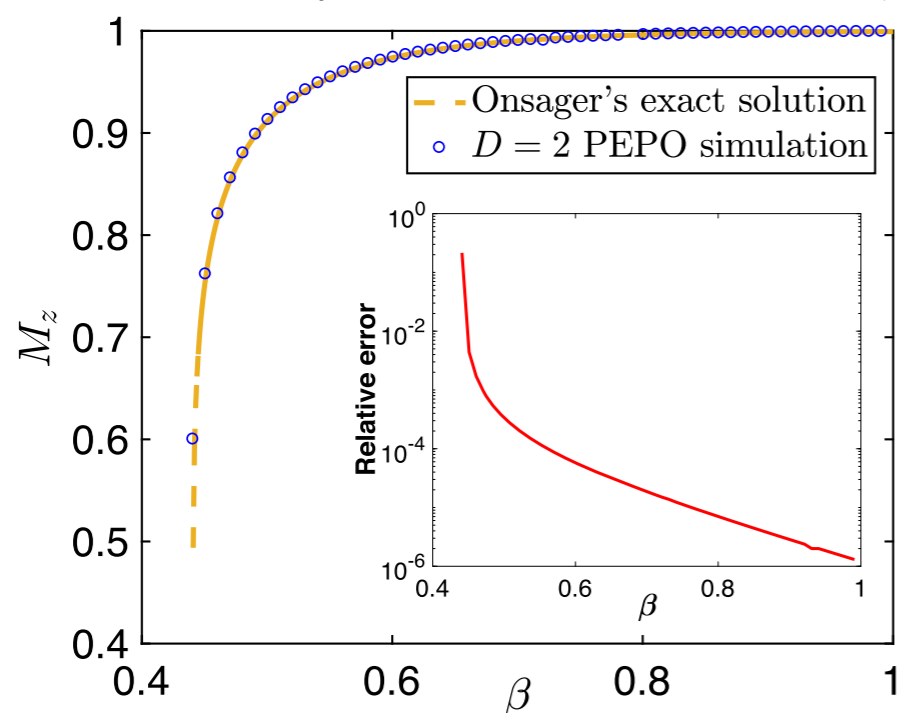
Gemma De las Cuevas et al, New J. Phys. **15**, 123021 (2014)

# (簡単な) 二次元無限系への適用例

どちらの方法も、ベンチマーク計算ではそれなりに上手くいく

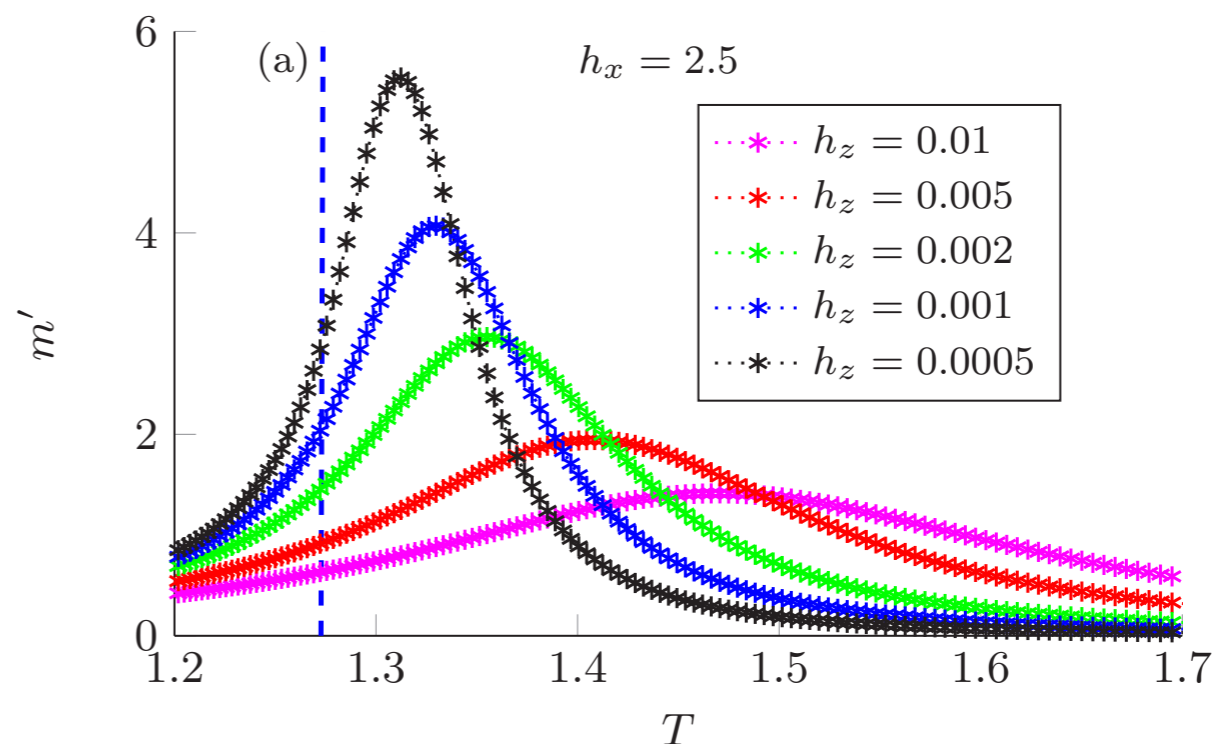
## イジング模型

A. Kshetrimayum et al, PRL **122**, 070502 (2019)



## 横磁場イジング模型

P. Czarnik et al, PRB **99**, 035115 (2019)



➡ “難しい”模型への適用はどうだろうか？

Target: **キタエフ模型**の有限温度物性

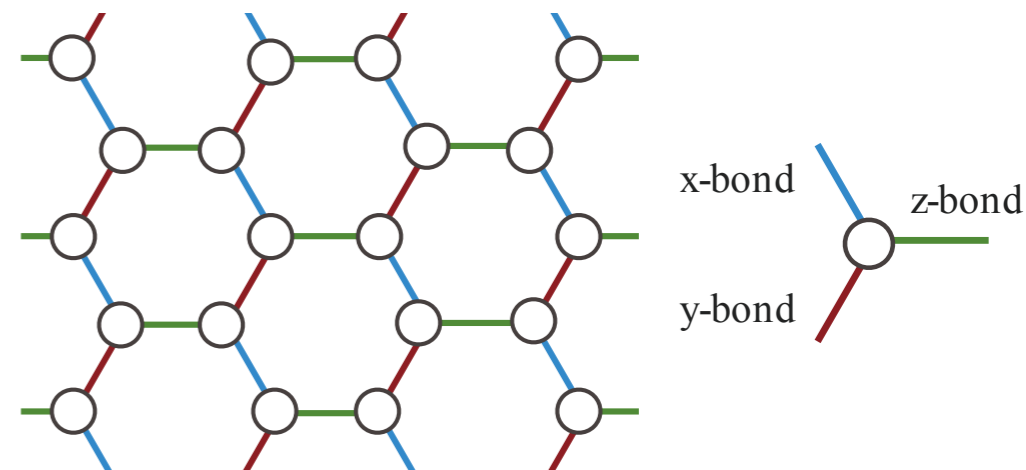
# Target: ハニカム格子キタエフ模型

## キタエフ模型

A. Kitaev, Annals of Physics 321, 2 (2006)

$$\mathcal{H} = -K \sum_{\gamma, \langle i, j \rangle_{\gamma}} S_i^{\gamma} S_j^{\gamma} \quad \gamma: \text{相互作用の方向}$$

$$\left( S = \frac{1}{2} \right)$$



- 基底状態は gapless の **スピン液体**  
この状態は Vortex free 条件を満たす

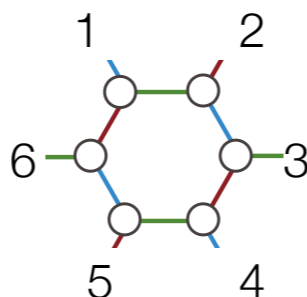
$$\nabla_p W_p = 1$$

$p$ : plaquette

フラックス:  $W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z$

$$[\mathcal{H}, W_p] = 0, [W_p, W'_p] = 0$$

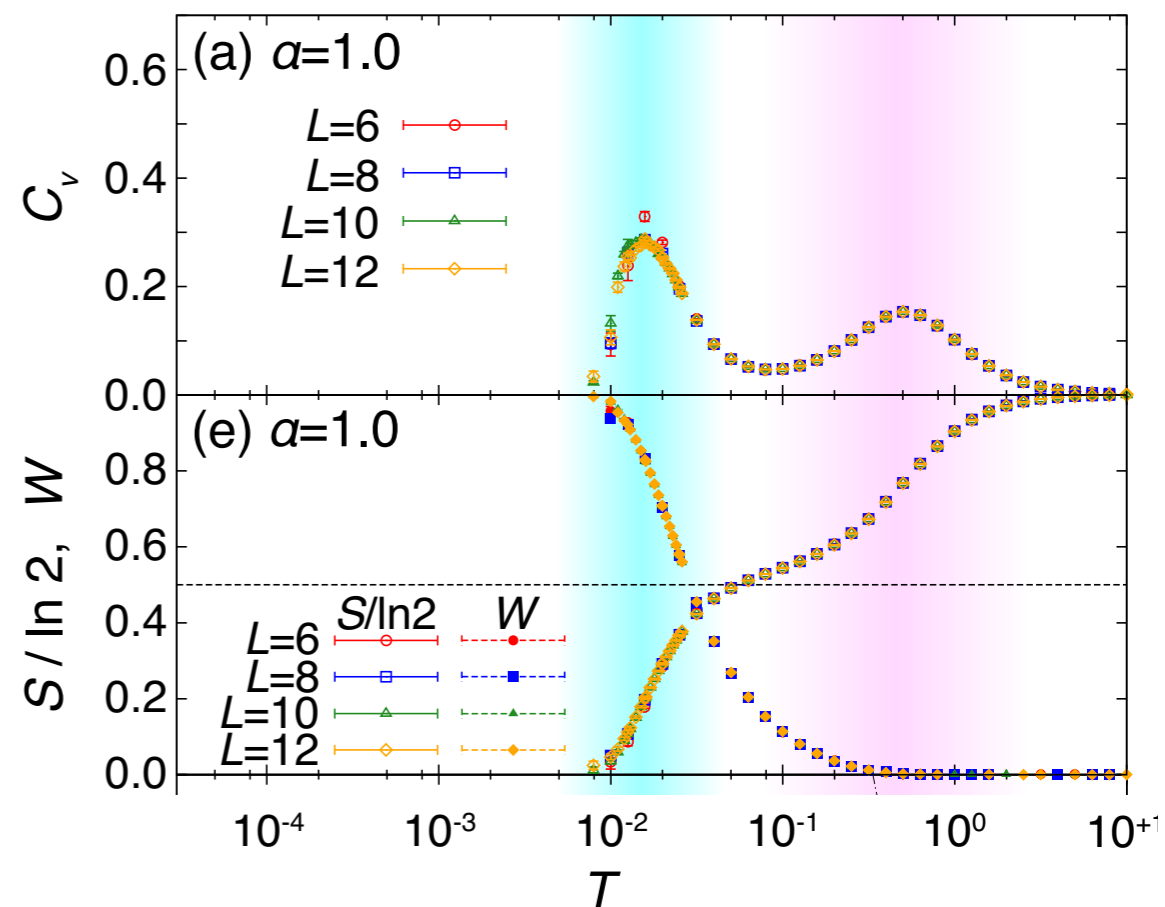
(cf. H.-Y. Lee, et al, PRL (2019))



- 有限温度では **比熱** に **二つのピーク** が現れる  
低温のピークは **フラックス** の成長に対応

**この振る舞いを iTPO で再現できるか？**

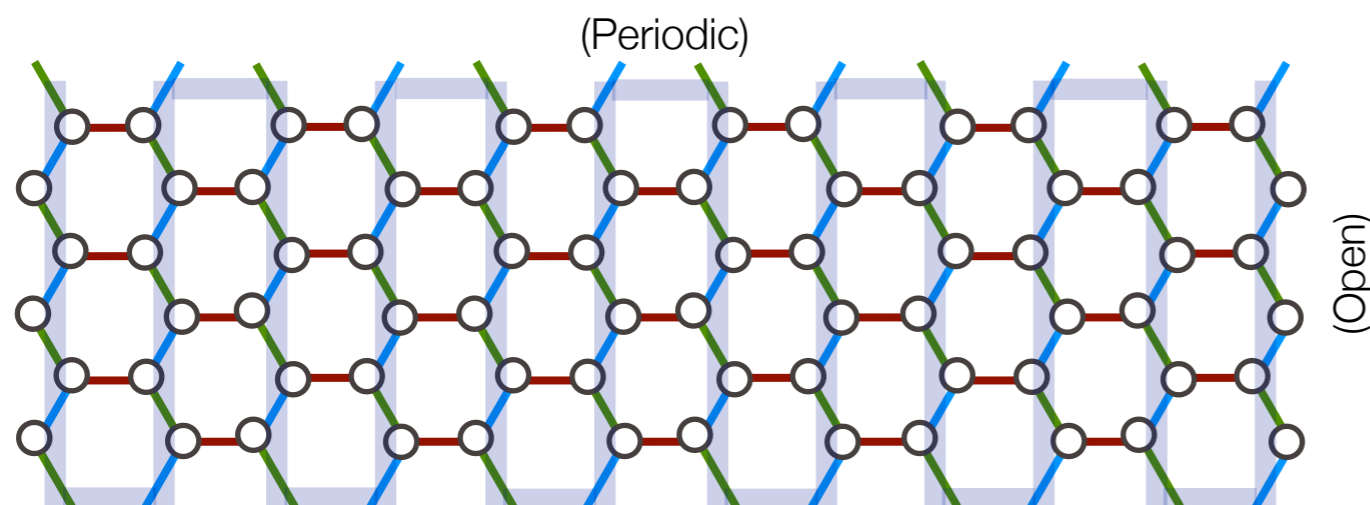
J. Nasu et al PRB **92**, 115122 (2015) (QMC)



# (余談) MPOによる有限系の計算

擬一次元の有限サイズクラスーでは、TPOではなく

Matrix product operator (MPO)も使える

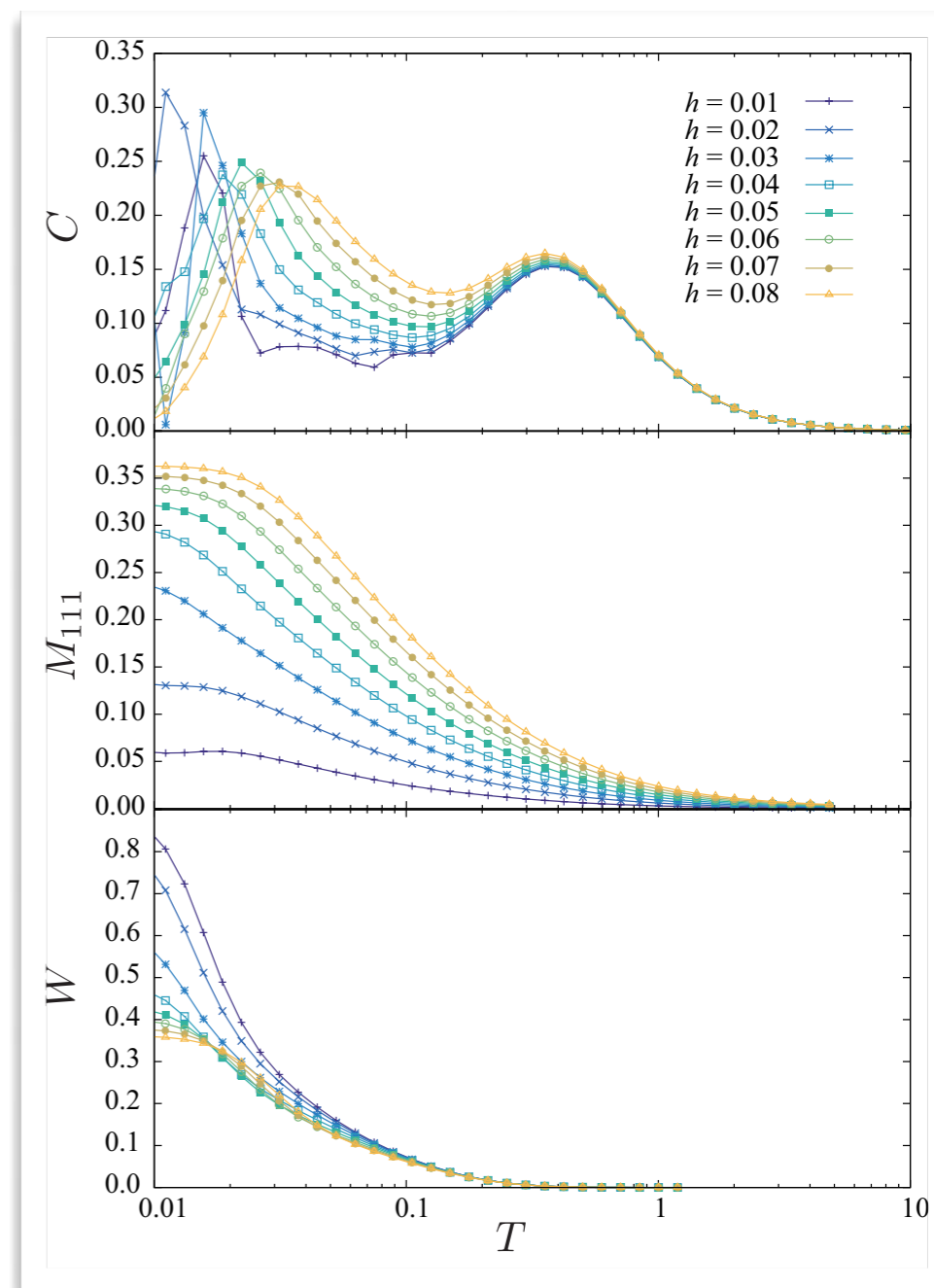


この場合、MPOの“カノニカル形式”  
のおかげで高精度計算ができる

(cf. H. Li *et al.*, PRR 2, 043015 (2020))

しかし、真の二次元系 (特に無限系)

の計算はMPOでは困難



(T. Okubo, J. Nasu, T. Misawa,  
and Y. Motome, in preparation)

# 手法：iTPO

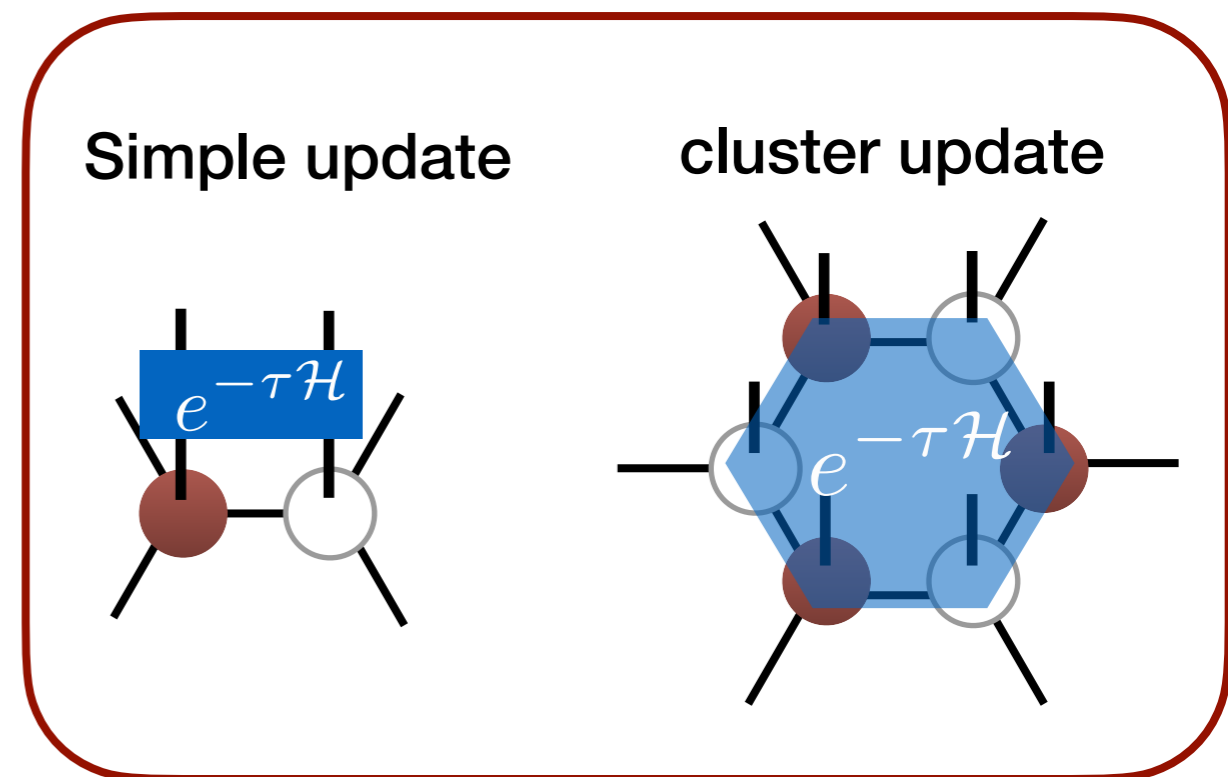
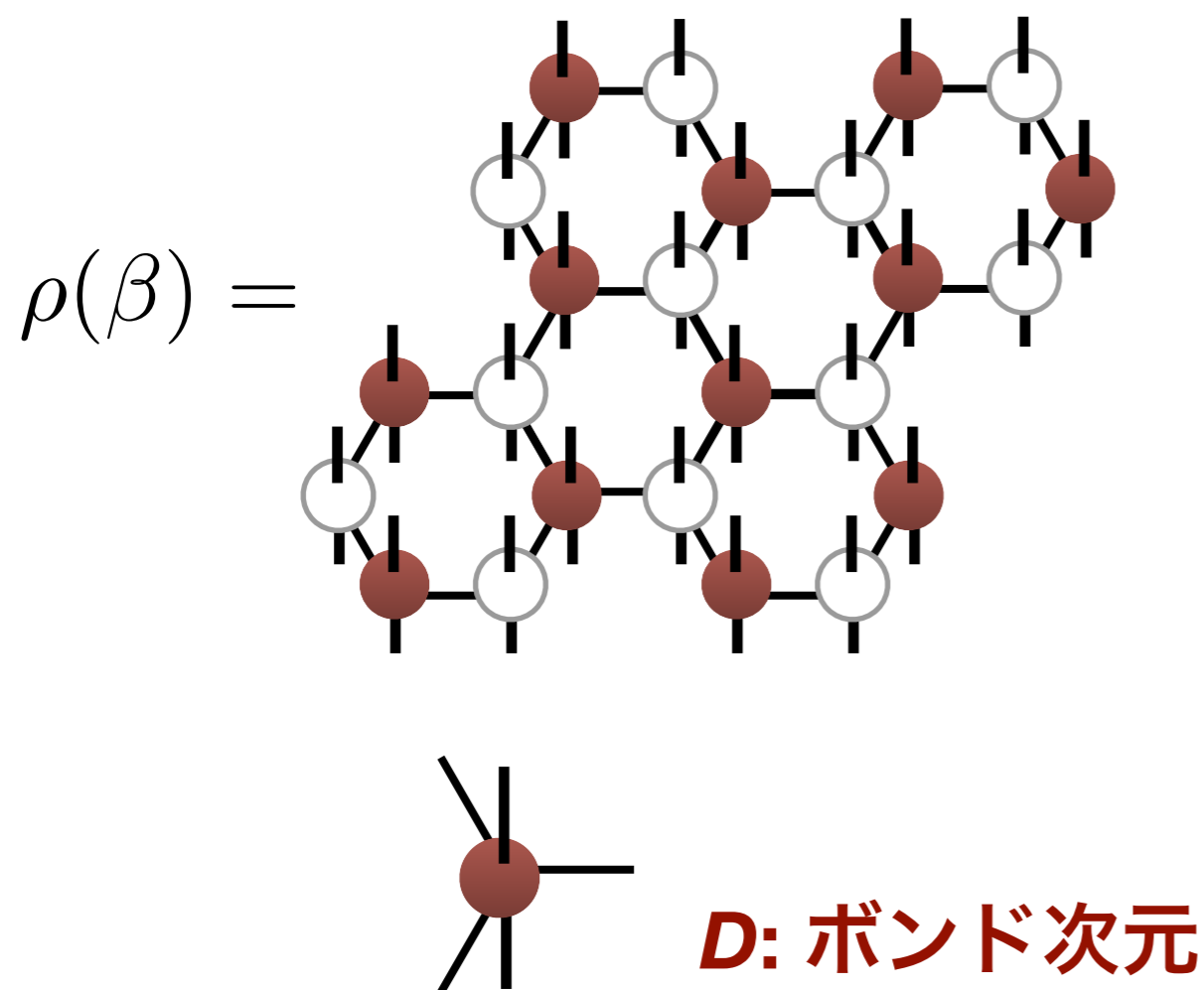
- **Infinite TPO**

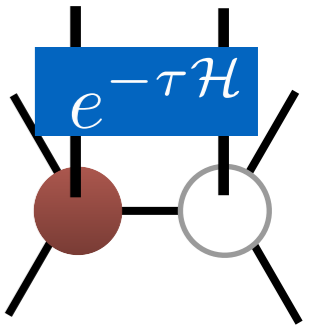
- 最適化：虚時間発展 + Suzuki-Trotter decomposition

- **simple update**  $\rho(\beta) = e^{-\frac{\beta}{2}\mathcal{H}} \rho(0) e^{-\frac{\beta}{2}\mathcal{H}}$

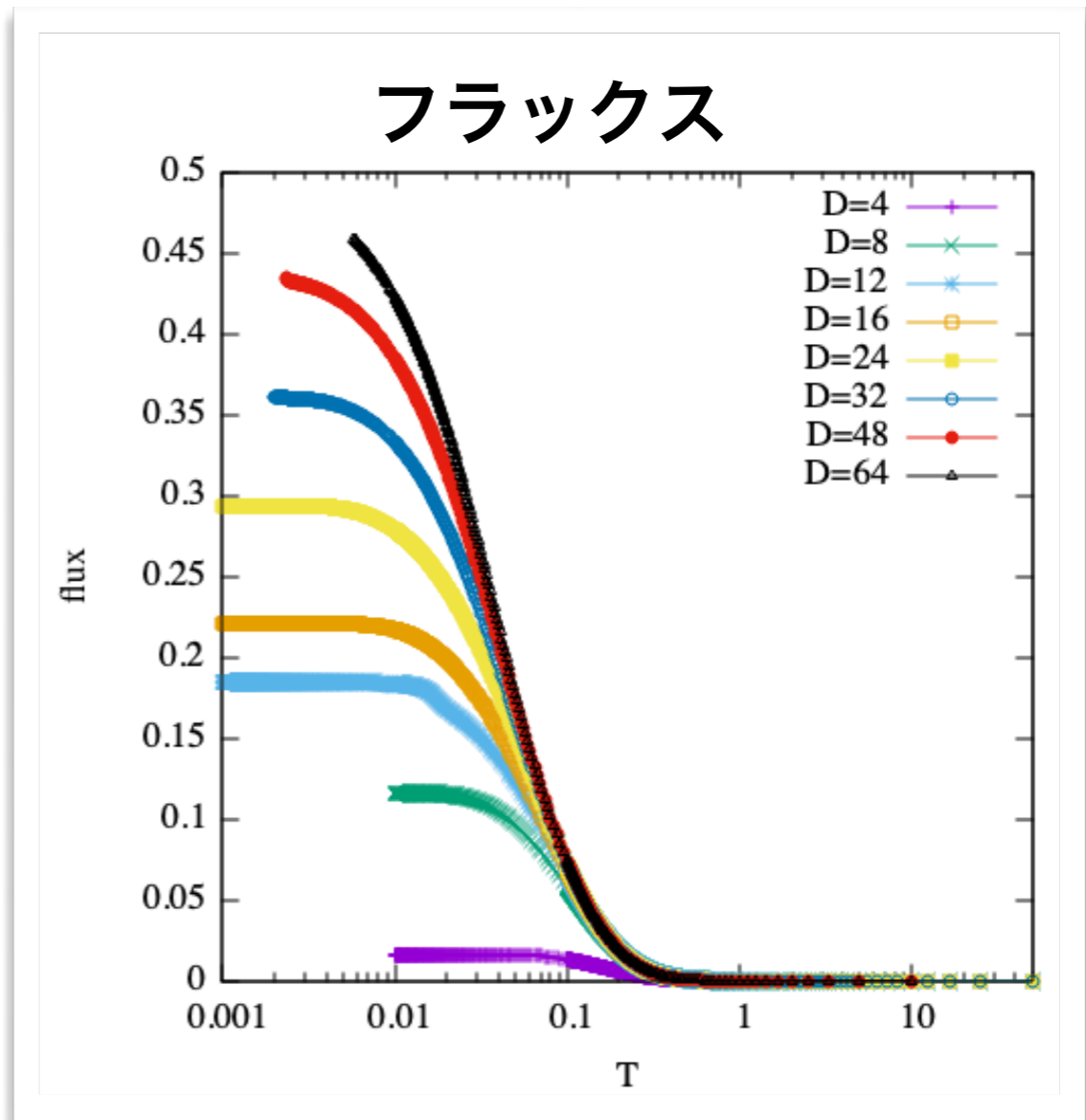
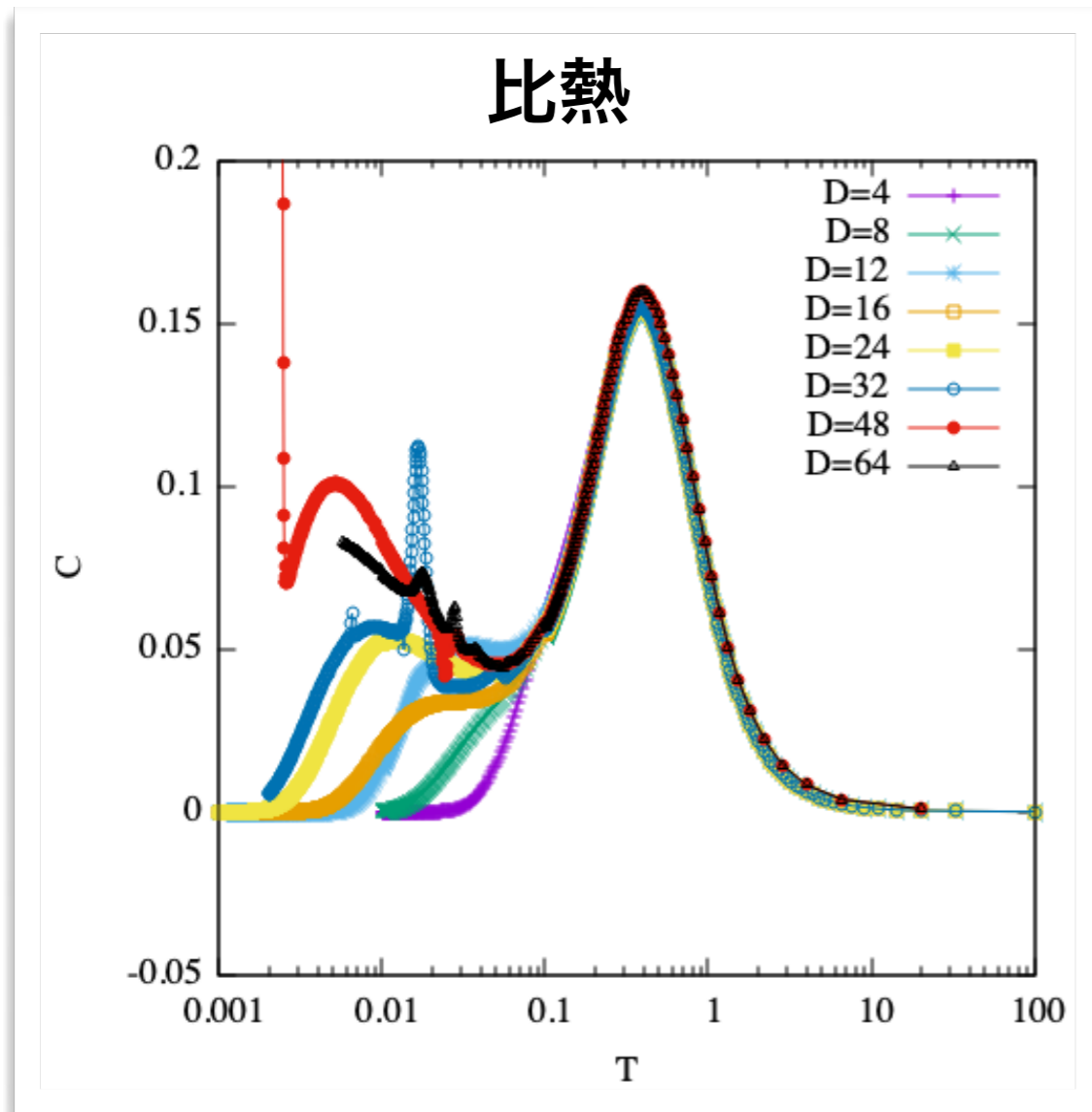
- cluster update

- 物理量計算 (TNの縮約) : **Corner Transfer Matrix method.**





# 結果：比熱とフラックス

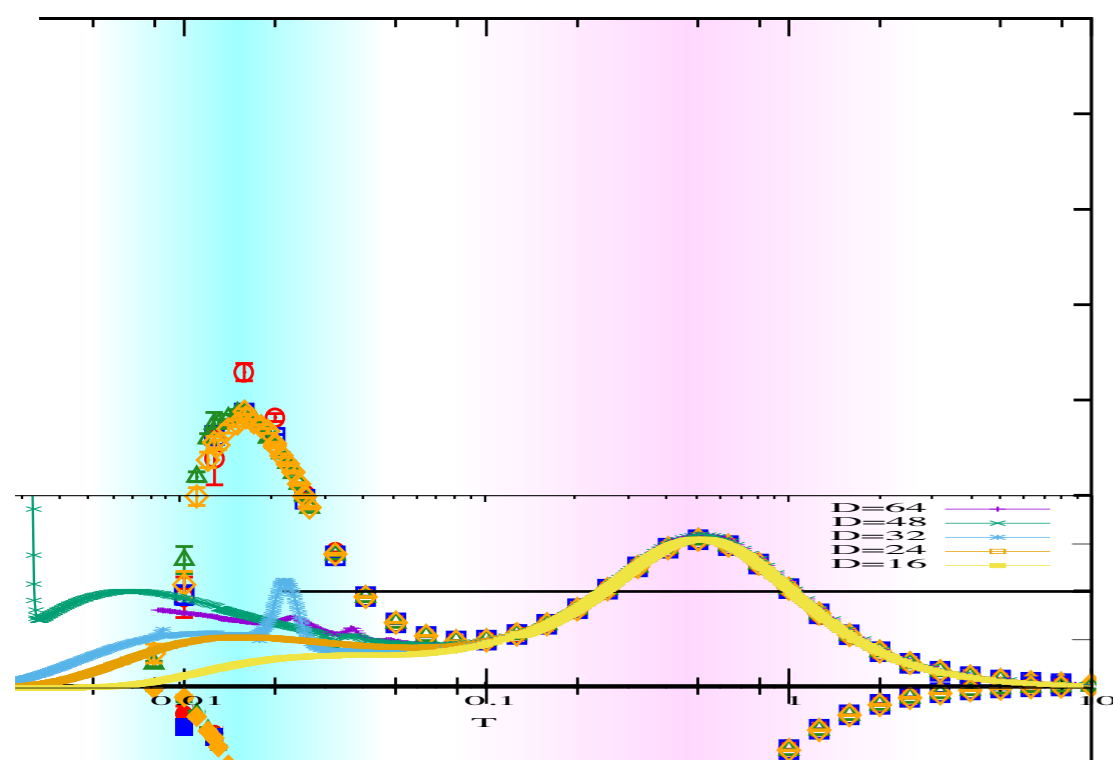


- 小さな $D$  では比熱のダブルピーク構造は見られない
- $D$  の増大で、低温のピークが再現できる
  - このピークはフラックスの増大と関係している

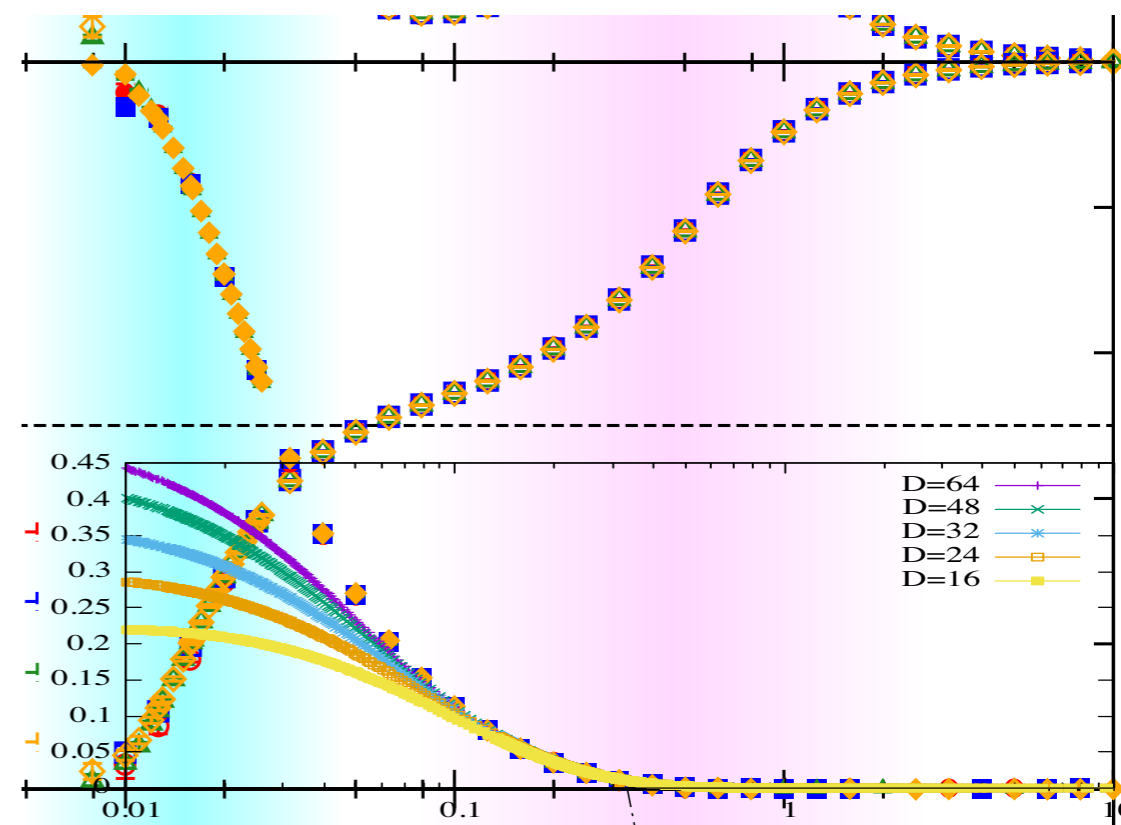
# QMCとiTPOの比較

J. Nasu et al PRB 92, 115122 (2015) (QMC)

## 比熱



## フラックス

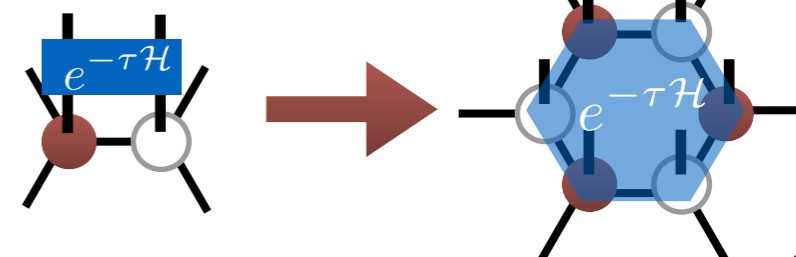


QMCと比較すると、 $T < 0.1$ の領域でiTPOには定量的に大きなズレが存在→フラックスが十分に成長していない

このズレの起源は、simple update法の精度

**Q.** 改善できる？

**A.** Cluster update!

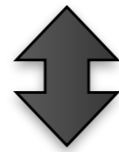




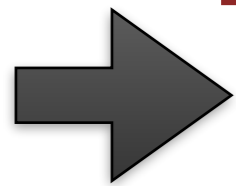
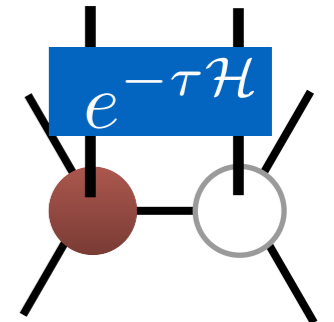
# Loop cluster update (純粋状態の場合)

フラックスを適切に再現するには？

六角形内の相関が重要



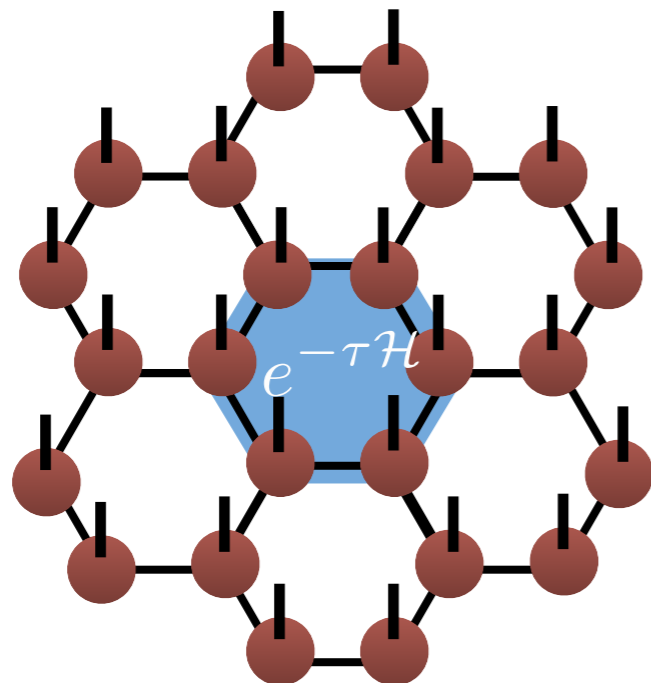
Simple update: 2サイトのみが同時updateされる



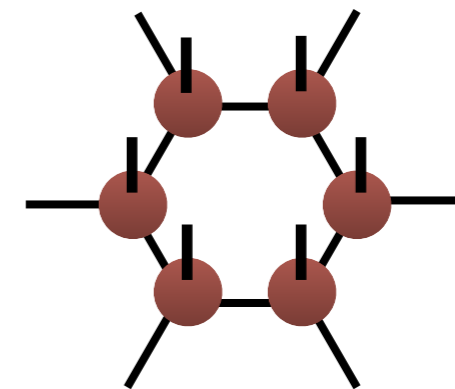
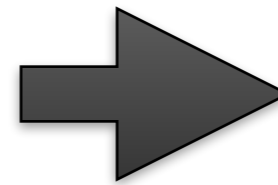
★多体相関をより取り込んだupdateをするべき

六角形に対する虚時間発展

(c.f Kagome lattice, Nat. Commun. 10, 1229 (2019))

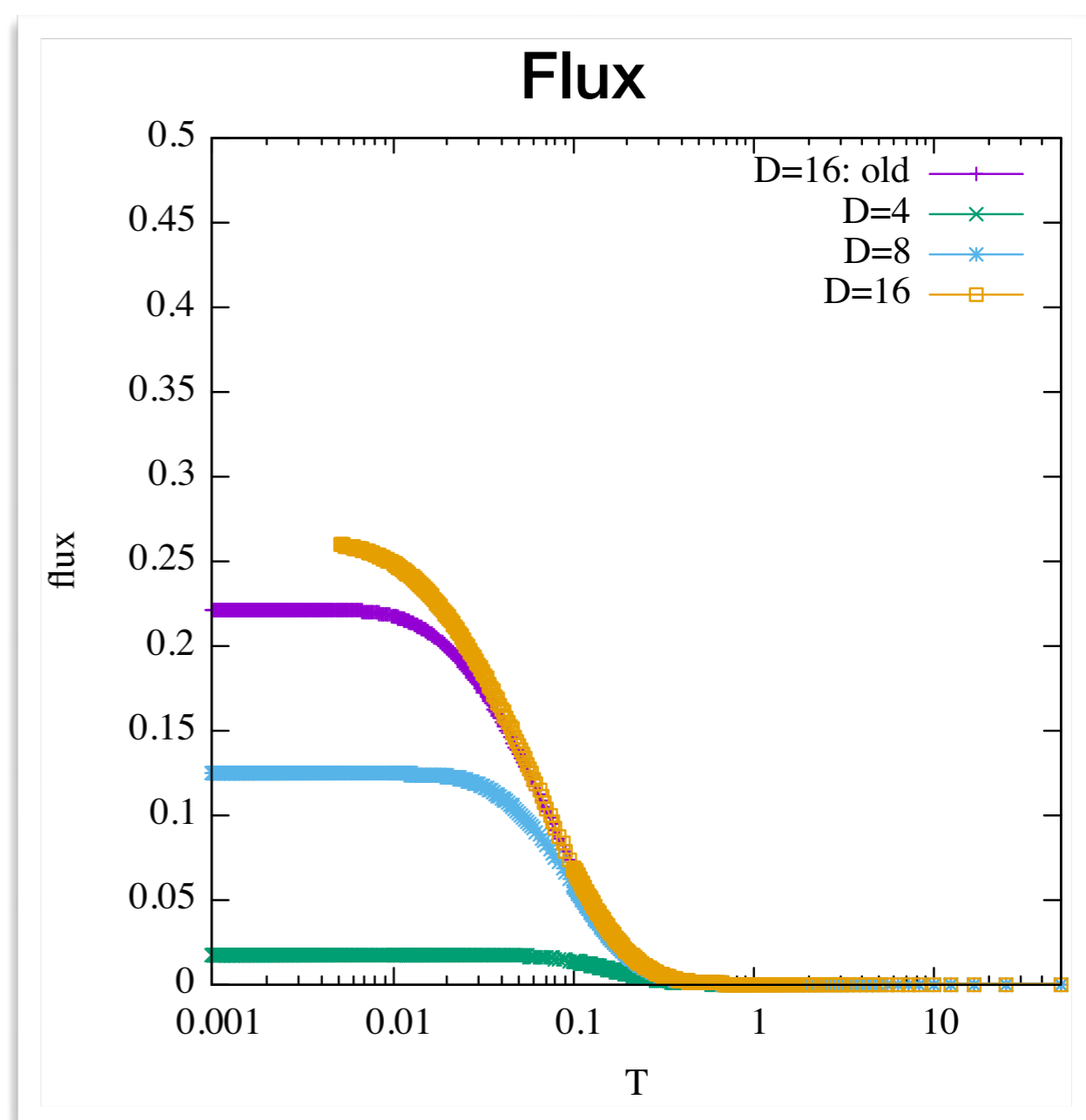
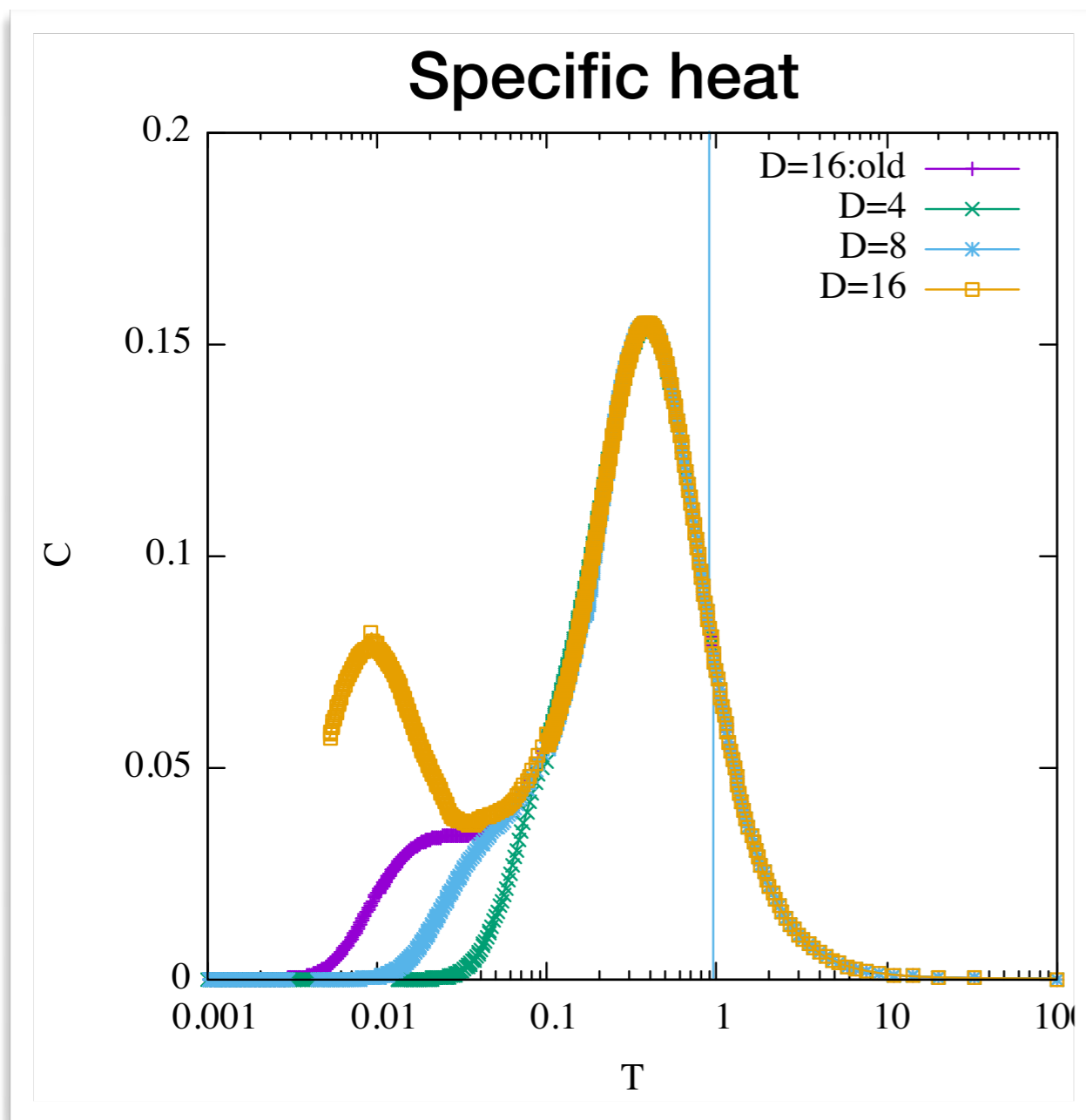
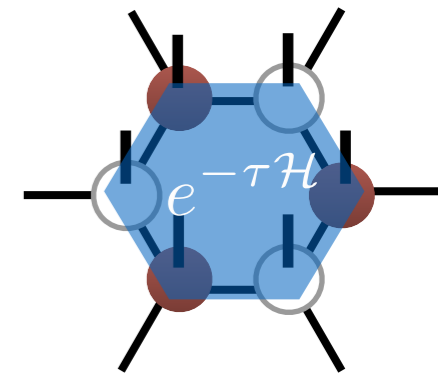


6つのテンソルを  
同時にupdate



- \* Simple update よりは計算コストが大きい
- \* 全体の縮約よりは計算コストは小さい

# Cluster updateによる改善



- Cluster updateにより低温のピークがより明確に



最適化の改善により、より高精度の計算が可能に

# Γ 模型への適用 (Tentative)

## Γ model

- A. Catuneanu et al, npj. Q. Mat. **3**, 23 (2018).
- M. Gohlke et al, Phys. Rev. B **97** 075126 (2018).
- M. Gohlke et al, arXiv: 2003.11876

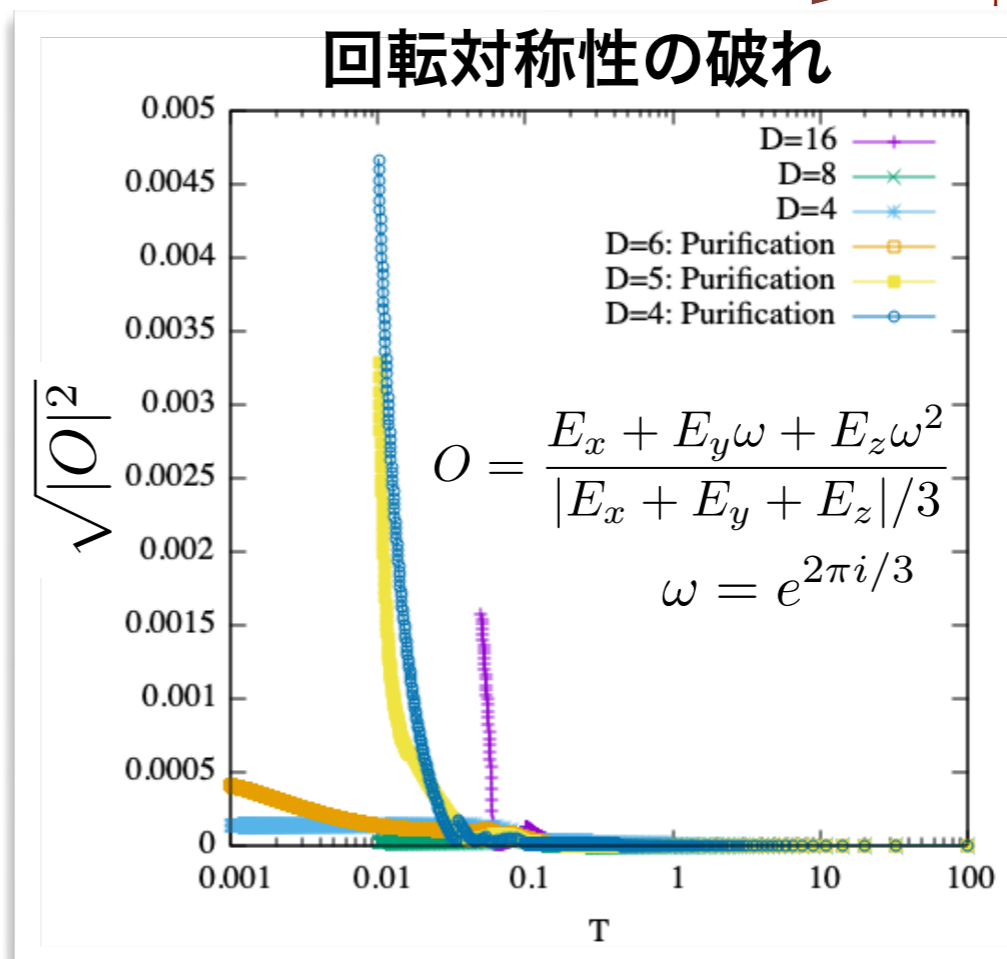
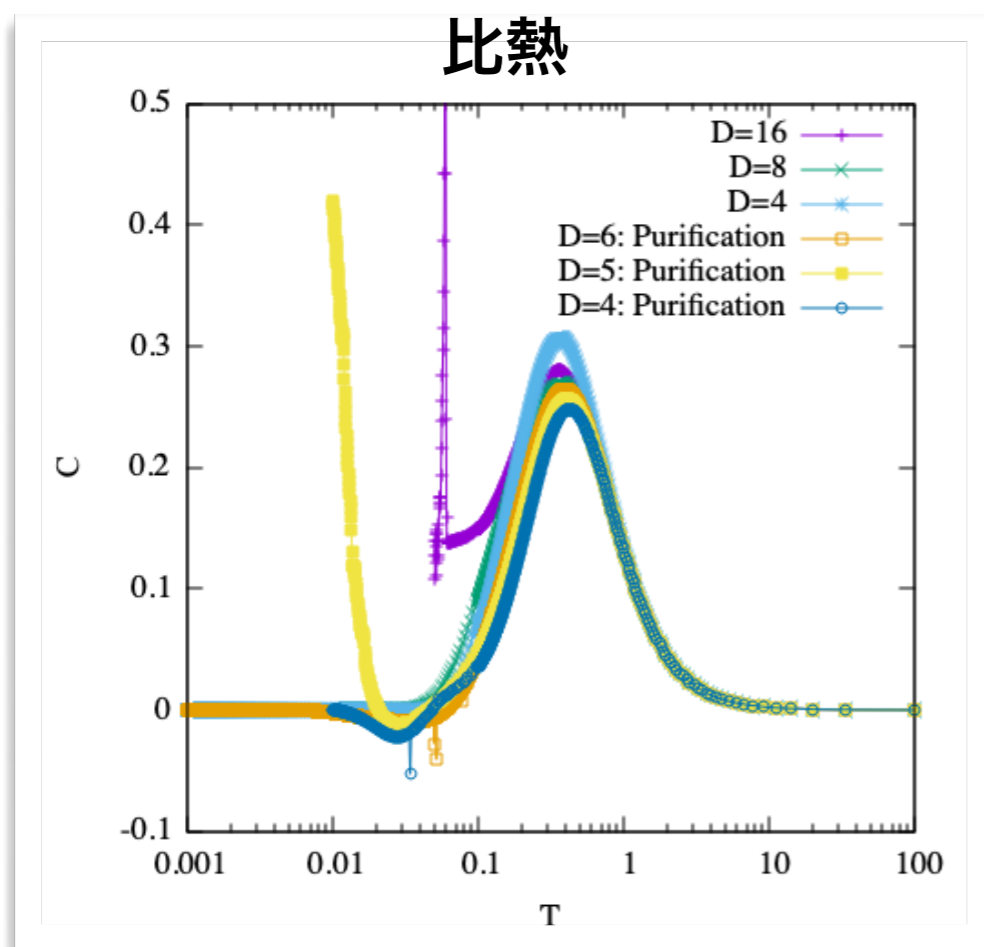
$$\mathcal{H} = \Gamma \sum_{\gamma=x,y,z} \mathcal{H}_\gamma \quad \mathcal{H}_z = \sum_{\langle i,j \rangle_z} (S_i^x S_j^y + S_i^y S_j^x)$$

## 基底状態の候補

- Spin liquid
- Nematic Paramagnet
- Zigzag

格子の回転対称性が破れている

有限温度相転移?

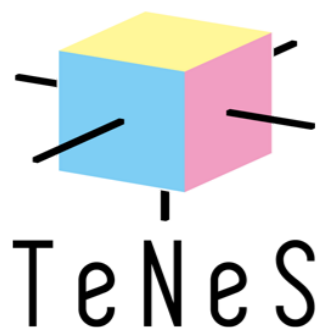


- 大きな $D$ で相転移のような異常が観測された
- 対応して、格子の回転対称性が低温で破れている

# まとめ

---

- 無限系のテンソルネットワーク状態を使って二次元の量子多体系を計算する手法が発展してきている
  - 特に、符号問題が生じるフラストレート磁性体に対して強力
- iTPS (iPEPS) による、キタエフスピン液体近傍の量子状態の解析
  - 複雑な磁気秩序でも表現可能であり、実験とも比較できる
  - スピン液体状態を定性的に正しく表現するiTPSを直接書き下すこともできる
  - それを初期状態として、複雑な相図も描ける
- 同様の手法を有限温度の計算にも拡張できる
  - 密度行列をテンソル積演算子 (TPO/PEPO) で近似
  - キタエフスピン液体への適用では、低温で虚時間発展の精度が課題
  - クラスタを考慮することにより、精度を改善可能



<https://github.com/issp-center-dev/TeNeS>

Y. Motoyama, T. Okubo, et al., Comput. Phys. Commun. 279, 108437 (2022).

iTPS/iTPOによる2次元量子系の基底状態・有限温度・実  
時間発展の計算