

テンソルネットワーク法を用いたキタエフスピニ液体の研究

東大理, 大久保毅

共同研究者 : *Korea Univ.* H.-Y. Lee,
Kinki Univ. R. Kaneko
ISSP N. Kawashima,

Ref:

- T.O. *et al*, Phys. Rev. B **96**, 054434 (2017).
- H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019), PRB **101**, 035140 (2020).

コンテンツ

- ・ はじめに
- ・ 量子多体状態のテンソルネットワーク表現
- ・ ハニカム格子キタエフ模型
- ・ ギャップレスキタエフスピニ液体のテンソルネットワーク状態
- ・ テンソルネットワークによる有限温度シミュレーション
- ・ まとめ

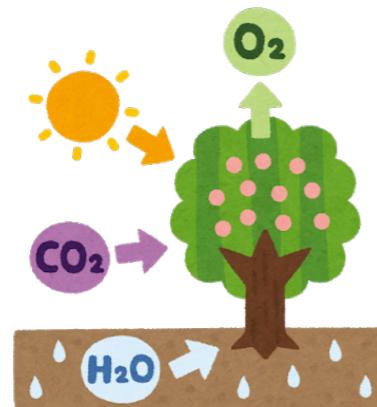
コンテンツ

- ・ はじめに
- ・ 量子多体状態のテンソルネットワーク表現
- ・ ハニカム格子キタエフ模型
- ・ ギャップレスキタエフスピニ液体のテンソルネットワーク状態
- ・ テンソルネットワークによる有限温度シミュレーション
- ・ まとめ

量子多体問題

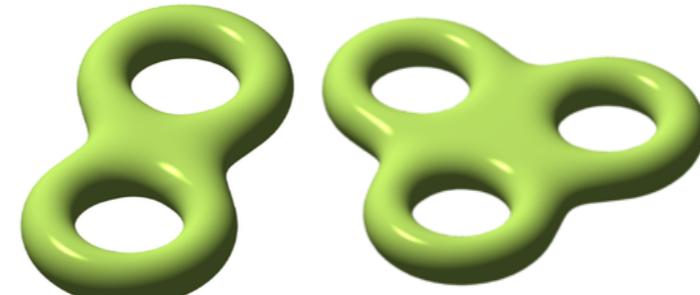
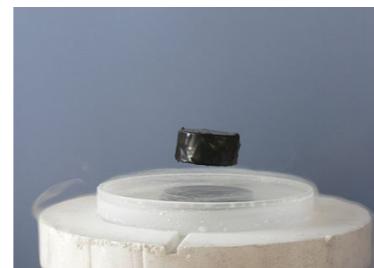
物質科学における多彩な現象

- ・ 化学反応
- ・ 超伝導
- ・ トポロジカル状態
- ・ ...



多数の"粒子"が量子力学に従って"運動"

量子多体問題



wikipedia"マイスナー効果", "トーラス"より

量子力学の支配方程式=シュレディンガーアルゴリズム

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \mathcal{H} |\Psi\rangle \quad \begin{array}{l} \mathcal{H} : \text{ハミルトニアン} \\ |\Psi\rangle : \text{状態ベクトル} \end{array}$$



時間に依存
しない場合

$$\mathcal{H} |\Psi\rangle = \underline{E} |\Psi\rangle$$

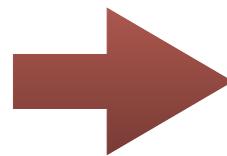
エネルギー

= 固有値問題

量子多体問題の困難

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

- ベクトル空間の次元は"粒子数"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

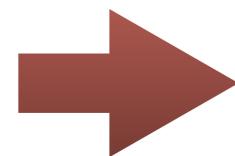


古典的な計算機でこの問題を（厳密に）解くには、
膨大なメモリと計算時間が必要

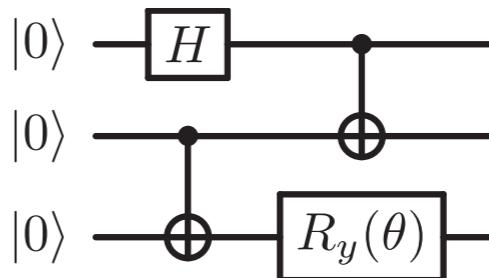
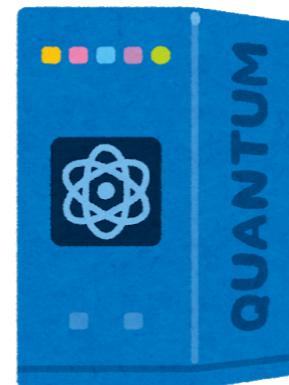
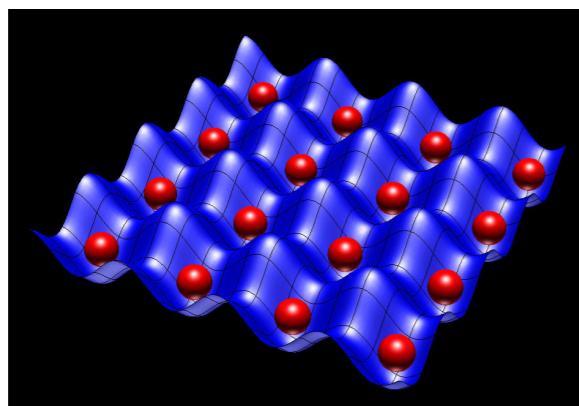
例：量子ビットの厳密シミュレーションは50 qubit程度が限界

制御された量子系：

- 量子シミュレータ
- 万力量子コンピュータ



量子多体系の情報をそのまま扱え、
(理想的には) 指数関数の困難はない



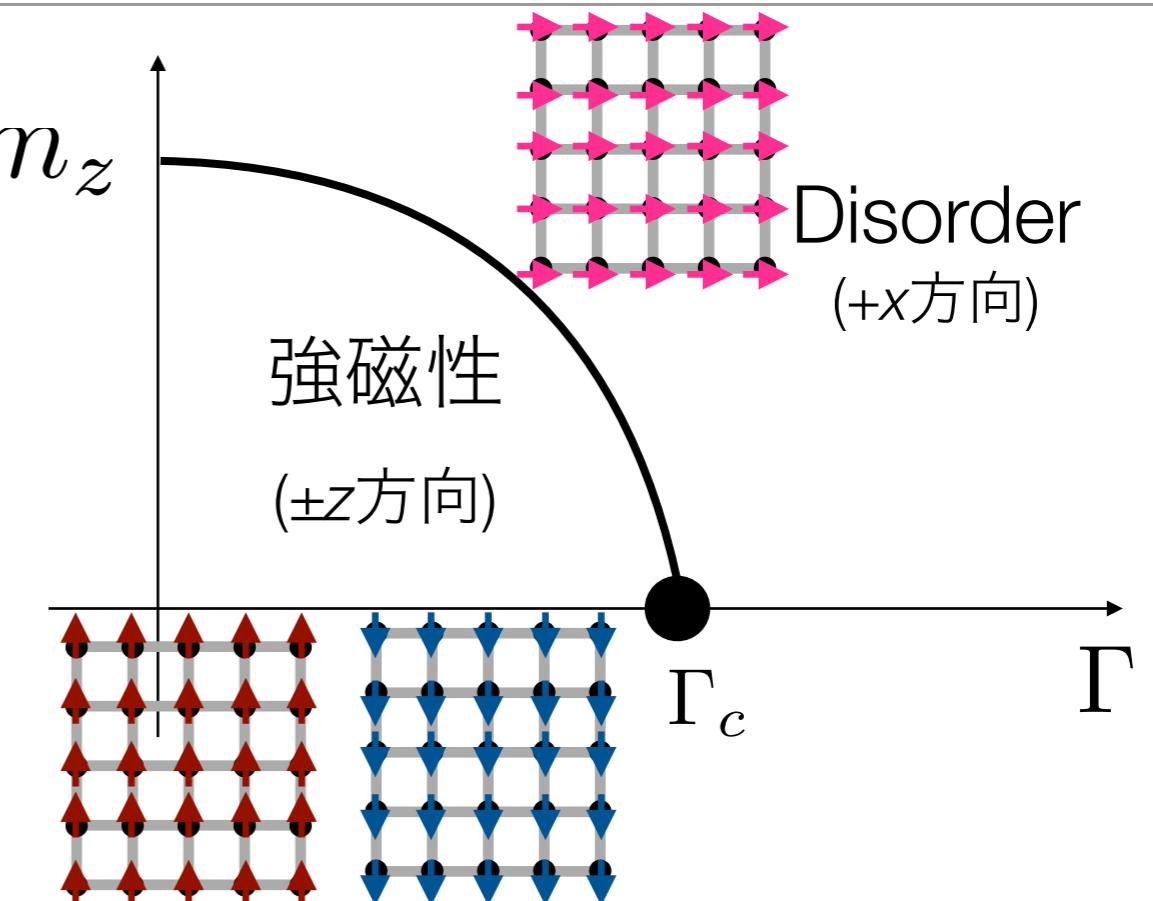
量子多体問題の例：スピン模型の基底状態

例：横磁場イジングモデル

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^{L-1} S_{i,z} S_{i+1,z} - \Gamma \sum_{i=1}^L S_{i,x}$$

$S = \frac{1}{2}$ 量子スピンの行列表示

$$S_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, S_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$



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、…
 - それらを分ける相転移の性質は？

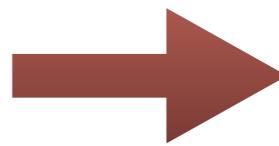
量子多体問題に対する計算科学のアプローチ

- 対角化法
 - そのまま固有値問題を解くため厳密
 - $S=1/2$ の量子スピン系では50スピン程度が限界
- 量子モンテカルロ法
 - 統計誤差の範囲で厳密な答えが得られる
 - 対角化よりもずっと大きな系が取り扱える
 - 符号問題により、適用できる系が限られる
- 変分法
 - 状態ベクトル（波動関数）の形を仮定して計算量を減らす
 - 仮定した形によるバイアスが存在
 - どんな系にでも適用できる（ことが多い）
 - テンソルネットワーク法はこのカテゴリ

変分法

例：最低エネルギー状態

$$\mathcal{H}|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle$$



コスト関数： $F = \frac{\langle \tilde{\Psi} | \mathcal{H} | \tilde{\Psi} \rangle}{\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle}$

F の最小値 = E_0

その時の $|\tilde{\Psi}\rangle = |\Psi_0\rangle$

変分法

- 固有値問題の近似解を得る方法の一つ
- F の最小値を 制限された空間 の範囲で探す



$|\tilde{\Psi}\rangle$ の形を仮定する = **試行関数、変分波動関数**

例：平均場近似、テンソルネットワーク状態、ニューラルネットワーク, ...

- 良い試行関数 → 高精度の最低エネルギー



- 複雑な試行関数 → コスト関数の計算量が増大

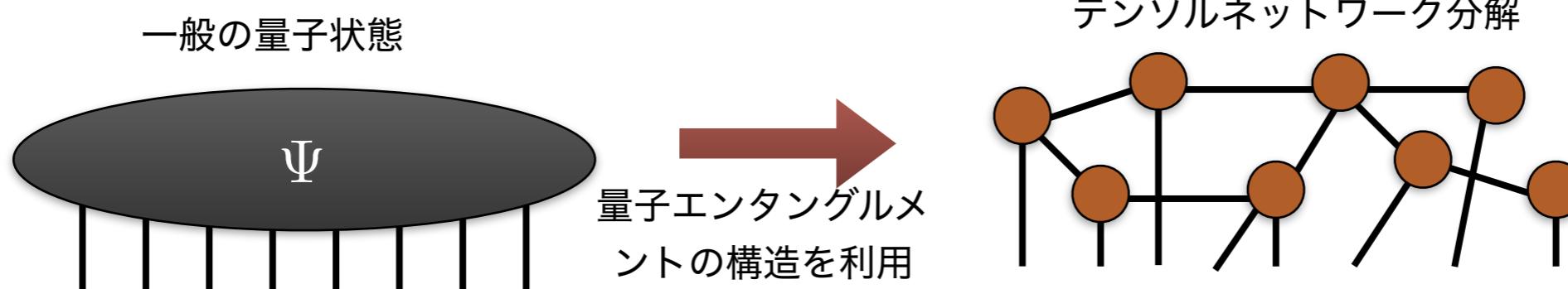
テンソルネットワークによる情報圧縮

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：

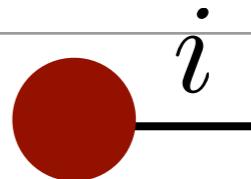
情報のエンタングルメントに注目することで、
適切な部分空間を構成



ダイアグラムを用いたテンソル表記

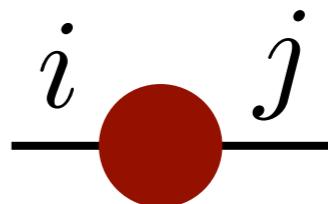
- ベクトル

$$\vec{v} : v_i$$



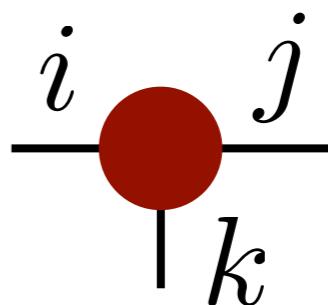
- 行列

$$M : M_{i,j}$$



- テンソル

$$T : T_{i,j,k}$$



テンソルの積（縮約）の表現

$$C_{i,j} = (AB)_{i,j} = \sum_k A_{i,k} B_{k,j}$$

$$i \textcolor{teal}{C} j = i \textcolor{red}{A} k \textcolor{blue}{B} j$$

$$D_{i,j,k} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} A_{i,j,\alpha,\beta} B_{\beta,\gamma} C_{\gamma,k,\alpha}$$

$$k \textcolor{teal}{D} i \textcolor{blue}{B} j = \textcolor{teal}{C} k \textcolor{blue}{B} i \textcolor{red}{A} j$$

*n階のテンソル=n本の足

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 : $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_N\}} \frac{\Psi_{i_1 i_2 \dots i_N}}{\sqrt{N!}} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle$$

基底

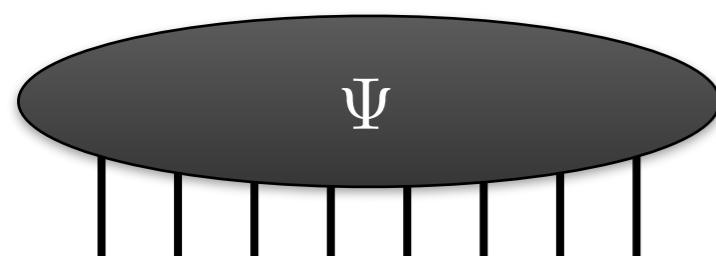
量子スピン・bit : $i = \uparrow, \downarrow = |0\rangle, |1\rangle$
 $|010100 \dots 0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes \dots$

量子化学 :

i = 原子軌道・分子軌道の占有数

係数はテンソル

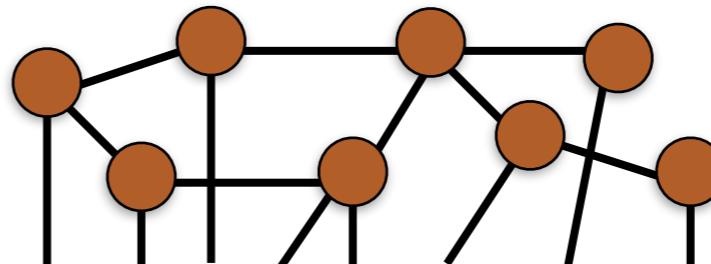
量子多体状態



$\sim e^N$ の独立要素

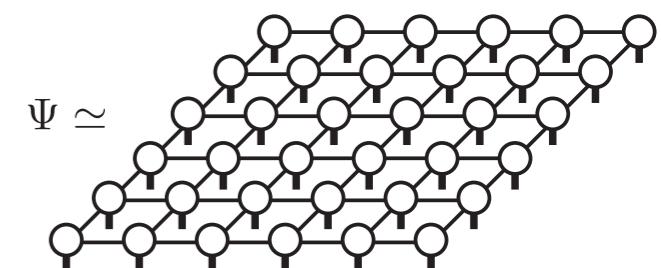
量子相関の
特徴を利用した近似

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)



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

良いネットワークを選ぶことで、量子多体状態を効率的に表現できる

ex. TPS: 独立な要素数 $\sim ND^4$

D: テンソルTの各足の大きさ

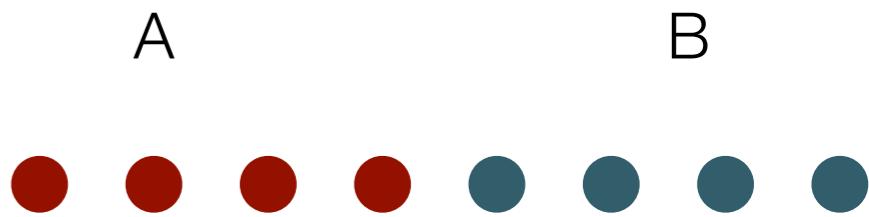
指数関数 → 線形

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 = ρ_A の von Neumann エントロピー

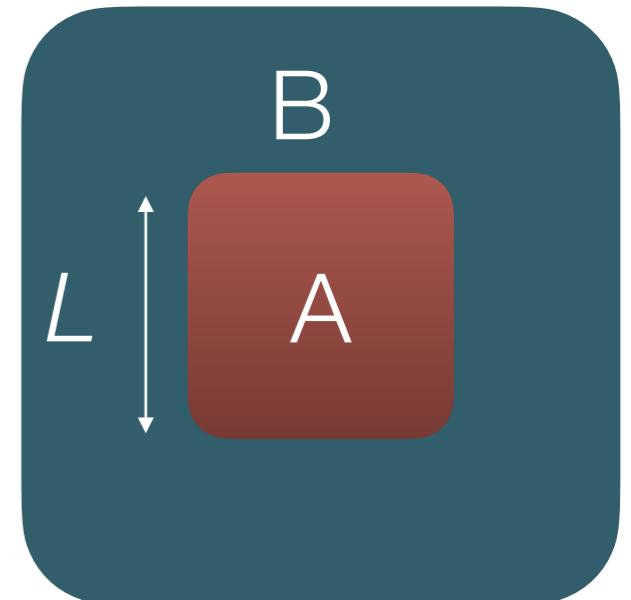
$$S = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A)$$

一般の状態ベクトル :

EE は 部分系の体積 (スピニ数) に比例

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

(c.f. ランダムベクトル)



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)

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

基底状態はヒルベルト空間の狭い部分空間で表現可能

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)

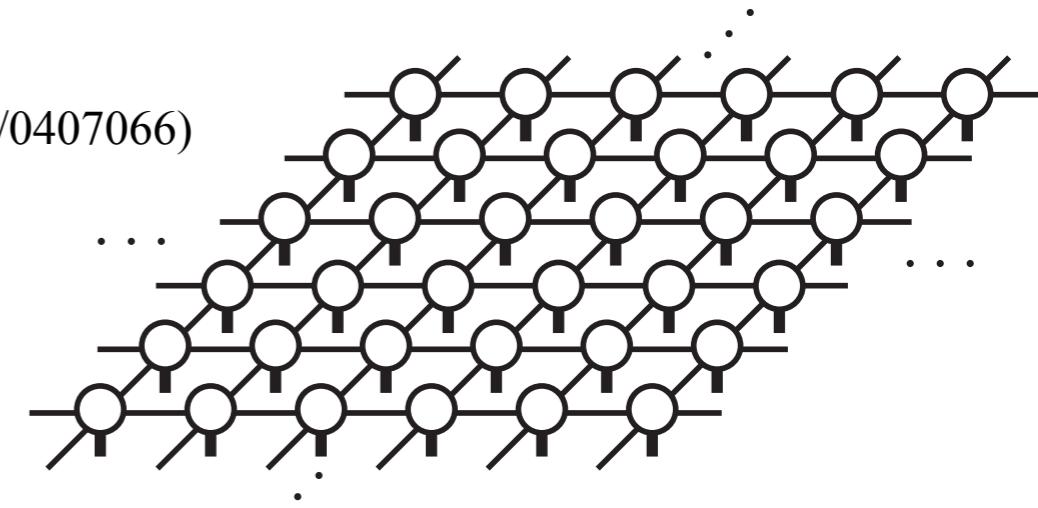
例：2次元正方格子のTPS

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

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

Virtual自由度 : i, j, k, l



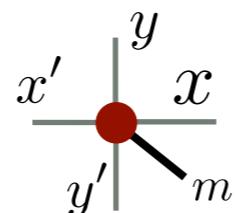
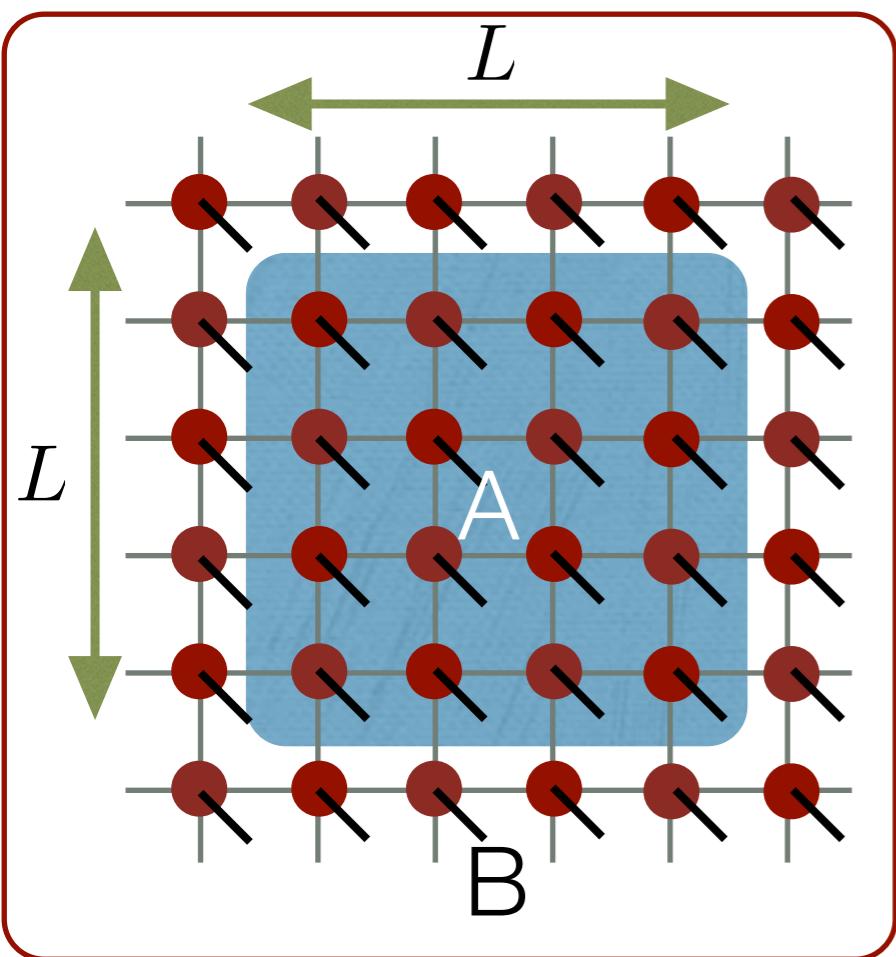
各インデックスの次元 = ボンド次元 (D)

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

- 面積則を満たすため、有限 D でも精度の良い近似
 - 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

TPS (PEPS)のエンタングルメントエントロピー



ボンド次元 = D

領域 A と B をつなぐボンドの数

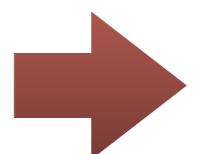
$$N_c(L) = 4L \quad (\text{正方格子})$$

$$N_c(L) = 2dL^{d-1} \quad (d \text{ 次元の超立方格子})$$

$$\text{rank } \rho_A \leq D^{N_c(L)} \sim D^{2dL^{d-1}}$$

$$S_A = -\text{Tr } \rho_A \log \rho_A \leq 2dL^{d-1} \log D$$

TPS は面積則を満たすことができる!



TPSを用いることで高次元の量子多体状態を
効率的に近似できる

*これは、有限 D の TPS が無限系を効率的に近似できることも示唆

infinite TPS = iTPS

iTPSの例：可解模型の基底状態

Toric code

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

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

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

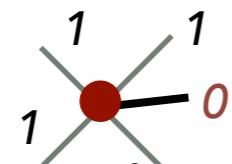
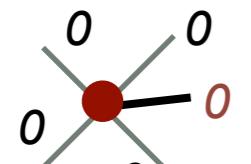
→ この模型の基底状態は Z_2 スピン液体

*量子コンピュータの誤り訂正にも使われる

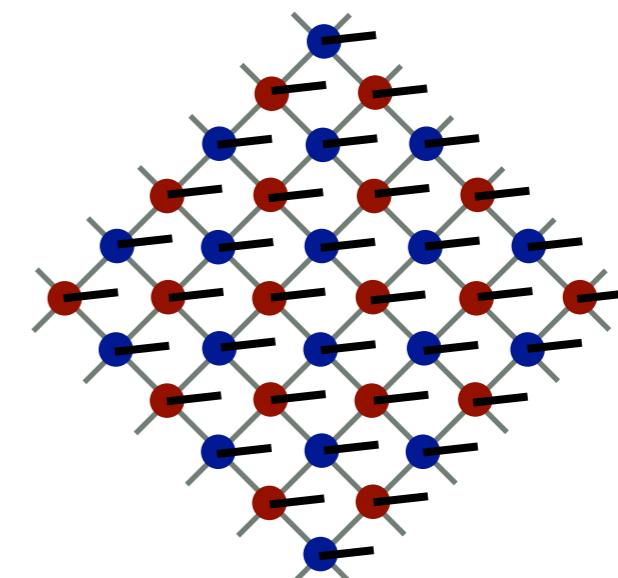
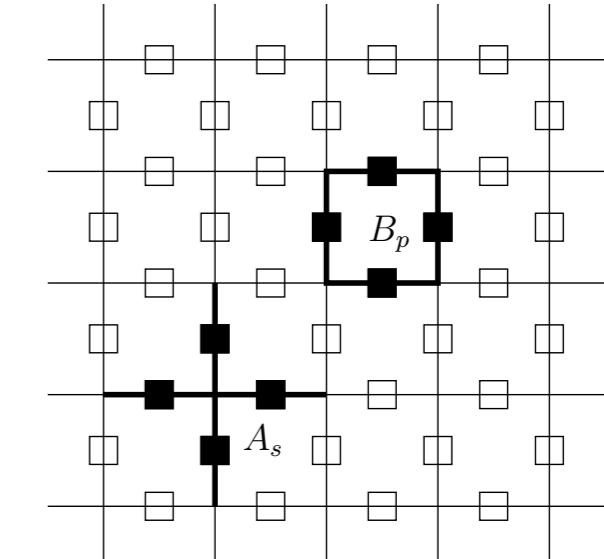
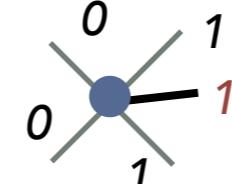
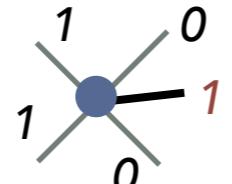
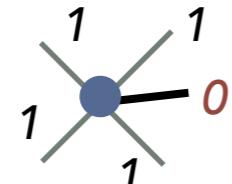
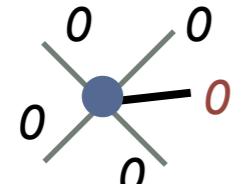
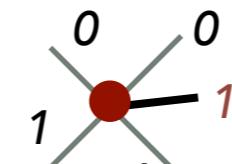
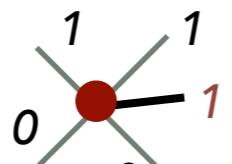
このスピン液体状態は D=2 TPS で厳密に表現可能

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

0,1: eigenstate of σ_z



(Non-zero elements of tensor)



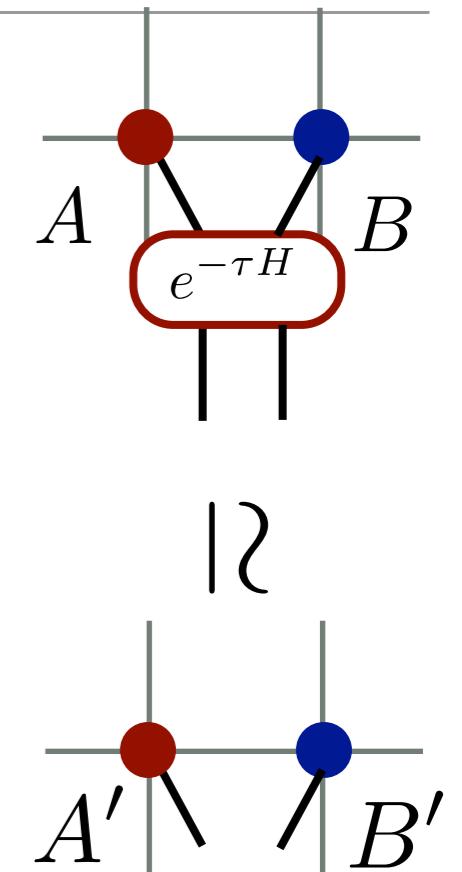
iTPS を用いた変分計算（の概略）

最適化：虚時間発展法

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

Approximation	Cost	information	Accuracy
Simple update	$O(D^5)$	local	bad
Full update	$O(D^{10})$	global	better

Updateはだいたい $10^3 \sim 10^5$ ステップの計算

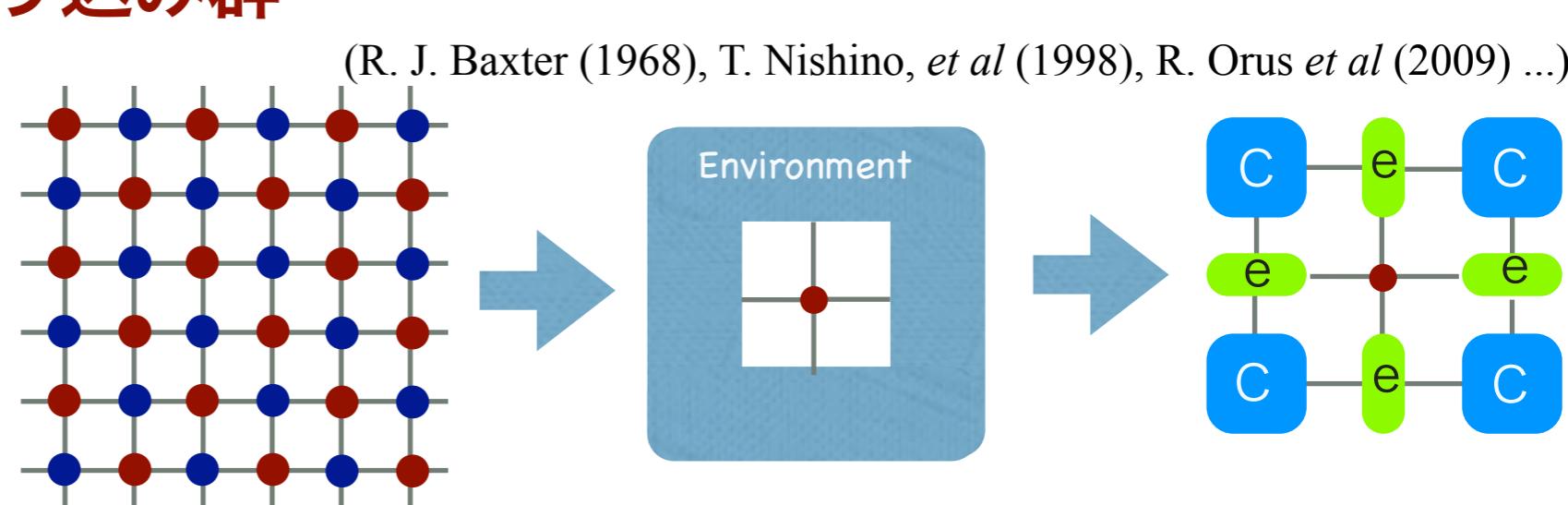


物理量評価: 全体のネットワークの（近似的）縮約

角転送行列繰り込み群

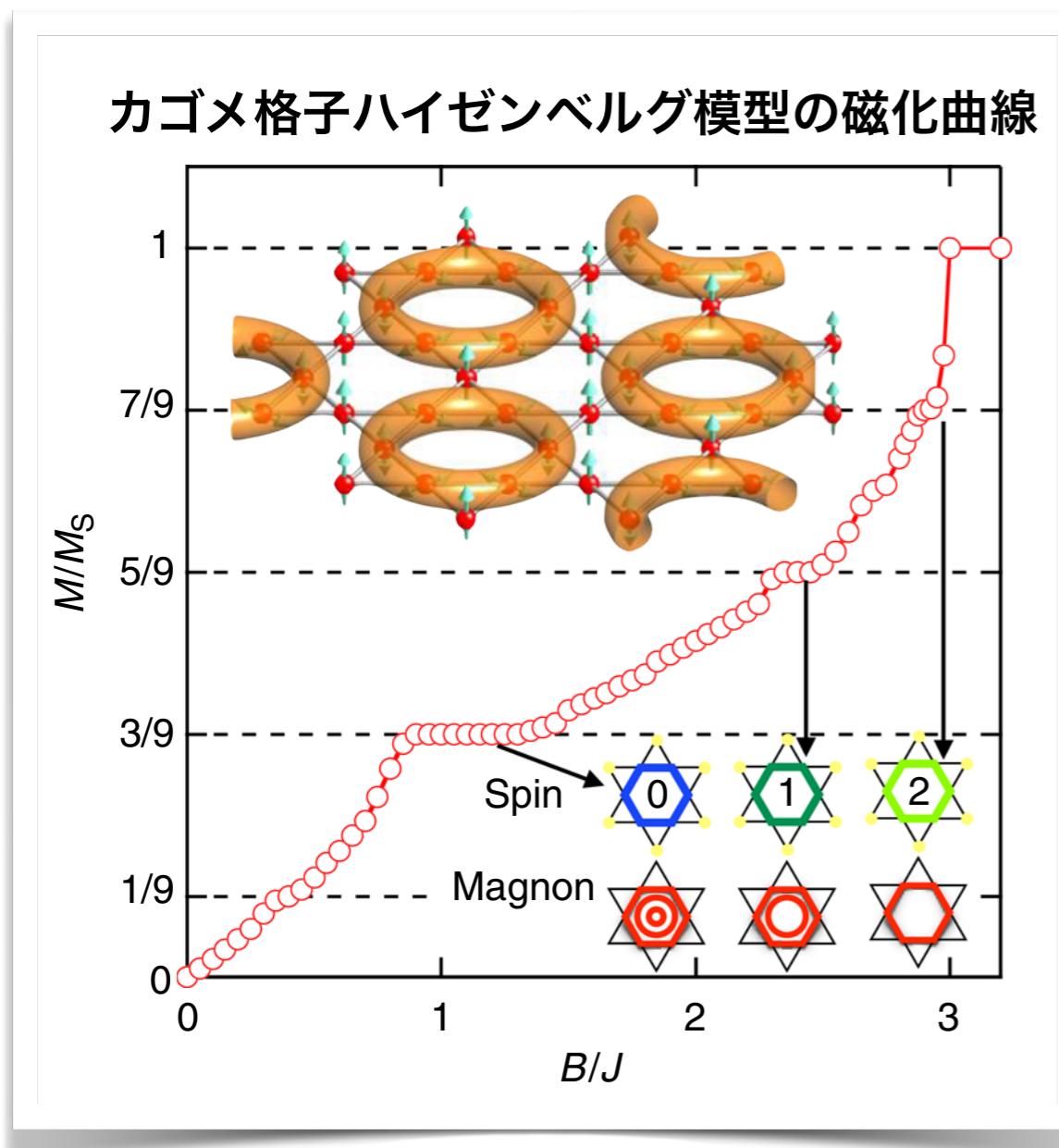
Cost $\sim O(D^{10})$

典型的には数十step

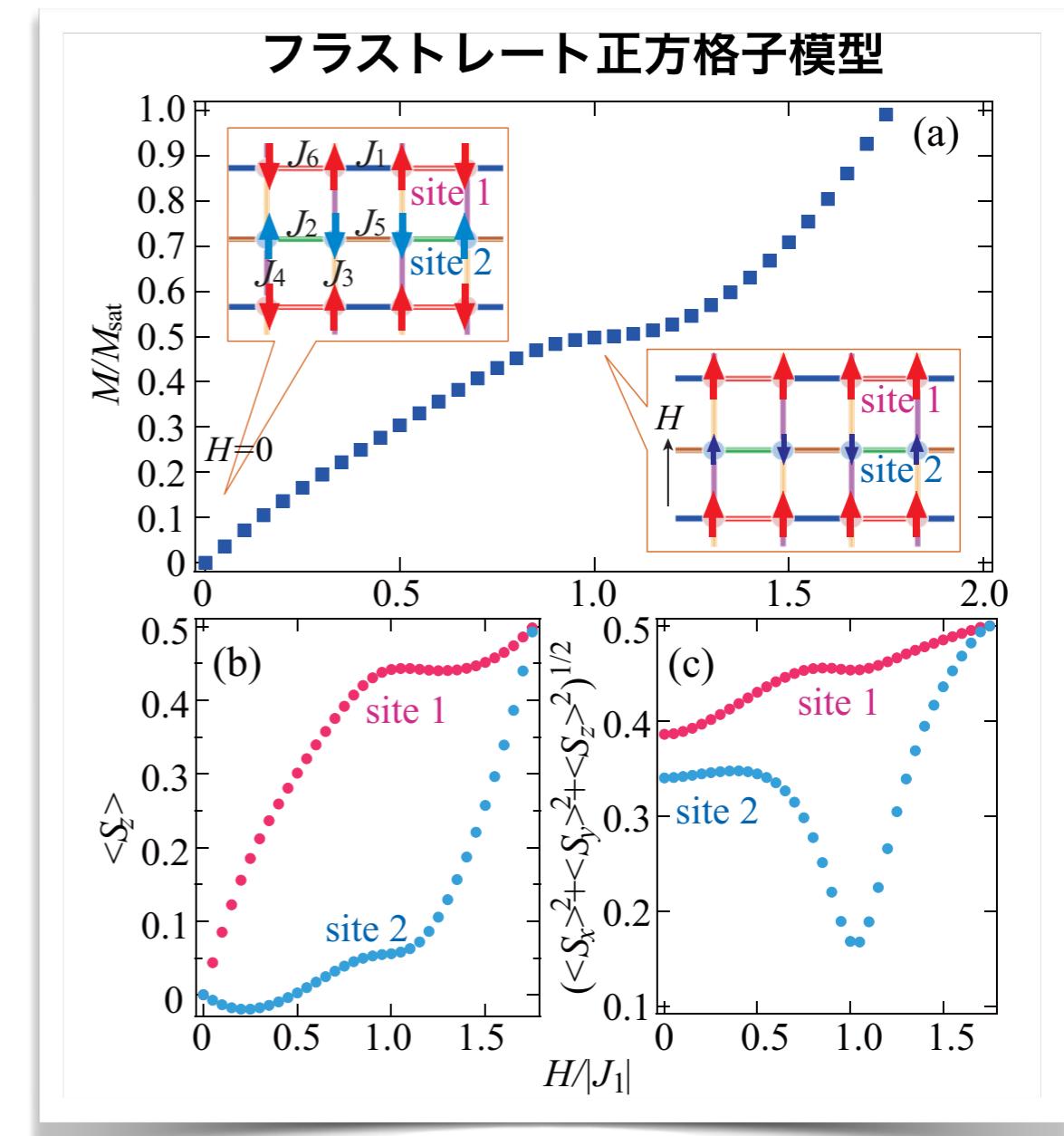


テンソルネットワーク法の適用例

例：(QMCのできない) フラストレーント磁性体



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

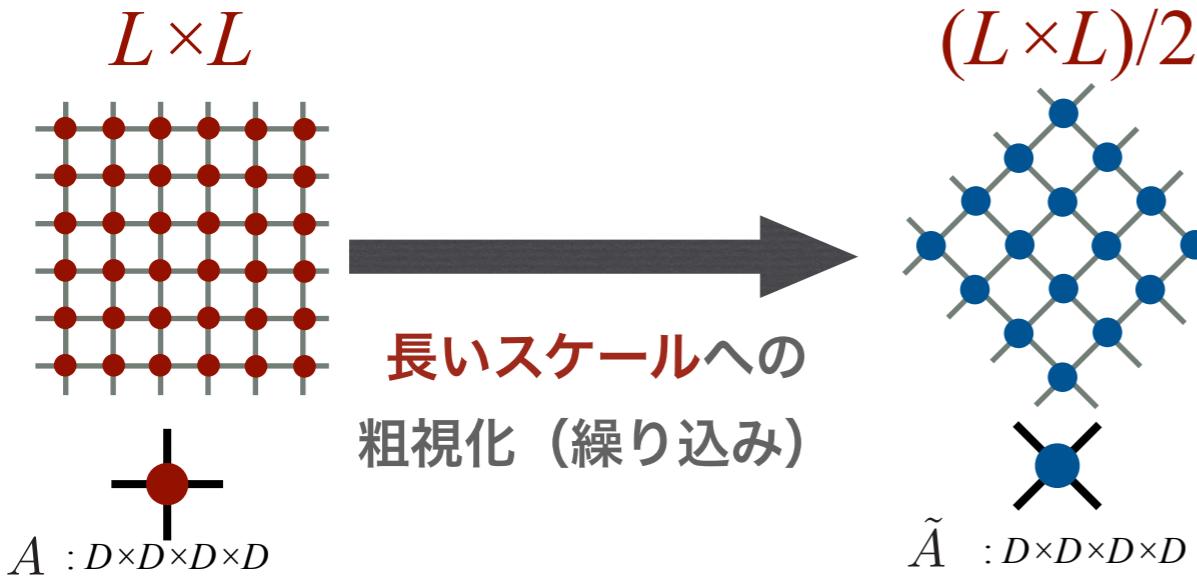


H. Yamaguchi, Y. Sasaki, T. Okubo,
Phys. Rev. B **98**, 094402 (2018).

コメント：テンソル繰り込み群

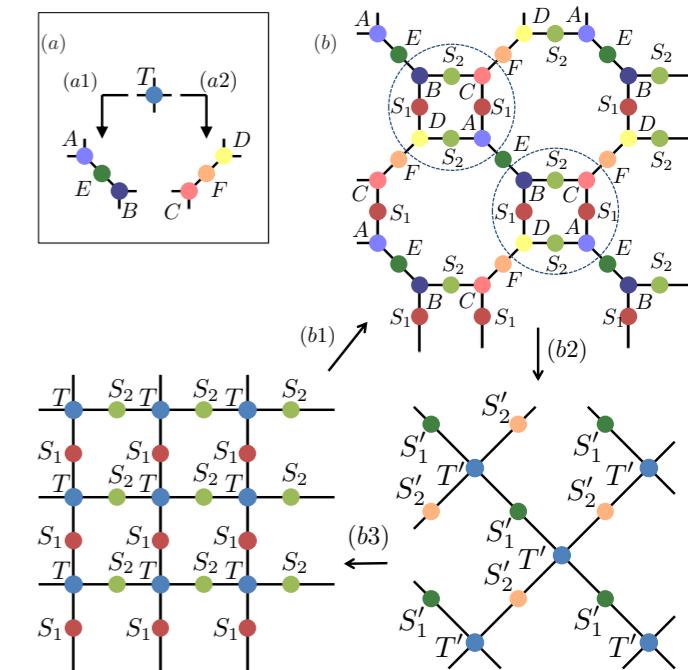
Tensor renormalization group (TRG) cf. M. Levin and C. P. Nave, Phys. Rev. Lett. **99**, 120601 (2007)

ネットワークの粗視化によるテンソルネットワークの近似的な縮約法



指数関数的な縮約コストが
サイト数の多項式時間に低減

- TRG型の方法は、古典模型の分配関数計算によく用いられる
- 経路積分表示を通じて量子多体問題に適用可能
- TRGはテンソルネットワーク状態と密接に関係
 - 短距離相関 (short-range entanglement)の除去
 - MERAとの関連
- 我々も新しい手法開発をしている。
 - D. Adachi, T.O. and S. Todo, PRB **102** 054432 (2020); arXiv:2011.01679.



コンテンツ

- ・ はじめに
- ・ 量子多体状態のテンソルネットワーク表現
- ・ ハニカム格子キタエフ模型
- ・ ギャップレスキタエフスピニ液体のテンソルネットワーク状態
- ・ テンソルネットワークによる有限温度シミュレーション
- ・ まとめ

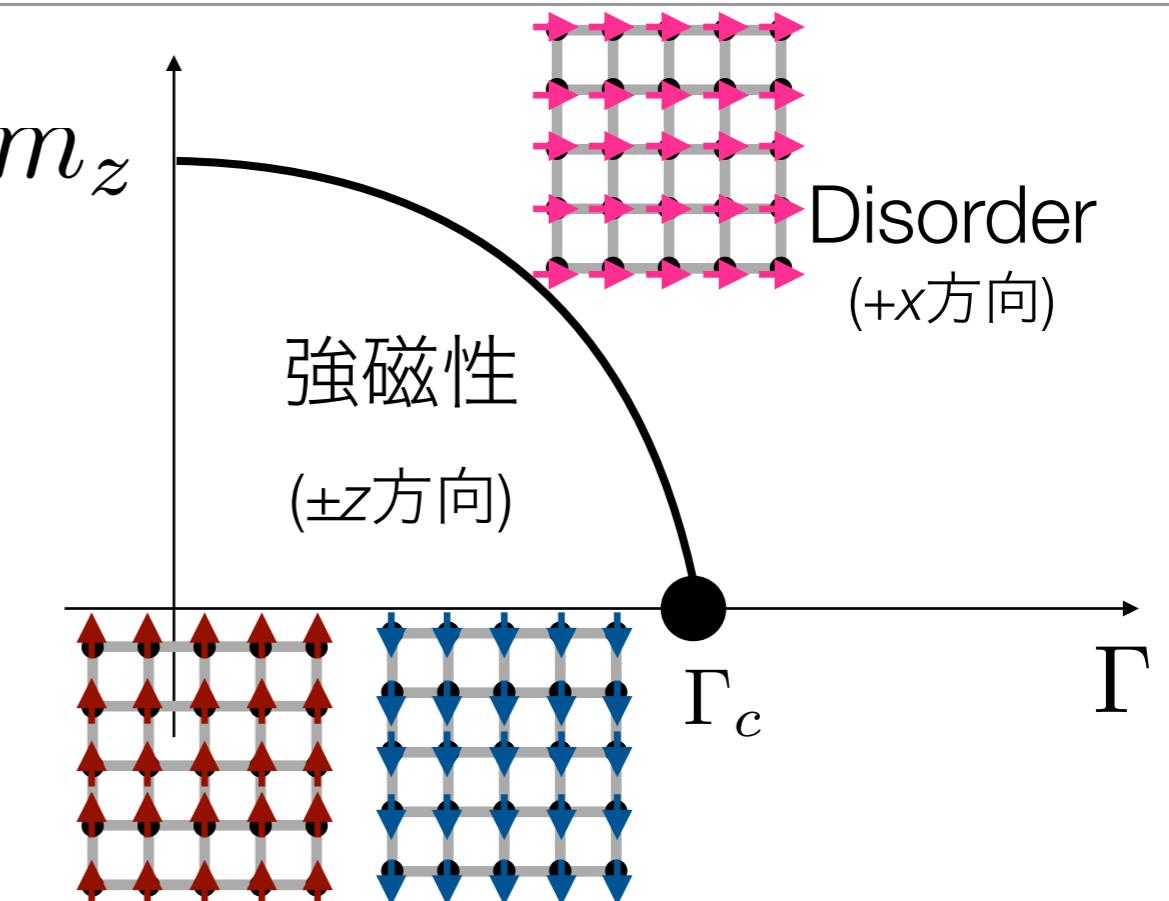
(量子) スピン模型と典型的な(基底状態)相図

例：横磁場イジングモデル

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^{L-1} S_{i,z} S_{i+1,z} - \Gamma \sum_{i=1}^L S_{i,x}$$

$S = \frac{1}{2}$ 量子スピンの行列表示

$$S_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, S_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$



通常、量子スピン系の基底状態は(磁気的な)長距離秩序を持つ：

- ・自発的対称性の破れ
- ・外部磁場の効果

量子スピン液体

(量子) スピン系の相互作用にフラストレーションがあると:

→ 場合によっては、基底状態が長距離秩序を持たない

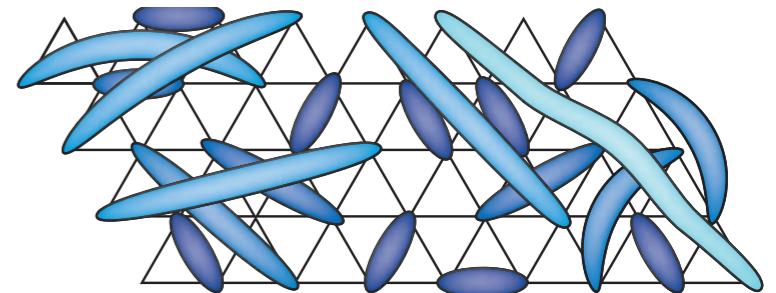
量子スピン液体

平均場描像に基づく、スピン液体状態が数多く存在

- Gapped spin liquid
- Z_2 spin liquid
- Chiral spin liquid
- ...
- Gapless spin liquid
- $U(1)$ spin liquids
- ...

(L. Balents, Nature (2010))

Spin liquid (RVB)



稀な例：可解模型

基底状態がスピン液体であることが分かっている最も有名な例

→ (ハニカム格子) キタエフ模型

ハニカム格子キタエフ模型

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

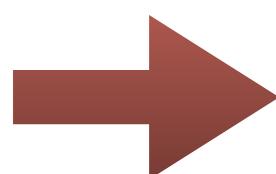
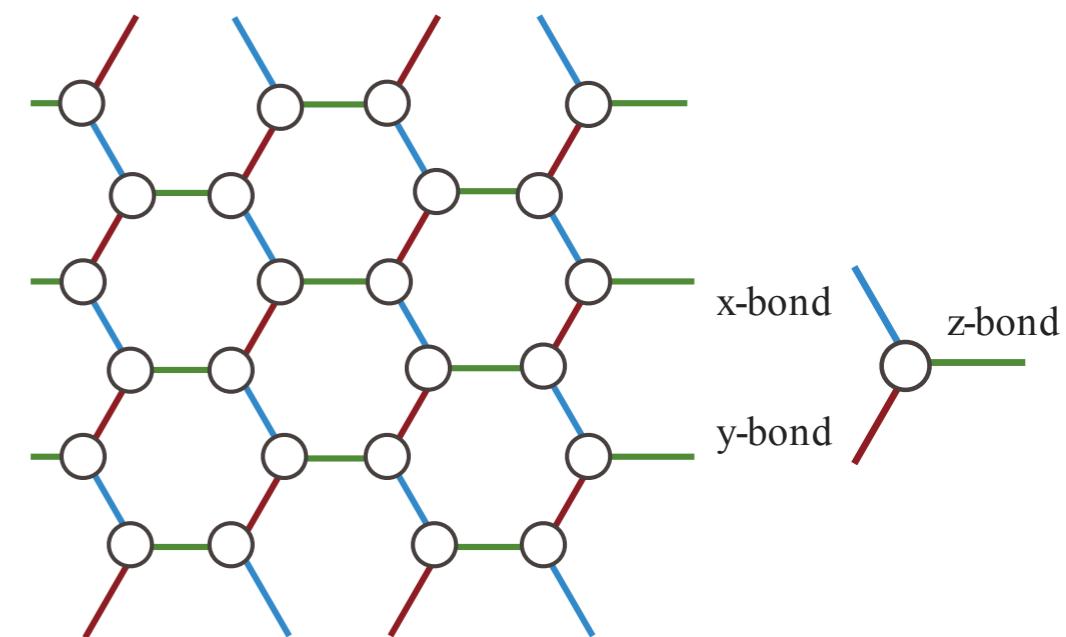
キタエフ模型

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

γ : 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



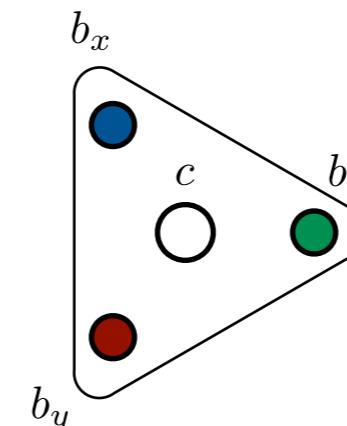
$$\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$$

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

Majorana fermions:

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

Four Majorana fermions



キタエフ模型の保存量：フラックス

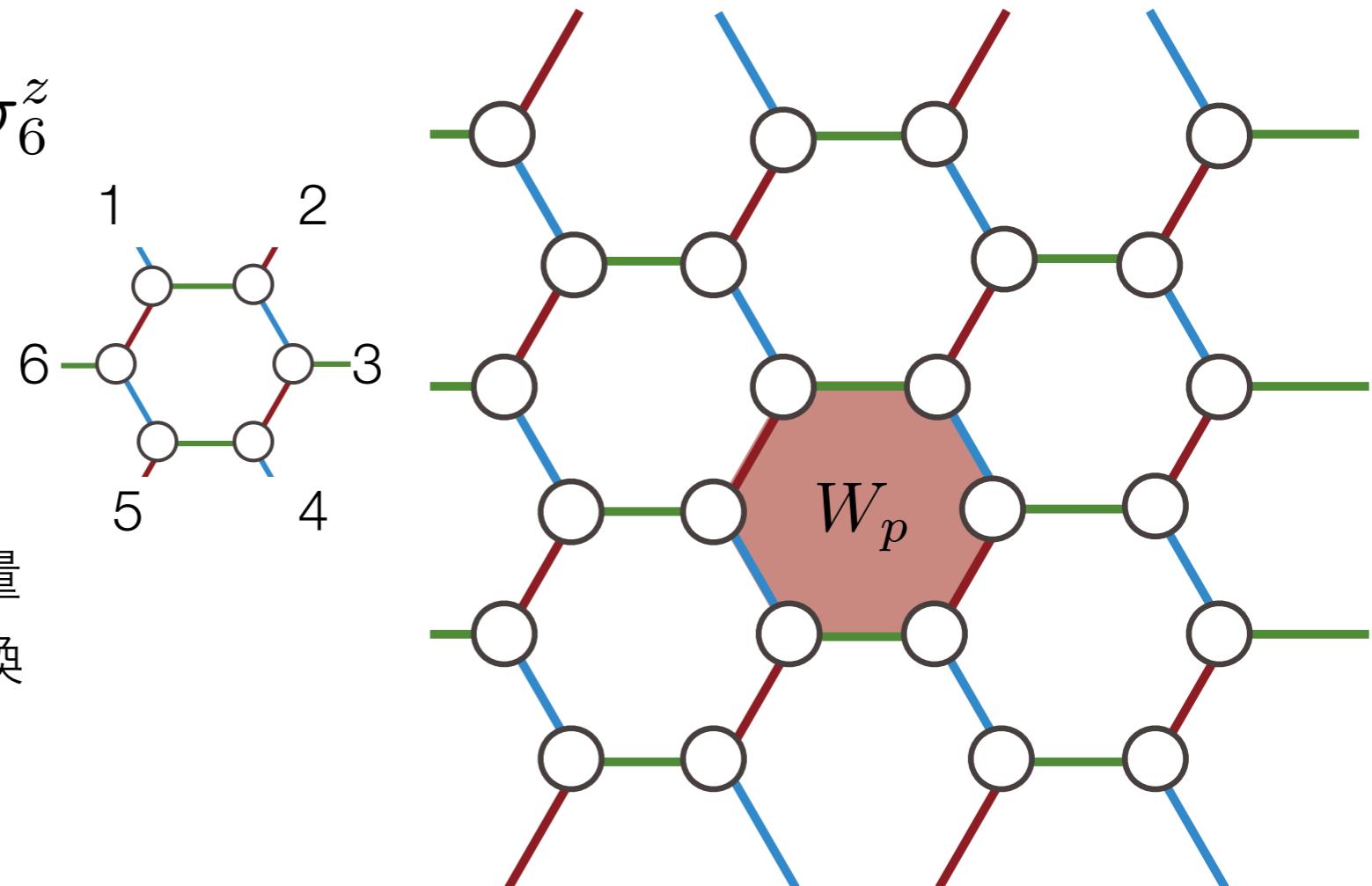
フラックス演算子

$$W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z$$

W_p の性質：

- ・ 固有値は ± 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

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



基底状態は全ての六角形で
フラックスが1のセクターの中

$$\forall p, W_p = 1$$

(Vortex free condition)

キタエフ模型の基底状態

キタエフ模型 A. Kitaev, Annals of Physics 321, 2 (2006)

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

γ : ボンドの方向

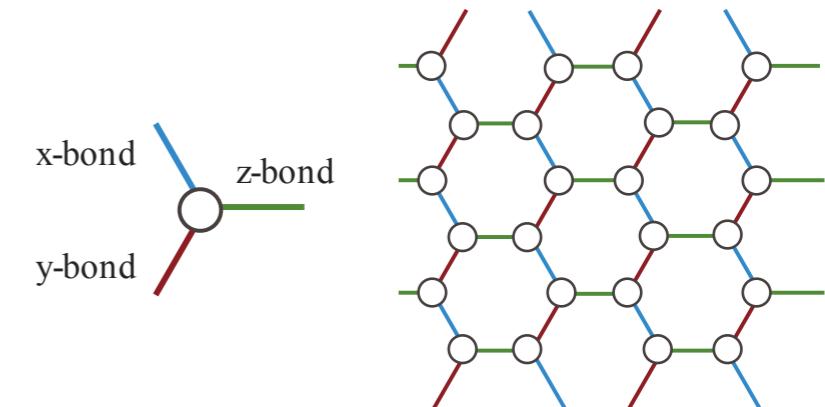
2つのスピン液体

非等方領域 (A) : gapped spin liquid

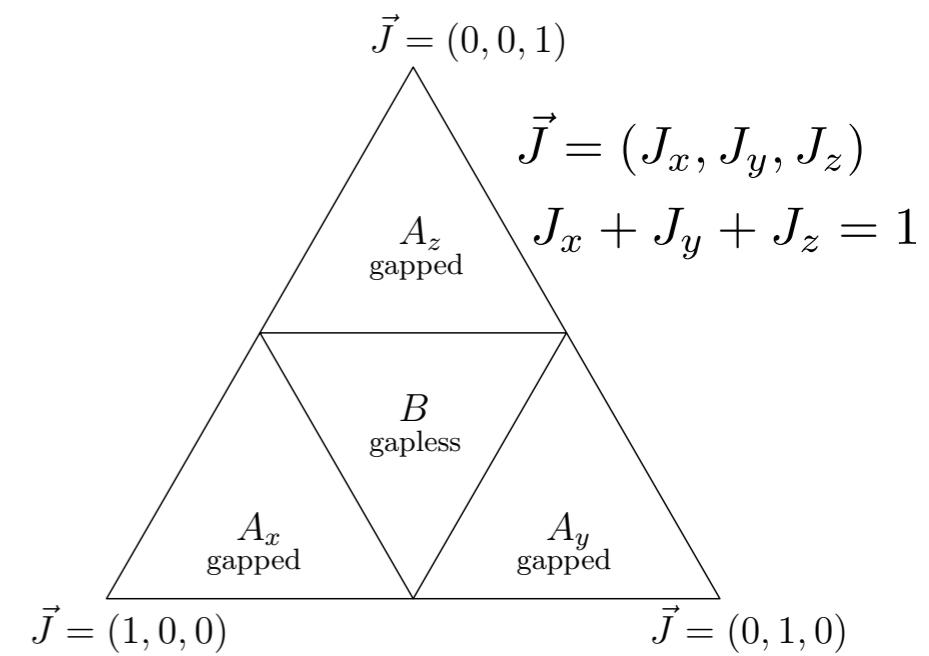
- 基底状態と励起状態に有限のエネルギーギャップ
- 量子誤り訂正に使われるtoric code状態と"同じ"状態
- Toric codeには**コンパクトなTN表現が存在**

等方領域(B) : gapless spin liquid

- 励起エネルギーにエネルギーギャップがない
- 磁場の印加でトポロジカル相が実現
- コンパクトなTN表現が未知 (だった)**



基底状態相図



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



実際の物質でキタエフ相互作用が実現

Na₂IrO₃の第一原理スピンハミルトニアン

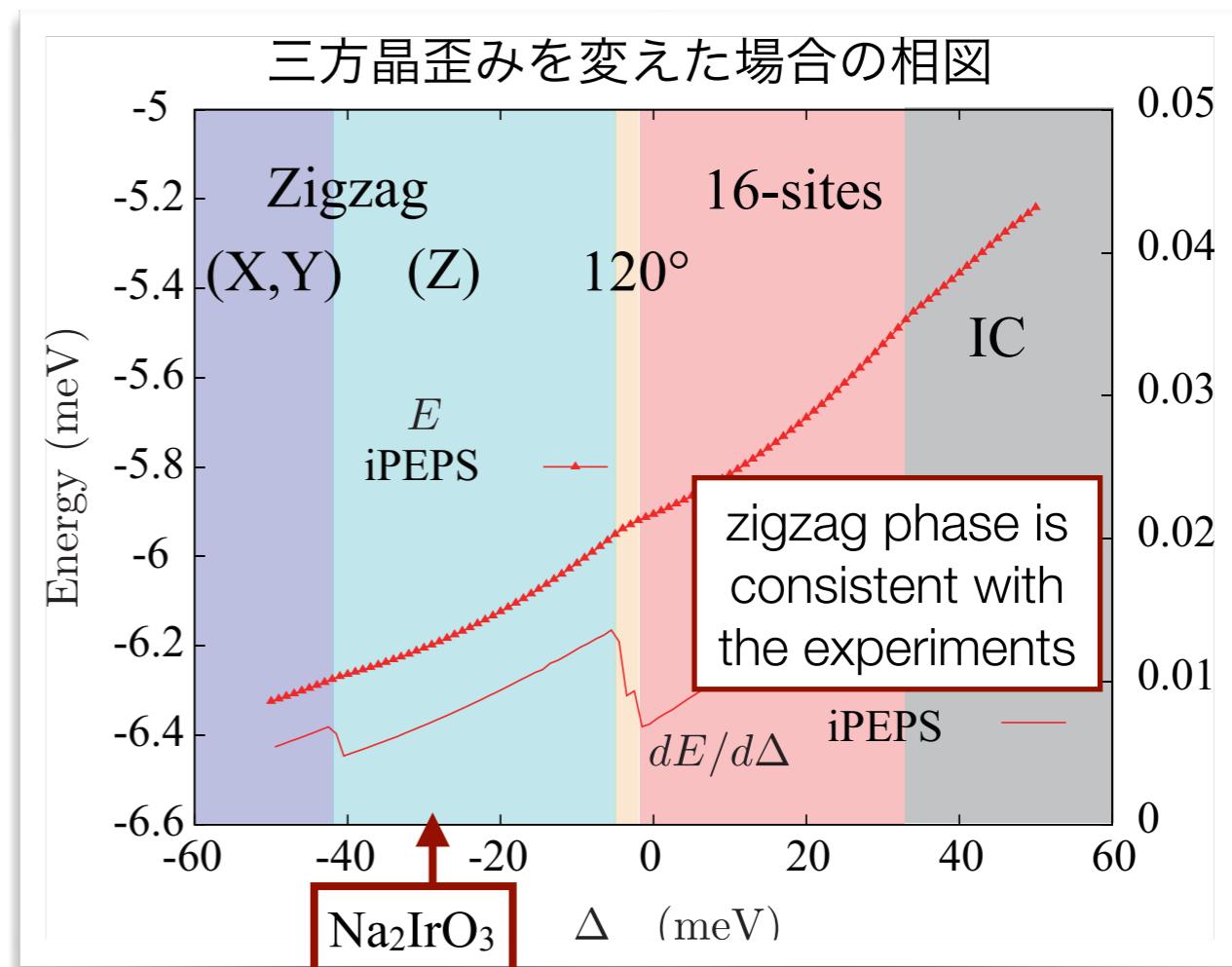
(Y. Yamaji et al. Phys. Rev. Lett. 113, 107201(2014))

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

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

この物質の基底状態をiTPS
を使って明らかに

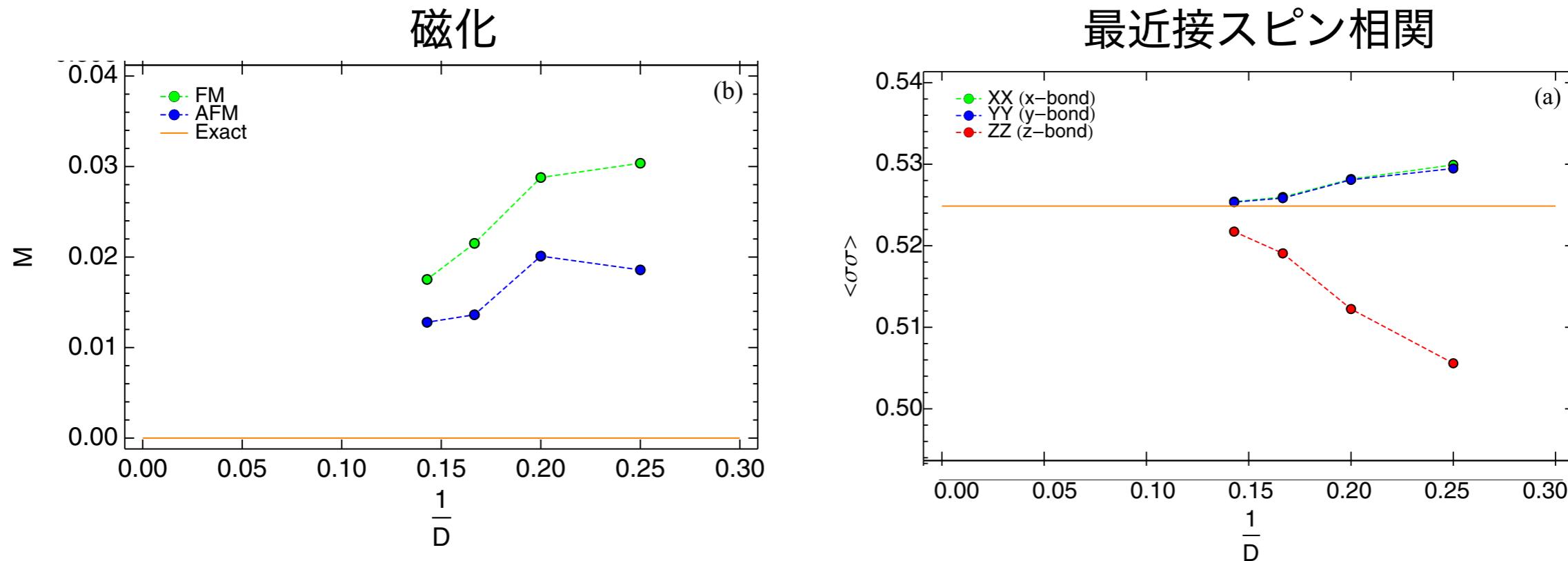
- キタエフ相互作用以外の相互作用の影響で、基底状態はスピン液体ではなく磁気秩序状態
- その場合、iTPSでの計算は、第一原理ハミルトニアンの基底状態を正しく実現できる



スピニン液体計算の困難

iTPS を用いた変分法で、虚時間発展のような通常の最適化をすると
初期状態に強く依存したバイアスのかかった結果が得られる

J.O. Iregui, P. Corboz, and M. Troyer, PRB 90, 195102 (2014)



キタエフ模型近傍のスピニン液体研究には

- キタエフスピニン液体に近い初期状態
- よい最適化方法の開発

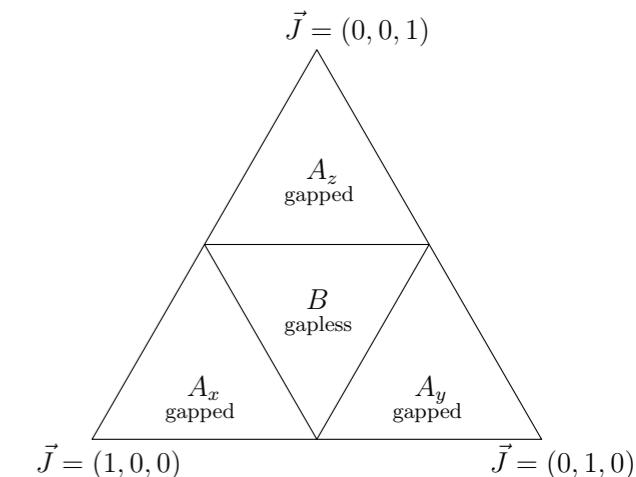
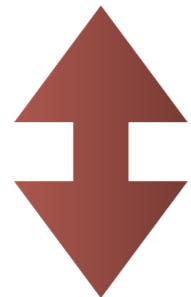
が必要

スピン液体のコンパクトなテンソルネットワーク表現

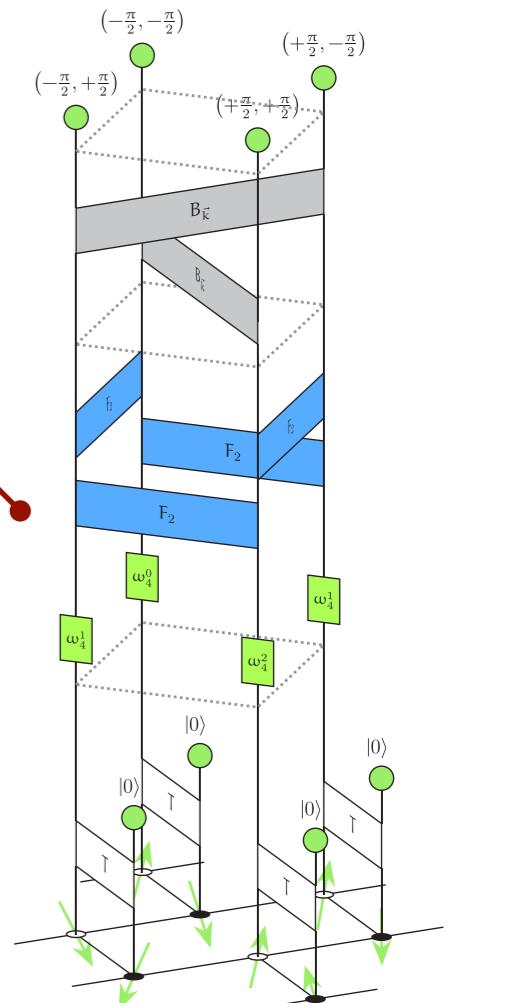
GS phase diagram –

キタエフスピン液体：

- Gapped spin liquid は断熱的にToric codeに接続される
 - Toric codeはD=2 のiTPSで厳密に書ける



GS for 8 sites honeycomb lattice



- Gapless spin liquid は簡単なテンソルネットワーク表現を持たない
 - マヨラナフェルミ粒子を用いた表現は、複雑なテンソルネットワーク

P. Schmoll and R. Orús, Phys. Rev. B, **95** 045112 (2017).

Gapless のキタエフスピン液体を
「コンパクト」なテンソルネットワークでかけるか？

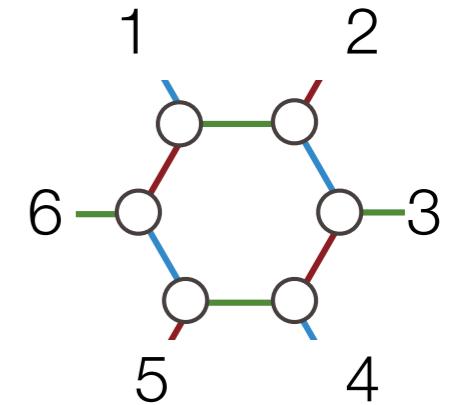
コンテンツ

- ・ はじめに
- ・ 量子多体状態のテンソルネットワーク表現
- ・ ハニカム格子キタエフ模型
- ・ ギャップレスキタエフスピニ液体のテンソルネットワーク状態
- ・ テンソルネットワークによる有限温度シミュレーション
- ・ まとめ

Projector onto vortex free sector

The Kitaev spin liquid is in the vortex free sector.

Let us consider the projector onto this sector.



Exercise:

Projector on to $W_i = 1$:

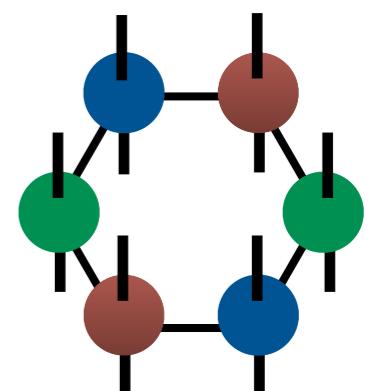
$$P_{i,+} = \frac{I + W_i}{2}$$

$$W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z$$

It can be represented by D=2 tensor network.

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

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



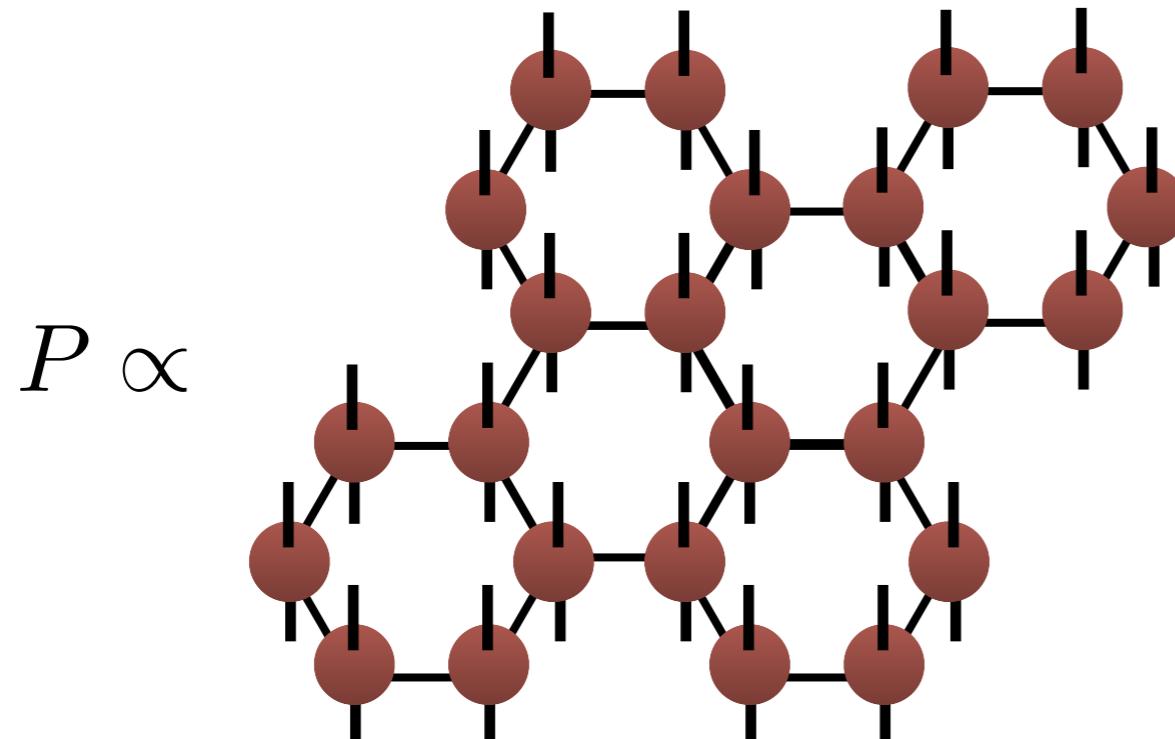
Projector onto vortex free sector

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

What is a tensor network representation for the vortex free projector?

$$P = \prod_p \frac{I + W_p}{2}$$

→ It is given by "loop gas" operator.



($D=2$, TPO)

$$Q_{ijk}^{ss'} = \begin{array}{c} i \\ \diagup \\ \text{---} \\ \diagdown \\ j \end{array} \begin{array}{c} s \\ \diagup \\ \text{---} \\ \diagdown \\ s' \\ k \end{array} \quad i, j, k = 0, 1$$

Non zero elements:

$$\begin{array}{c} 0 \\ \diagup \\ \text{---} \\ \diagdown \\ 0 \end{array} = I$$

$$\begin{array}{c} 0 \\ \diagup \\ \text{---} \\ \diagdown \\ 1 \\ 1 \end{array} = \sigma^x$$

$$\begin{array}{c} 1 \\ \diagup \\ \text{---} \\ \diagdown \\ 1 \\ 0 \end{array} = \sigma^y$$

$$\begin{array}{c} 1 \\ \diagup \\ \text{---} \\ \diagdown \\ 0 \\ 1 \end{array} = \sigma^z$$

Loop structure of the operator

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

$$t \text{Tr} \prod Q = \begin{array}{c} \text{hexagonal lattice} \\ + \end{array} \begin{array}{c} \text{hexagonal lattice with one red hexagon} \\ + \end{array} \begin{array}{c} \text{hexagonal lattice with two red hexagons} \\ + \end{array} \begin{array}{c} \text{hexagonal lattice with many red hexagons} \\ + \dots \end{array}$$

$$Q_{ijk}^{ss'} = \begin{array}{c} i \quad s \\ \text{---} \\ j \quad s' \\ \text{---} \\ k \end{array} \quad i, j, k = 0, 1$$

$$\begin{array}{c} 0 \quad 0 \\ \text{---} \\ 0 \end{array} = I \quad \begin{array}{c} 0 \quad 1 \\ \text{---} \\ 1 \end{array} = \sigma^x$$

$$\begin{array}{c} 1 \quad 1 \\ \text{---} \\ 0 \end{array} = \sigma^y \quad \begin{array}{c} 1 \quad 0 \\ \text{---} \\ 1 \end{array} = \sigma^z$$

Sum over the all closed loops!

$$= \prod_p (I + W_p) = N_G P$$

$N_G = 2^{N_p}$:# of graphs

Notice:  $= W_p$


 $= W_p W'_p$

...

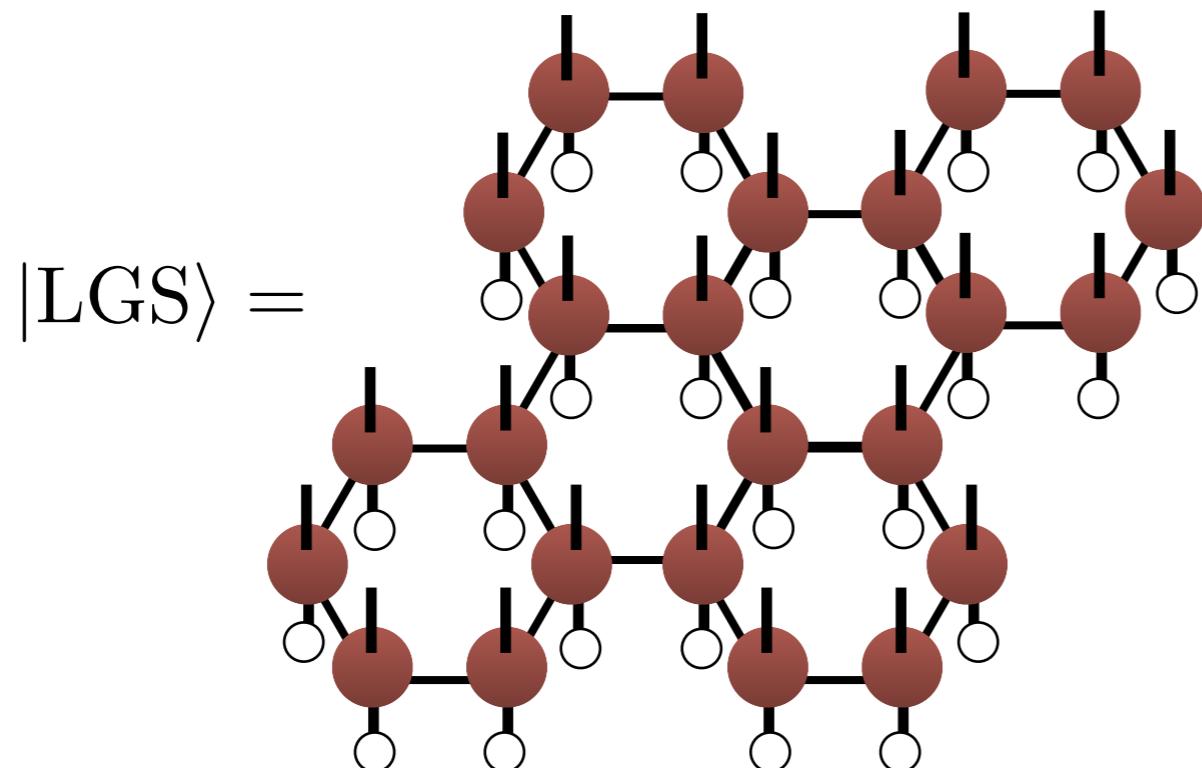
Loop gas state: a vortex free state

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

A simple **vortex free state** corresponding to the **isotropic Kitaev model**:

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

Ferromagnetic state pointing (1,1,1) direction.



$$|111\rangle =$$

$$\langle 111 | \sigma^\gamma | 111 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$D=2$, TPS

Properties of the LGS

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

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

Symmetries:

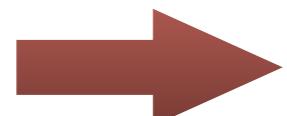
From the symmetries of Q and $|111\rangle$, LGS is symmetric under

- Lattice translation
- C_6 lattice rotation (+ spin rotation)
- Reflection + Times reversal

* Single reflection or time reversal symmetry is broken due to underlying $|111\rangle$ state, although it can be recovered by considering a linear combination of $Q|111\rangle$ and $Q|-1-1-1\rangle$.

Magnetism

Vortex free condition ensures that the LGS is **non-magnetic**.



Qualitatively **very similar** to the Kitaev spin liquid.

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

Criticality of the LGS

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

Criticality of the gapless KSL:

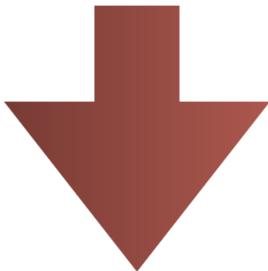
- It belongs to so called **conformal quantum point**.

cf. E. Ardonne, P. Fendley, and E. Fradkin, Ann. Phys. 310, 493 (2004).

→ The wave function itself shows **criticality** (in 2d).

- It belongs **c=1/2 Ising universality class**.

(eg. K. Meichanetzidis et al, Phys. Rev. B **94**, 115158 (2016))



If a wave function $|\phi\rangle$ is adiabatically connected to the Kitaev spin liquid, $\langle\phi|\phi\rangle$ should show critical behavior which belongs to the Ising universality.

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

Criticality of the LGS

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

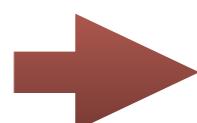
LGS is mapped to classical loop gas:

$$\begin{aligned} \langle \text{LGS} | \text{LGS} \rangle &= N_G \langle 111 | \hat{Q}_{LG} | 111 \rangle & (\hat{Q}_{LG}^2 = N_G \hat{Q}_{LG}) \\ &= N_G \sum_{G \in \text{closed loop}} \langle 111 | Q_G | 111 \rangle & Q_G: \text{product of } \sigma^\gamma \text{ corresponding to the graph } G \\ &= N_G \sum_{G \in \text{closed loop}} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right)^{l_G} & l_G : \text{loop length} \\ && \langle 111 | \sigma^\gamma | 111 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \end{aligned}$$

Identical with the partition function of the classical loop gas model with fugacity $1/\sqrt{3}$.

On the honeycomb lattice, it is exactly solvable.

(B. Nienhuis Phys. Rev. Lett. **49** 1062 (1982).)



It is actually the critical point of the loop gas model, and its criticality belongs to the Ising universality class.

LGS : a simple Kitaev spin liquid like state?

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

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

- It satisfies the symmetries common with (gapless) KSL.
 - Lattice translation
 - C_6 lattice rotation (+ spin rotation)
 - Reflection + Times reversal
 - It is vortex free, and therefore nonmagnetic.
 - It shows the same criticality with KSL.
- One can consider LGS as the simplest example of KSL.
(It might be similar to the case of AKLT state against the Haldane phase.)

Systematic improvement of LGS

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

Energy of LGS for the Kitaev model: $\mathcal{H} = - \sum_{\gamma, \langle i,j \rangle_\gamma} J_\gamma S_i^\gamma S_j^\gamma$

When we calculate the energy of LGS, it is

$$E = \frac{\langle \text{LGS} | \mathcal{H} | \text{LGS} \rangle}{\langle \text{LGS} | \text{LGS} \rangle} \simeq -0.16349 \quad \longleftrightarrow \quad E_{exact} \simeq -0.19682$$

Large discrepancy

Is it possible to improve the energy without spoiling nice properties of LGS?



Yes! We can systematically construct
a family of LGS by using tensor network.

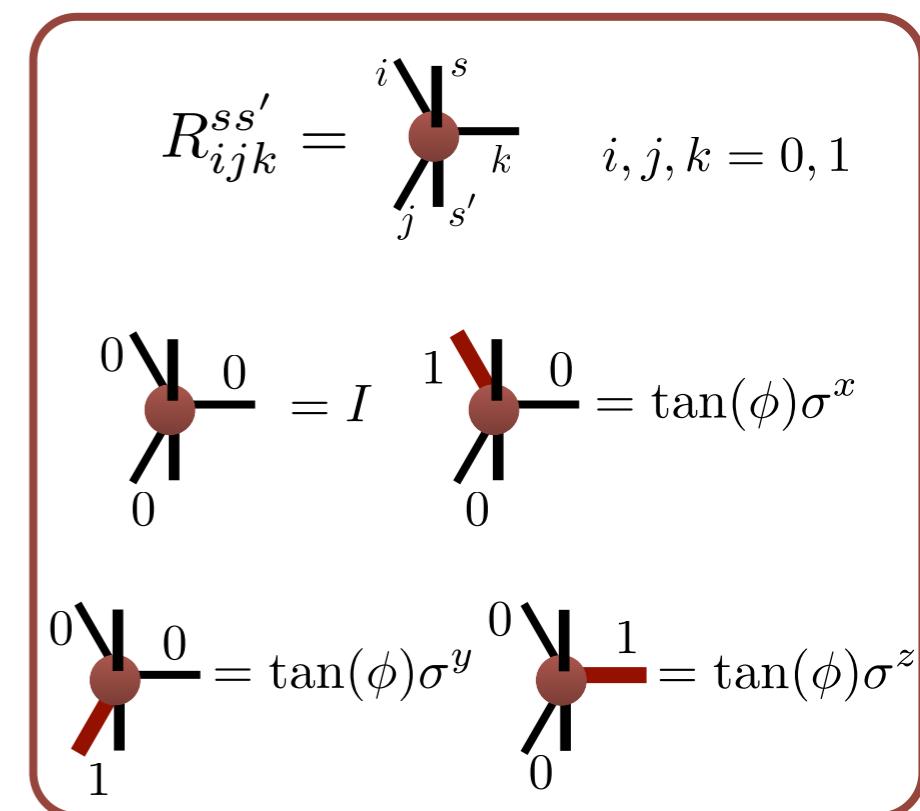
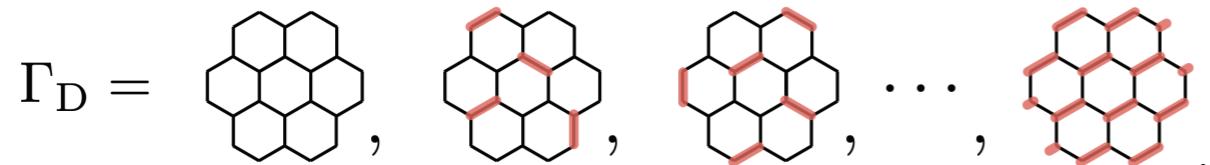
Dimer gas operator

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

$$\hat{R}_{ijk}(\phi) = \sum_{s,s'} R_{ijk}(\phi) |s\rangle\langle s'|$$

$$\hat{R}_{DG}(\phi) = t \text{Tr} \prod_{\alpha} \hat{R}_{i_{\alpha} j_{\alpha} k_{\alpha}}(\phi)$$

$$= \sum_{G \in \Gamma_D} (\tan(\phi))^{l_G} Q_G$$



→ We can show $[\hat{R}_{DG}(\phi), \hat{Q}_{LG}] = 0$

, and it satisfies all symmetries same with LGO.

So, application of DG operator does not spoil the properties of LGO.

String gas states: energies

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

*n*th-order string gas state (SGS)

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

	$ \psi_0\rangle = \text{LGS}\rangle$	$ \psi_1\rangle$	$ \psi_2\rangle$	Exact
D	2	4	8	
# of parameters	0	1	2	
E/J	-0.16349	-0.19643	-0.19681	-0.19682
$\Delta E/E_{\text{ex}}$	0.17	0.02	0.0007	-

By using only two variational parameters,
we can obtain very accurate energy.



By LGS and SGS, we can accurately represent the
gapless Kitaev spin liquid qualitatively and quantitatively!

LGS for chiral spin liquids

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

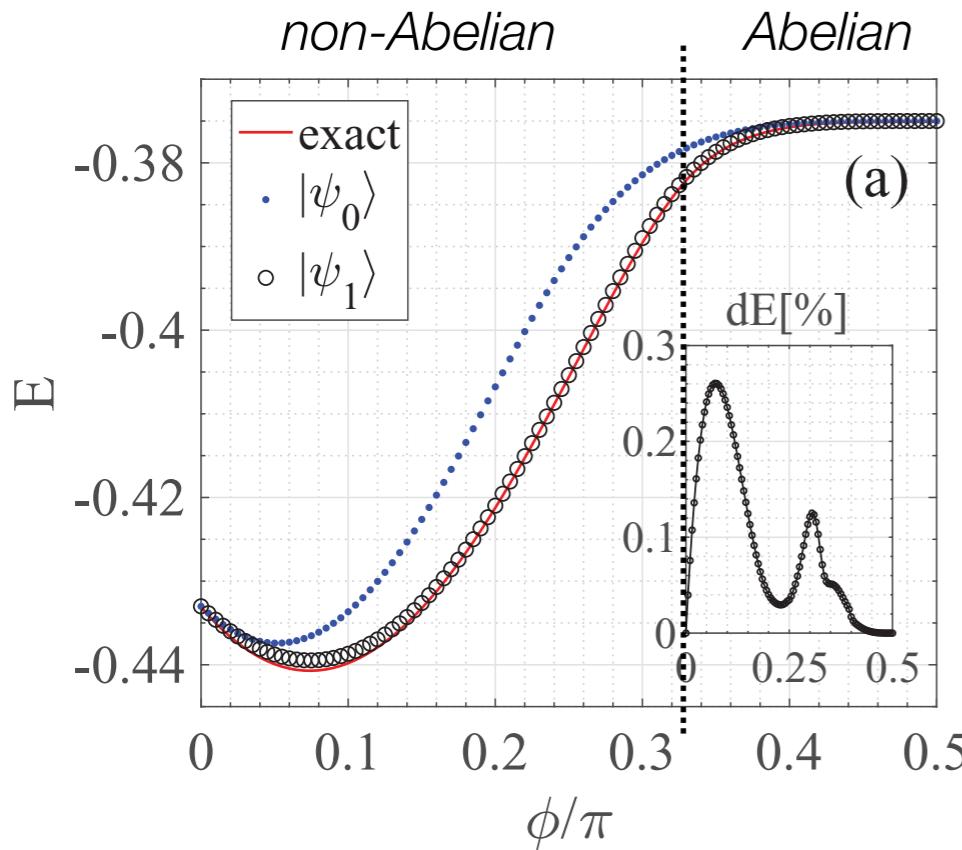
Kitaev model on the star lattice

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{J}{4} \sum_{\langle ij \rangle \in \gamma} \hat{\sigma}_i^\gamma \hat{\sigma}_j^\gamma - \frac{J'}{4} \sum_{\langle ij \rangle \in \gamma'} \hat{\sigma}_i^{\gamma'} \hat{\sigma}_j^{\gamma'},$$

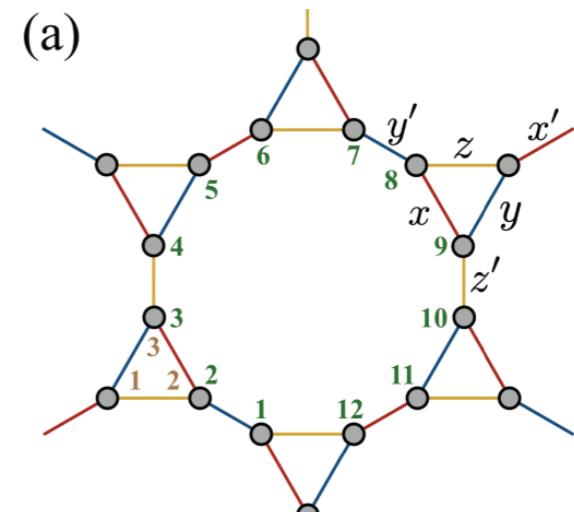
Ground state is a chiral spin liquid.

$$J/J' = \tan \phi$$

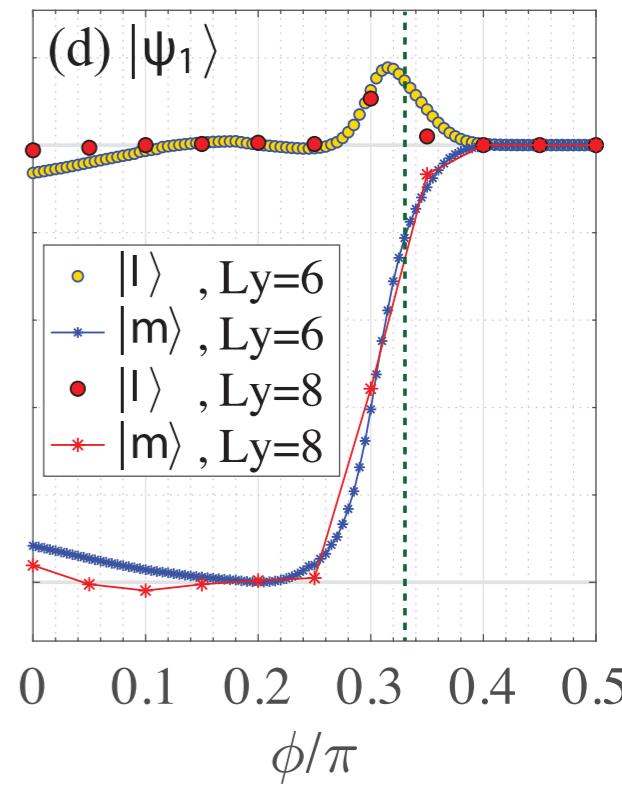
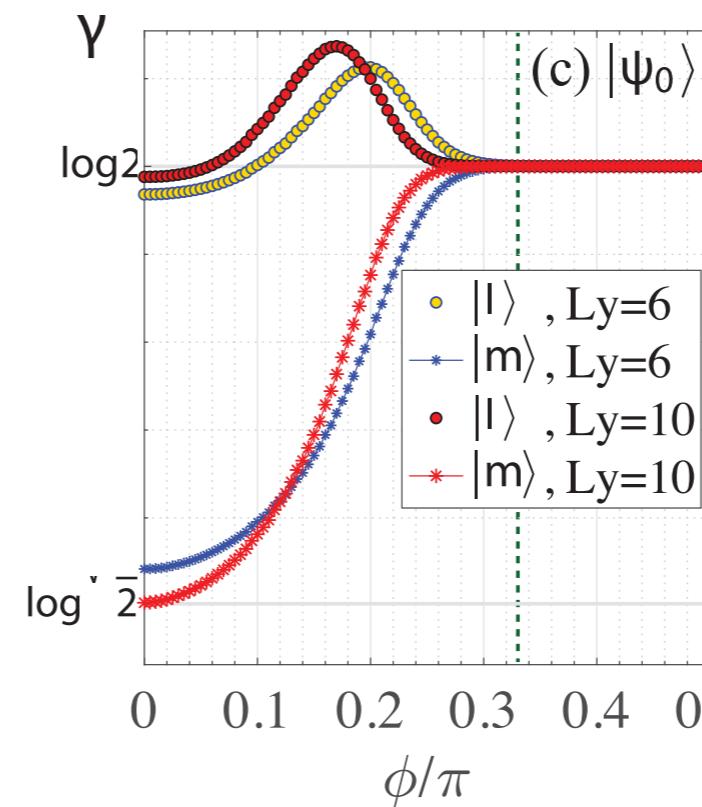
Energy



Star lattice



Topological EE



LGS as initial states: KGG' model

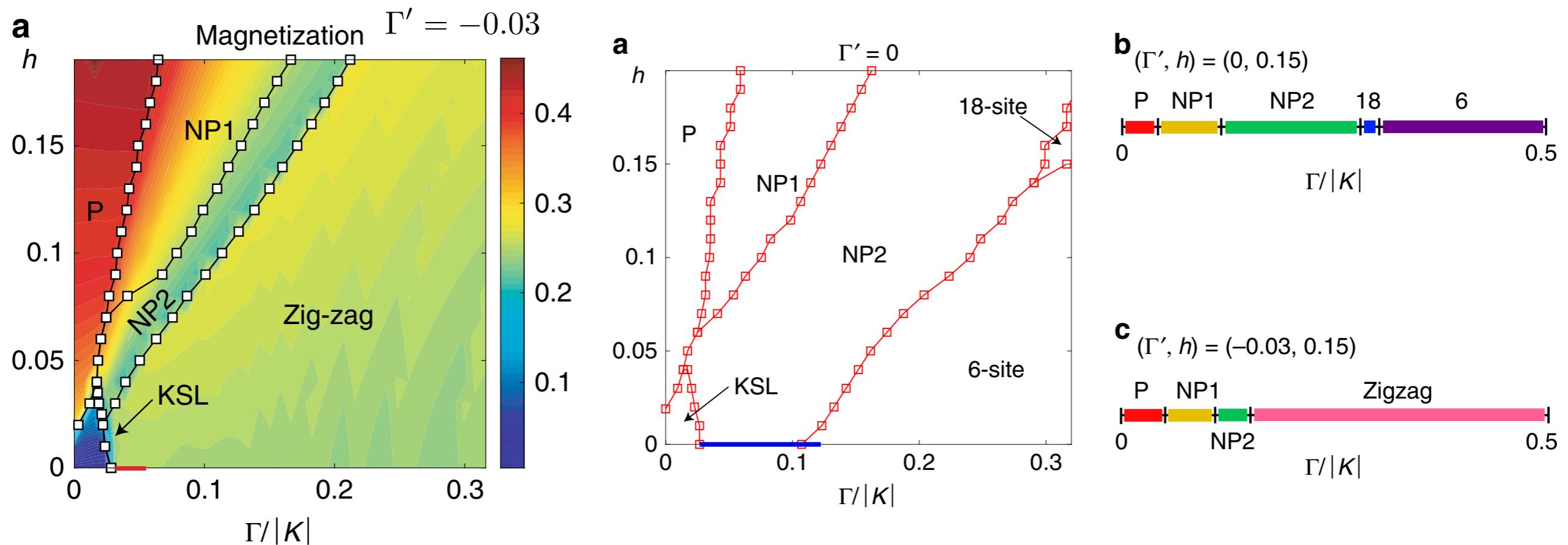
H.-Y. Lee, R. Kanako, et al, Nat. Commun. **11**, 1639 (2020).

By using LGS as the initial states,
we determined the phase diagram of KGG model accurately.

Although the nature of *NP1* and *NP2* states have not been clear.
(They break rotational symmetry spontaneously.)

Cf. M. Gohlke et al., Phys. Rev. Research **2**, 043023 (2020).

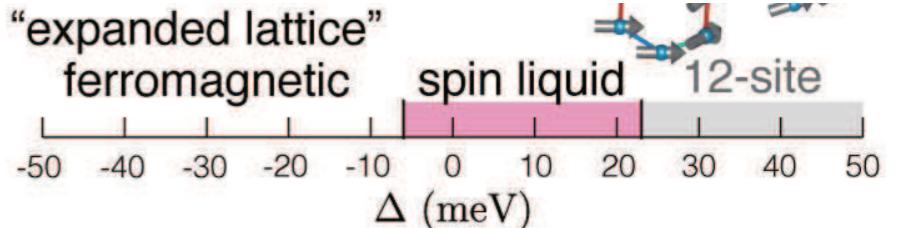
They seem to be adiabatically connected to classical state...



LGS as initial states

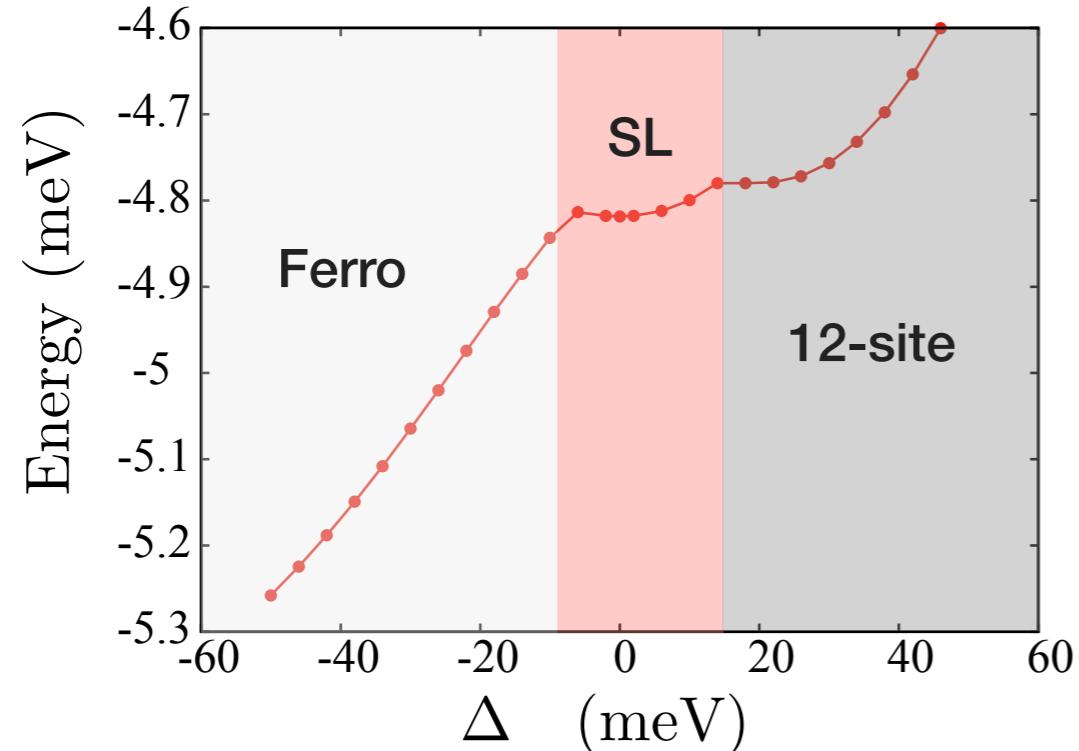
Phase diagram of ED (24-site)

(Y. Yamaji et al, PRL 113, 107201(2014))

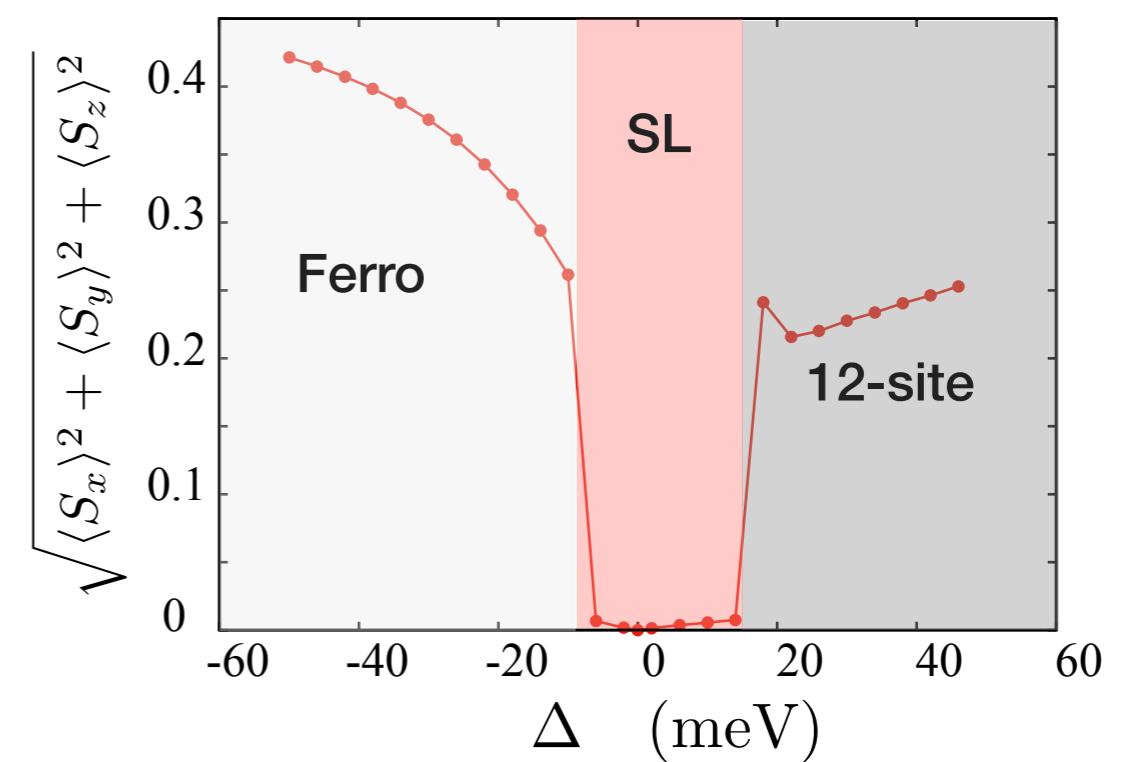


ab initio Hamiltonian for Na_2IrO_3 (with lattice expansion)

Energy and Phase diagram



Local magnetization

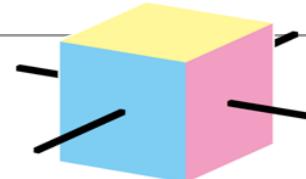


- iTPS phase diagram is qualitatively consistent with the ED.
 - Around $\Delta=0$, a Kitaev spin liquid phase is clearly stabilized.

まとめ

- テンソルネットワークは量子多体状態を研究できる有用なツール
 - iTPS.により、様々なフラストレート量子スピン系を解析できる
- 変分計算だけでなく、我々は（ギャップレス）スピン液体のコンパクトなテンソルネットワーク表現を提案
 - このテンソルネットワーク状態は loop gas または string gas 構造を持つ
 - この状態はキタエフ模型と共通の対称性を保持している
 - この状態は臨界的であり、イジングユニバーサリティに属する
- テンソルネットワーク法は有限温度の計算にも適用可能
- 有限系サイズの計算では、MPO表現を用いて高精度計算が行え、実験と比較可能な熱ホール伝導度も解析できる

物性研高度化プロジェクト：Tensor Network Solver (TeNeS)

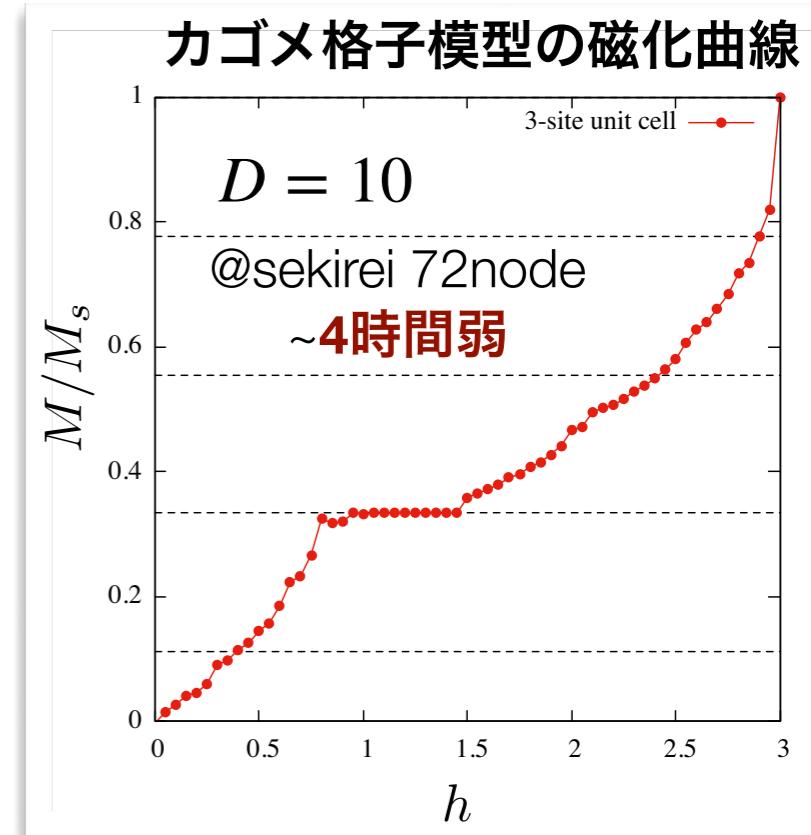


<https://github.com/issp-center-dev/TeNeS>

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) : プロジェクトリーダー