数理解析研究所講究録
第 1859 巻 2013 年 50-58

無限自由度量子系における Entanglement Entropyの有界性について

松井卓
九州大学数理学研究院

２０１３年4月

1 動機

以下では量子スピン系など無限自由度量子系の純粋状態の Entanglement Entropy の有界性と split 性の関係を巡って最近の結果を紹介する。もともとこの研究の動機としては 1 次元反強磁性ハイゼンベルク模型に関する Haldane 予想がある。Haldane 予想とは $SU(2)$ 対称性を持つ 1+1 次元格子模型の基底状態の性質が整数スピンと半奇数スピンで異なるということを主張している。(F.D.M.Haldane, Phys. Lett. A 93(1983),Phys. Rev. Lett. 50, (1983)) 1 次元反強磁性ハイゼンベルク模型のハミルトニアンは次の式で与えられる。

$$H_{AF}=\sum_{j=-\infty}^{\infty}S^{(j)}\cdot S^{(j+1)}$$

ここで $S_{\alpha}^{(j)}$ ($\alpha=x,y,z$) は格子点 j の上の α の方向のスピン作用素であり

$$S^{(j)}\cdot S^{(j+1)}=S_{x}^{(j)}S_{x}^{(j+1)}+S_{y}^{(j)}S_{y}^{(j+j)}+S_{z}^{(j)}S_{z}^{(j+1)}$$

とする。F.D.M.Haldaneが主張したのは，ハミルトニアン H_{AF} の基底状態は，スピンが半奇数の時，$S=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2}$，質量零の場の量子論のような振るまいをし，スピンが整数の時 $S=1,2,3,4\cdots$ 質量正の場の量子論のような振るまいをするということであった。当初，このような主張が正しいかどうか分からないため直ぐに受け入れられなかったようであるが，その後，F.D.M.Haldane の主張を裏付ける理論的な結果や実験が得られてい

る。1次元反強磁性ハイゼンベルク模型のハミルトニアンの基底状態に関しては，未だにF.D.M.Haldaneの主張の数学的証明は得られていない。以下では背後にあると思われる数学的構造は何かを考えてみる。無限自由度量子系を扱う数学的枠組みとしてはO.BrattleiとD.Robinsonの教科書Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics I, II (Springer)に述べられている方法を用いる。

最初にハイゼンベルク模型についての古典的結果を復習する。
(i) スピンが$\frac{1}{2}$のハイゼンベルク模型は可解模型であり，有限系での固有ベクトル，固有値は代数的な方法で求められる。しかし得られた固有ベクトルの完全性にかんしては系の体積を無限大にする極限では漸近的に成立すると考えられている。相関関数の表示はあるが、一般の局所物理量の2点相関関数の空間方向の減衰は容易に見える表示ではないので数学的厳密性に徹底的に拘るとスピン$\frac{1}{2}$の可解系でもF.D.M.Haldaneの主張は確認できるわけではない。
(ii) スピンが半奇数の1次元反強磁性ハイゼンベルク模型のスペクトルギャップに関してI. Affleck and Elliot Liebは，次ぎのような二分律を証明した。(I. Affleck and Elliot Lieb *Lett.Math.Phys.*(1986))
スピンが半奇数$S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2} \cdots$であるとき，次ぎのいずれかが成立する。
(a) 体積無限大の極限においてハミルトニアンのスペクトルギャップは閉じる。

$$\inf spec(H) \cap (0, \epsilon) \neq \emptyset \quad \forall \epsilon > 0$$

(b) 体積無限大の極限において基底状態は一意的ではない。
このAffleck- Lieb二分律では，有限体積での$SU(2)$不変ハミルトニアンの基底状態が非縮退であり，基底状態エネルギーの上には体積に反比例する固有値があることを上のように読み替えている。基底状態が一意的でないというのは並進不変対称性の自発的破れがおこるであろうと理解されている。
(iii) その後、整数スピンのスペクトルギャップに関してHaldaneの予想を支持する例としてAKLT模型が発見された。I.Affleck, T.Kennedy, E.Lieb and H.Tasaki *Commun.Math.Phys.* (1987)　スピンが1の場合AKLT模型のハミルトニアンは

$$H = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \{S^{(j)} \cdot S^{(j+1)} + \frac{1}{3}(S^{(j)} \cdot S^{(j+1)})^2\}$$

で与えられる。この模型の重要なポイントの一つは有限体積ハミルトニアンを

$$H_n = \sum_{j=1}^{n} \{S^{(j)} \cdot S^{(j+1)} + \frac{1}{3}(S^{(j)} \cdot S^{(j+1)})^2\}$$

により定めると基底状態エネルギーはシステムサイズのちょうど比例することである。$E_n = ne_0$　このような性質を持つ基底状態は Frustration Free Ground State と呼ばれ Frustration Free Ground State を基底状態するハミルトニアンも Frustration Free であると呼ばれる。AKLT 模型のもう一つの重要なポイントは基底状態が行列上の完全正値写像の合成から出来ることである。このようにして定まる状態は、今では、Matrix Product State と呼ばれている。

(iv) AKLT 模型からの摂動論によりハイゼンベルク模型に近づけないかという疑問は当然起こるが、これに関しては D.Yarotsky が目覚ましい成果をあげた。(D.Yarotsky Comm. Math. Phys. 261 (2006))　すなわち

$$H = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \{S^{(j)} \cdot S^{(j+1)} + \beta(S^{(j)} \cdot S^{(j+1)})^2\}$$

のようにパラメータを入れると $|\frac{1}{3}-\beta|$ が小さい範囲では スペクトルギャップは開いたままであることが非常に巧妙な方法で証明されている。

(iv) M.Fannes, B.Nachtergaele, R.Werner は Matrix Product State の性質について数学的な一般論を初めて展開した (M.Fannes, B.Nachtergaele, R.Werner *Comm. Math. Phys. 144 (1992).*) 彼等は Matrix Product State を Finitely correlated States と呼んでいる。

Matrix Product State の構成法は、以下の議論のポイントであるので簡単に説明しよう。$\mathfrak{A}$ を 1 次元量子スピン系の局所物理的観測可能量がなす C^* 代数とし

$$\mathfrak{A} = \overline{\bigotimes_{\mathbf{Z}} M_n(\mathbf{C})}^{\|\ \|}$$

格子点 j 上での観測可能量を $A^{(j)}$: observable at j ($j \in \mathbf{Z}$, $A \in M_n(\mathbf{C})$). で表す。また領域 Λ 上に台 (support) を持つ物理量の部分代数

$$\mathfrak{A}_\Lambda = \{Q \mid support(Q) \subset \Lambda\}$$

と書き、格子上の並進を τ_k : shift on the lattice $\mathbf{Z}$, $\tau_k(A^{(j)}) = A^{(j+k)}$. で定めることにする。

以下では状態とは $\mathfrak{A}$ 上の正規化された正の汎関数という意味で使う。状態 φ が並進不変であるとは $\varphi(\tau_k(Q)) = \varphi(Q)$, $(Q \in \mathfrak{A})$. が成立することと定める。

Matrix Product State の定義
Matrix Product State は次のようにして定まる並進不変状態 φ である。
$\mathfrak{K}$ は有限次元ヒルベルト空間, ψ は $\mathfrak{B}(\mathfrak{K})$ の忠実な状態 ψ : $\mathfrak{B}(\mathfrak{K}) \to \mathbf{C}$ であり E は完全正値写像

$$E : M_n(\mathbf{C}) \otimes \mathfrak{B}(\mathfrak{K}) \to \mathfrak{B}(\mathfrak{K}) \tag{1.1}$$

で次の不変性の条件をみたすとする。

$$\psi(E(1 \otimes R)) = \psi(R), \quad R \in \mathfrak{B}(\mathfrak{K}).$$

三つ組み $\{\mathfrak{K}, E, \psi\}$ を使って物理量 $\cdots 1 \otimes Q_1 \otimes \cdots \otimes Q_N \otimes 1 \cdots \in \mathfrak{A}$, について

$$\begin{aligned}&\varphi(\cdots Q_1 \otimes Q_2 \otimes \cdots \otimes Q_N \cdots) = \\ &\psi(E(Q_1 \otimes E(Q_2 \otimes \cdots E(Q_N \otimes 1) \cdots))\end{aligned} \tag{1.2}$$

とおくと $\mathfrak{A}$ の状態 φ が定まる。

定理 (Fannes Nachtergaele,Werner)
Matrix Product State φ が純粋状態であるとき φ はスペクトルギャップを持つハミルトニアンの Frustration Free Ground State である。

ある意味で逆も成立する。
定理 (T.M.1999)
次の二条件をみたす並進不変・有限有効レンジ (finite range) ハミルトニアンの純粋基底状態は Matrix Product State である。
(i) Frustration Free Ground State が存在する。
(ii) 体積有限での基底状態の次元は、システムの大きさに関して有界である。

$$dim \text{ ground states of } H_n \ \leq C$$

Matrix Product State は並進不変状態空間の中で汎弱位相で稠密に存在

することが分かっている。一般の基底状態の次元の有界性の条件は非常に特殊であるが、ある種の基底状態に対しては Matrix Product State は良い近似を与えると期待される。その反面、Matrix Product State に対称性に関する制限がある。

2 Matrix Product State の対称性

状態に（大域的）ゲージ不変性があるとき Matrix Product State を定める完全正値写像は群の作用と可換である。このことから Matrix Product State に対称性には制限がある。

命題　(T.M.2000)

(i) $\mathfrak{A}$：スピンが $s = 1/2$ の 1 次元量子スピン系とし、状態 φ は並進不変な純粋 Matrix Product State であるとする。もし φ が $SU(2)$ の $s = 1/2$ 表現の制限から定まる $U(1)$ ゲージ作用で不変であるならば φ は積状態である。

(ii) $\mathfrak{A}$ はスピンが半奇数である 1 次元量子スピン系とする。φ が並進不変な純粋 Matrix Product State であれば φ は $SU(2)$ ではない。

(ii) を言い換えると $s \in \{1/2, 3/2, 5/2 \cdots\}$ ならば $SU(2)$ 不変な Matrix Product State は周期が偶数の周期的状態に分解され、自発的な並進不変性の破れを意味する。

この命題は群が $SU(2)$ だけでなく一般のコンパクト群の 1 次元スピン系へのゲージ作用（積作用）に対して拡張することが出来る。

次にもう少し広い範囲で Matrix Product State の状態の構成法を拡張できないかを考えてみよう。一つの候補として Split 性を持つ状態がある。Split 性とは量子系が二つの部分系から成っている時、状態が、そのらの部分の弱い意味での統計的独立性を持つことを意味する。もともと R.Haag 流の局所場の量子論の研究で導入された概念であるが、スピン系の設定では次のように定義できる。

$\Lambda \subset \mathbf{Z}$ は, $\mathbf{Z}$ の無限部分集合とし $\mathfrak{A}_\Lambda$ は Λ 内に台を持つ物理量が定める $\mathfrak{A}$ の部分代数とする。

定義

$\mathfrak{A}$の状態φが（ΛとΛ^cについて）Split 性を持つとはφが$\mathfrak{A}_\Lambda$と$\mathfrak{A}_{\Lambda^c}$の積状態と準同値であることと定める。

$$\varphi \simeq \psi_\Lambda \otimes \psi_{\Lambda^c}$$

ここでψ_Λは$\mathfrak{A}_\Lambda$の状態であり、ψ_{Λ^c}は$\mathfrak{A}_{\Lambda^c}$の状態である。

以下では$\Lambda = \Lambda_R = [1,\infty) \cap \mathbf{Z}$ $\Lambda^c = \Lambda_L = (-\infty, 0] \cap \mathbf{Z}$とする。このとき Split 性を持つ状態の例として (i) 短距離相互作用を持つハミルトニアンのギブス状態　(ii) Matrix Product State などがある。

1 次元量子スピン系において Split 性を持つ並進不変な純粋状態φは Matrix Product State の表示 (1.2) を使って表せる。φの GNS 表現を使って自然に$\mathfrak{K}$（一般には無限次元ヒルベルト空間）と$\mathfrak{B}(\mathfrak{K})$（$=\mathfrak{K}$上の有界線形作用素全体）の忠実な状態$\psi$および完全正値写像$E$

$$E : M_n(\mathbf{C}) \otimes \mathfrak{B}(\mathfrak{K}) \to \mathfrak{B}(\mathfrak{K})$$

$$\psi(E(1 \otimes R)) = \psi(R), \quad R \in \mathfrak{B}(\mathfrak{K}).$$

が構成出来て (1.2) が成り立つ。ただし完全正値写像Eは

$$E(e_{kl} \otimes R) = S_k^* R S_l \quad (e_{kl}\text{: matrix units}),$$

$$\sum_{k=1}^{n} S_k^* S_k = 1, \{S_l^*, S_l\}'' = \mathfrak{B}(\mathfrak{K}).$$

みたす作用素S_kにより与えられる。最後の条件$\{S_l^*, S_l\}'' = \mathfrak{B}(\mathfrak{K})$がなければ並進不変状態は常に (1.2) の形で表される。

並進不変な純粋状態が Split 性を持つ時、matrix product state と同様の対称性の制限がある。

定理 (T.M. 2000 CMP) 半奇数スピンの 1 次元量子スピン系では$SU(2)$不変で Split 性を持つ並進不変な純粋状態は存在しない。

matrix product state の結果により整数スピンの 1 次元量子スピン系では$SU(2)$不変で Split 性を持つ並進不変な純粋状態が存在するので、ハイゼンベルク模型について Haldane の予想との関係が問題となる。「スペクトルギャップの存在または相関関数の指数的減衰が Split 性を意味するか？」という自然な疑問を我々は 2000 年の論文で未解決問題としてあげた。それに対して Entanglement Entropy の面積則に関する結果が解答を与えることを次ぎに説明しよう。

3 Entanglement Entropy

以下では 1 次元系での Entanglement Entropy の面積則について解説する。最初に記号を固定する。有限次元量子系（例えば有限レベルの系）の状態 φ に対して φ の密度行列 ρ_φ と量子エントロピー $s(\varphi)$ を

$$\varphi(Q) = tr(\rho_\varphi Q), s(\varphi) = -tr(\rho \ln \rho) \neq 0$$

により定める。1 次元量子スピン系の状態 φ を有限領域 Λ に制限して得られる状態を φ_Λ と書き、密度行列は $\rho_\varphi(\Lambda)$ と記すことにする。

定義 φ は 1 次元量子スピン系の純粋状態であるとする。

(i) $s(\varphi_\Lambda)$ を Λ に対する Entanglement Entropy と呼ぶ。

(ii) Entanglement Entropy の面積則が成立するとは

$$\sup_n s(\varphi_{[0,n)}) < \infty$$

が成立することと定める

高次元格子模型では有界部分領域の Entanglement Entropy の増大度は領域の（体積ではなく）境界の大きさに比例する場合を考えるので「面積則」という言葉を使うのである。Matrix Product State およびその高次元化した状態では Entanglement Entropy の面積則が成立する。一方、スペクトルギャップを持たない XY 模型

$$H = -\sum_j \{\sigma_x^{(j)}\sigma_x^{(j+1)} + \sigma_y^{(j)}\sigma_y^{(j+1)}\}$$

の（一意的）基底状態では $s(\varphi_{[0,n)}) = O(\ln n)$ であり面積則が成立しない。

命題 (T.M.2011)
φ は 1 次元量子スピン系の純粋状態であるとする。φ について Entanglement Entropy の面積則が成立するならば Split 性が $\{j > 0\}$ と $\{j \leq 0\}$ について成立する。

この命題と M.Hastings, F.Brandao および M.Horodecki(2012) 等の結果を応用するとスペクトルギャップの存在または相関関数の指数的減少が

Split 性を導くことが分かる。

定理 (M.Hastings 2007)
1 次元量子スピン系のハミルトニアン H は有限有効距離を持つ相互作用であり 、条件

$$H = \sum_{j \in \mathbf{Z}} h_j, \quad \sup ||h_j|| < \infty$$

をみたすとする。φ は H の基底状態で、次の意味でスペクトルギャップを持つと仮定する。

$$\varphi(Q^*[H[H,Q]]) \geq \gamma(\varphi(Q^*Q) - |\varphi(Q)|^2)$$

この時、Entanglement Entropy の面積則が成立する。

定理 (F.Brandao and M.Horodecki, 2012)
φ は 1 次元量子スピン系の並進不変な純粋状態とする。正数 C と m があり次の意味で二点相関関数の一様指数的減衰が成立するならば Entanglement Entropy の面積則が成立する。

$$|\varphi(\tau_j(Q_1)Q_2) - \varphi(Q_1)\varphi(Q_2)| \leq Ce^{-mj}||Q_1||||Q_2||$$

$$Q_1 \in \mathfrak{A}_{(-\infty,0]},\ Q_2 \in \mathfrak{A}_{[1.\infty)},\ j > 0,$$

以上の結果をまとめると極めて一般的な形で $SU(2)$ 不変な基底状態について Affleck-Lieb 二分律が成立することが分かる。

系　スピンは半奇数の 1 次元量子スピン系を考える。$SU(2)$ 不変で有限有効距離を持つ相互作用の並進不変ハミルトニアンの基底状態について次のいずれかが成立する。
(i) ハミルトニアンのスペクトルギャップは閉じる。
(ii) 基底状態は一意的ではない。

以上の結果の類似はスピンを持たないフェルミ粒子の生成消滅演算子が生成する CAR 代数の場合にも成立する。

1 次元整数格子 $\mathbf{Z}$ の CAR 代数 $\mathfrak{A}_{CAR}$ は

$$\{c_j, c_k\} = 0,\ \{c_j^*,\ c_k^*\} = 0,\ \{c_j, c_k^*\} = \delta_{jk}1 \quad j,k \in \mathbf{Z}$$

をみたす c_j^*, c_k^* が生成する C^* 代数であるとする。並進 τ_j および $U(1)$ ゲージ作用 γ_θ を

$$\tau_j(c_k) = c_{j+k},\ \gamma_\theta(c_j) = e^{i\theta}c_j$$

により定まる $\mathfrak{A}_{CAR}$ の自己同型とする。並進不変かつゲージ不変で有限有効距離相互作用を持つハミルトニアン

$$H = \sum h_j, \quad \gamma_\theta(h_j) = h_j(\forall\theta \in [0, 2\pi]), \quad \tau_k(h_j) = h_{j+k}$$

を考える。CAR 代数 $\mathfrak{A}_{CAR}$ の $U(1)$ 不変で有限有効距離を持つ相互作用の並進不変ハミルトニアン

定理　H の純粋基底状態 ψ は並進不変かつ $U(1)$ 不変であるとする。ψ が非自明（フォック真空状態あるいは反フォック真空状態でない）

$$0 < \psi(c_j^* c_j) < 1 \quad \forall j \in \mathbf{Z}$$

であればスペクトルギャップは閉じる。（いくらでも小さいエネルギーの励起がある）