

状態空間の最小変形に基づく 非摂動有効ハミルトニアンの数値的構成

Tsutomu Momoi | RIKEN CEMS

with Owen Benton (Queen Mary University of London)

Numerical block diagonalization + numerical linked-cluster expansion

2026年9月3日 10:50–11:15 | KEK

T. Momoi and O. Benton
SciPost Physics 21, 030 (2026)

1. Motivation

局所的な自由度を基準に低エネルギー有効模型を構成する

$$H = H_0 + V :$$

H_0 : 局所自由度が明確 (固有基底が局所自由度の直積で表される場合を考える)

H_0 の固有状態 $\{|a_i\rangle\}$ が基準となる基底と target sector P を定める

$|a_i\rangle = \text{local spin } \uparrow, \downarrow / \text{local occupation } n = 0, 1, \dots$

V : これらを混成

混成後も、元の局所自由度との対応をできるだけ保った H_{eff} を作りたい

弱結合 : H_0 の target space から断熱的につながる固有空間を追う

方法：注目する部分空間とそれ以外の部分空間の間のブロック対角化

$$H = H_0 + V$$

original basis $\{|a_i\rangle\}$

H_{PP}	V_{PQ}
V_{QP}	H_{QQ}

P: target / Q: high energy

block diagonalization
 $T^\dagger H T$



基底変換

$$|b_i\rangle = \sum_j |a_j\rangle T_{ij} \quad T^\dagger T = 1$$

transformed basis $\{|b_i\rangle\}$

H_{eff}	0
0	H_{high}

$$\langle b_i | H | b_j \rangle = [T^\dagger H T]_{ij}$$

H_{eff} は、変換後の基底 $\{|b_i\rangle\}$ で表したハミルトニアンの低エネルギーブロック

問題：ブロック対角化は一意ではない

同じブロック対角化を実現する基底が
無数にある

$$T^\dagger H T = \text{diag}(\mathbf{H}_{\text{eff}}, \mathbf{H}_{\text{high}})$$

ならば

$$T \rightarrow T F, \quad F = \text{diag}(\mathbf{F}_{\text{low}}, \mathbf{F}_{\text{high}})$$

も同じくブロック対角化する

$$F^\dagger T^\dagger H T F = F^\dagger \text{diag}(\mathbf{H}_{\text{eff}}, \mathbf{H}_{\text{high}}) F$$

変換後の基底をどのように選ぶか？

物理的意味：元の局所自由度との対応をできるだけ保つ

Cederbaum, Schirmer & Meyer

元の基底を必要以上に変形しない

基底の変形量

$$\begin{aligned} d_{\text{basis}}^2 &\equiv \sum_i \| |b_i\rangle - |a_i\rangle \|^2 \\ &= \| T - I \|_F^2 \end{aligned}$$

Cederbaum, Schirmer & Meyer, J. Phys. A **22**, 2427 (1989)

定理：（適切な非特異性条件の下で） $\|T - I\|_F$ を最小にするブロック対角化変換は一意に定まる

ただし、この変換には H の全固有状態が必要

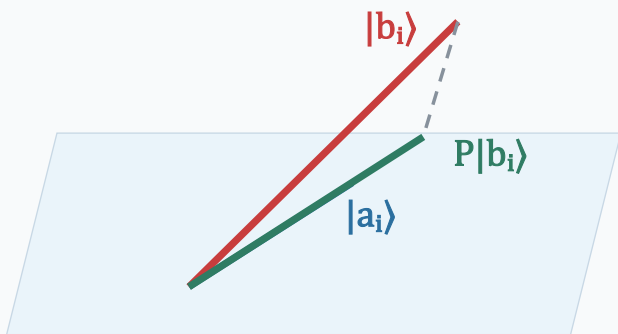
2. Minimal deformation principle

低エネルギー sector 内の「基底変形」だけを測る

Momoi & Benton, SciPost Physics **21**, 030 (2026)

$$P = \sum_{i=1}^n |a_i\rangle\langle a_i|: \text{基準部分空間 (target space)}$$

変換後の基底ベクトルを P に射影する



基準部分空間 P

$$T_{11} = [\langle a_i | b_j \rangle] = \text{target-sector block of } T$$

target sector 内での変形量を定義

$$d_{\text{tar}}^2 \equiv \sum_{i=1}^n \|P|b_j\rangle - |a_i\rangle\|^2 \\ = \|T_{11} - I_n\|_F^2$$

注意:

ここでは、採用する
 n 個の固有状態は
与えられたものとする

この量は、変換後の基底を target sector に
射影したときの基底変形量

[Criterion]: H をブロック対角化する T のうち、 $\|T_{11} - I_n\|_F$ を最小にする.

[定理]: 選ばれた n 個の固有状態 $\{|\varphi_j\rangle\}$ に対して、最小変形する T_{11} と $H_{\text{eff},11}$ は一意に定まる.

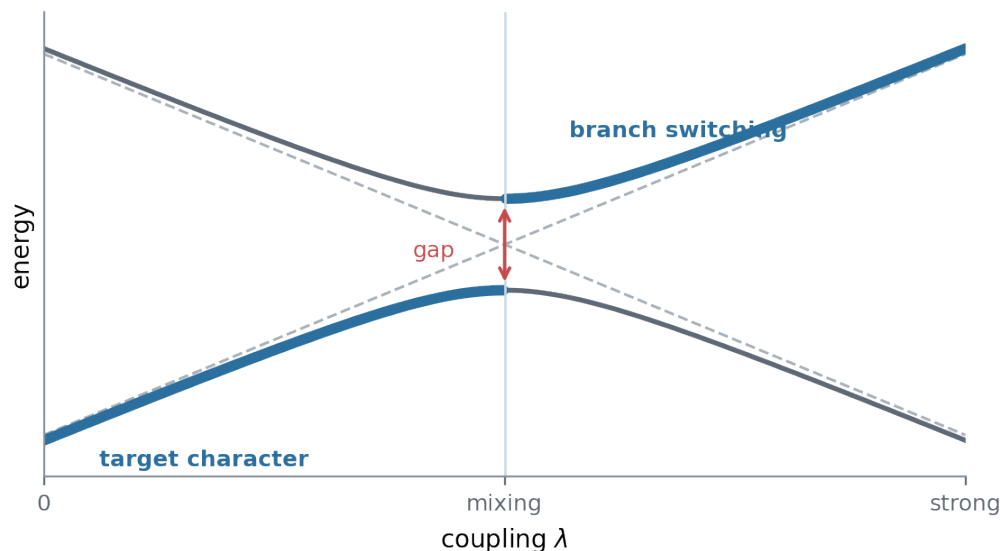
固有ベクトルの target block

$$S_{11} = [\langle a_i | \varphi_j \rangle]_{i,j=1,\dots,n} \\ = U \Sigma V^\dagger \quad (\text{SVD})$$

$$T_{11} = U \Sigma U^\dagger$$

では、その n 個をどう選ぶのか？

強結合領域では target space の同定が自明でなくなる



avoided level crossing で
固有状態の性格が入れ替わる

1 候補となる n 個の固有状態 $\{|\varphi_j\rangle\}$ の集合 $\mathcal{S}$ を選ぶ

2 固有ベクトルの target block

$$S_{11}^{(\mathcal{S})} = [\langle a_i | \varphi_j \rangle]_{i \in \text{target}, j \in \mathcal{S}}$$

を作り、SVDから $T_{tar}(\mathcal{S})$ を構成

3 $d_{tar}(\mathcal{S}) = \|T_{tar}(\mathcal{S}) - I_n\|_F$ を評価

$$\mathcal{S}^* = \arg \min_{\mathcal{S}} d_{tar}(\mathcal{S})$$

エネルギー順や個々の固有状態の断熱的追跡ではなく、
基準部分空間 P への近さで固有空間を選ぶ

同じ最小変形原理が、2つの問題を解決する

① target space を同定

基準部分空間 P に最も近い固有空間を選ぶ

avoided crossing では branch を乗り換え得る

② 変換後の基底を固定

選んだ固有空間内で最小変形する基底を一意に選ぶ

[定理]より、最小変形では、

$$T_{11} = U \Sigma U^\dagger$$

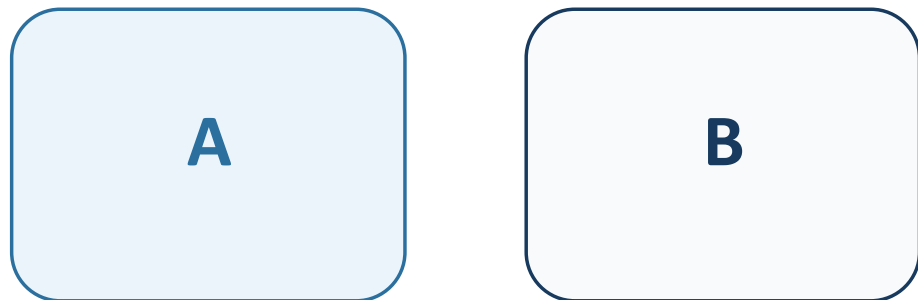
$$H_{\text{eff},11} = UV^\dagger \Lambda_1 VU^\dagger$$

有限クラスター上の H_{eff} が一意に定まる → 次の問題：無限系へどう接続するか

3. Cluster additivity

無限系へ進むための条件：cluster additivity

disconnected clusters



$$H_{\text{eff}}^{A \cup B} = H_{\text{eff}}^A \otimes \mathbf{1}_B + \mathbf{1}_A \otimes H_{\text{eff}}^B$$

非連結な部分系では、有効ハミルトニアンも
部分系ごとに分離していなければならない

- linked-cluster expansion では、非連結部分クラスターの寄与が厳密に相殺される必要がある
- target space が縮退した低エネルギー部分空間をなす場合、この性質は自動的に満たされる

基底状態が非縮退な系では、最小変形だけではクラスター加法性が破れることがある

V が励起数を保存しない

$$|\phi^{(1)}\rangle = a|1\rangle + b|0\rangle + c|2\rangle + \dots$$

非連結系 $A \cup B$ では、1-particle sector

$$\mathcal{H}_{A \cup B}^{(1)} = \mathcal{H}_{A \cup B}^{(1)} \otimes \mathcal{H}_{A \cup B}^{(1)} \oplus \mathcal{H}_{A \cup B}^{(1)} \otimes \mathcal{H}_{A \cup B}^{(1)}$$

に基底状態成分が混入



この sector 分解が単純に因子化しない



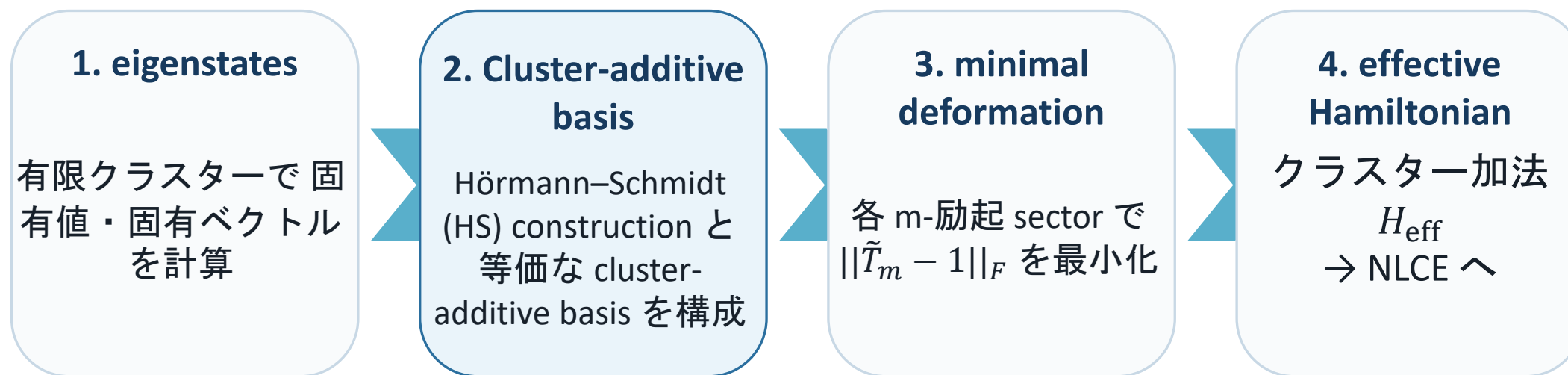
非連結クラスター由来の寄与



NLCE のクラスター重みが
正しく定義できない

ポイント : minimal deformation と cluster additivity は別の要請

解決法：cluster-additive basis を先に作り、その上で最小変形



$$\tilde{H}_{\text{eff}} = \tilde{T}^{-1} \tilde{H} \tilde{T} \quad \text{一般の similarity transformation を含む}$$

結果：HS construction と同じ H_{eff} が得られ、その構成を明示的な「最小変形」原理として解釈できる

4. 無限系への外挿

Numerical linked-cluster expansion : 有限クラスターから無限系の H_{eff} へ



cluster size / spatial range を増やす

$$W_C = O_C - \sum_{S \subset C} W_S$$

$$O_{\text{bulk}}^{(n)} = \sum_{C, |C| \leq n} l_C W_C$$

- 各連結クラスター C でブロック対角化 $\rightarrow H_{\text{eff}}(C)$
- hopping / interaction の行列要素ごとに subcluster の寄与を再帰的に差し引く
- 結合定数 λ の級数ではなく、クラスターサイズを系統的に増やす展開
- 臨界点に近づくと有効結合が長距離化し、収束は遅くなる

有効結合を非摂動的に抽出 + 熱力学極限への系統的外挿

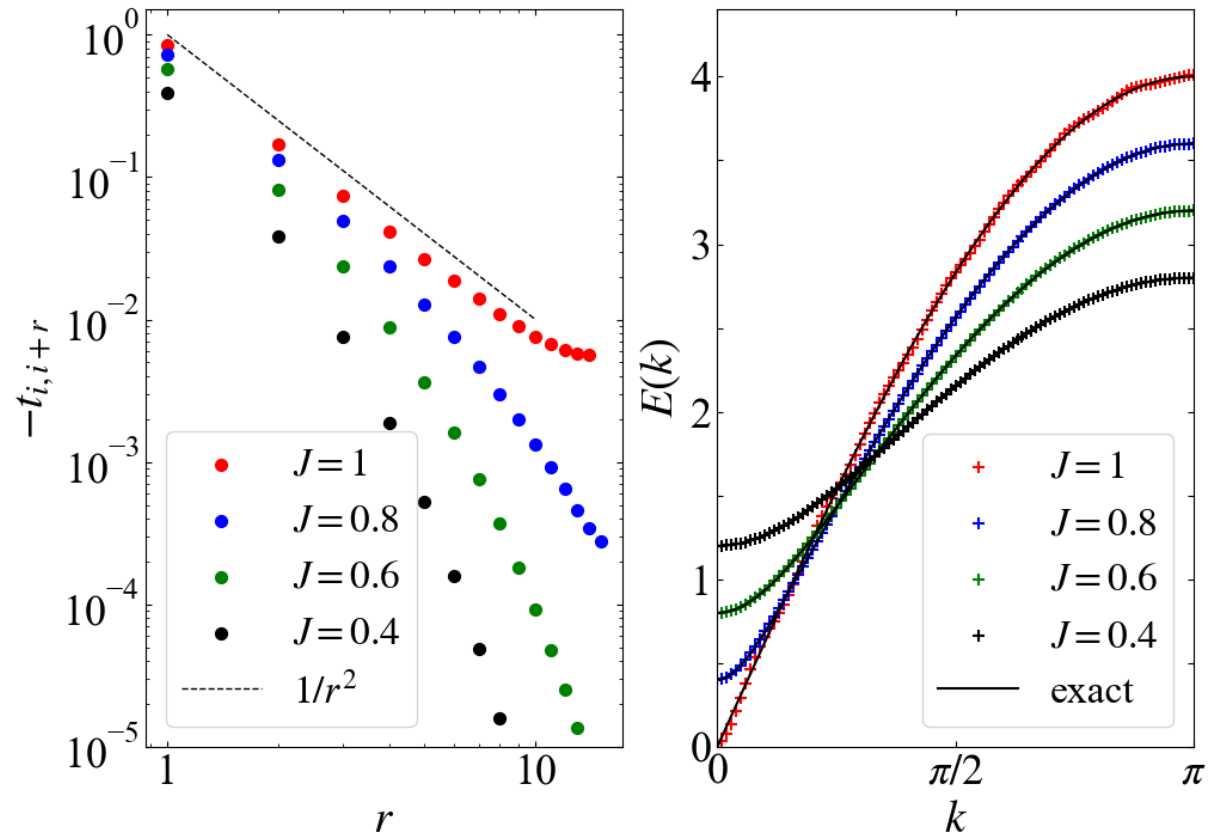
5. Applications

ベンチマーク：1次元横磁場 Ising 模型

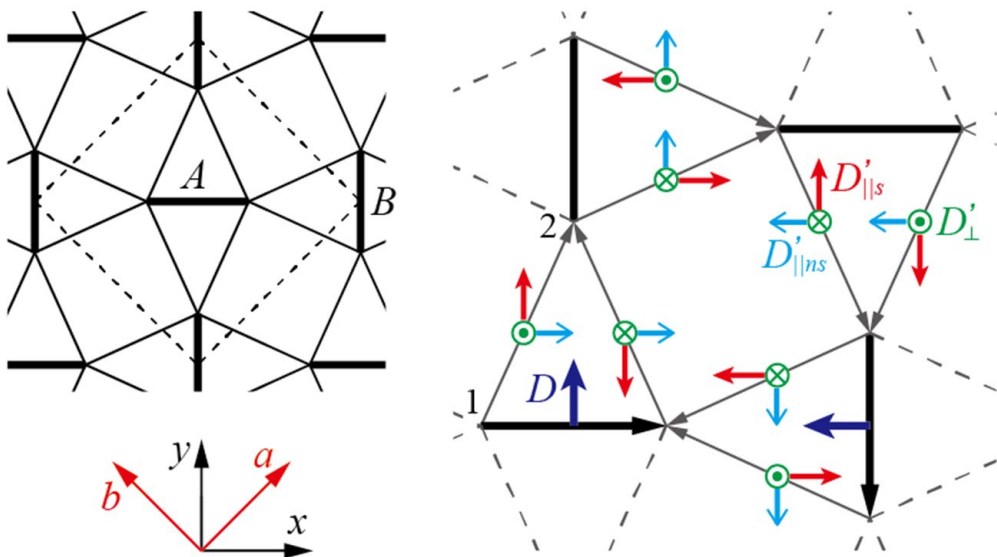
$$H = - \sum_i \sigma_i^z - J \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x$$

$J = 1$ が量子臨界点。 $J < 1$ のギャップを持つ常磁性相で one-magnon H_{eff} を構成。

- 厳密な分散と NLCE の結果がよく一致
- $J \rightarrow 1$ で hopping t_r が長距離化：
 H_{eff} の空間的な広がりに臨界性が反映
- 有限クラスターの非摂動対角化と NLCE から、
無限系の準粒子分散を再構成できる



実在物質への応用 : $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ の triplon 有効模型



Shastry–Sutherland 格子
+ Dzyaloshinskii–Moriya 相互作用

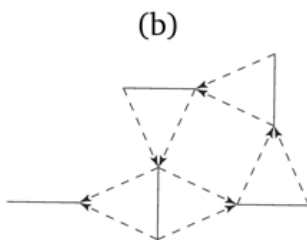
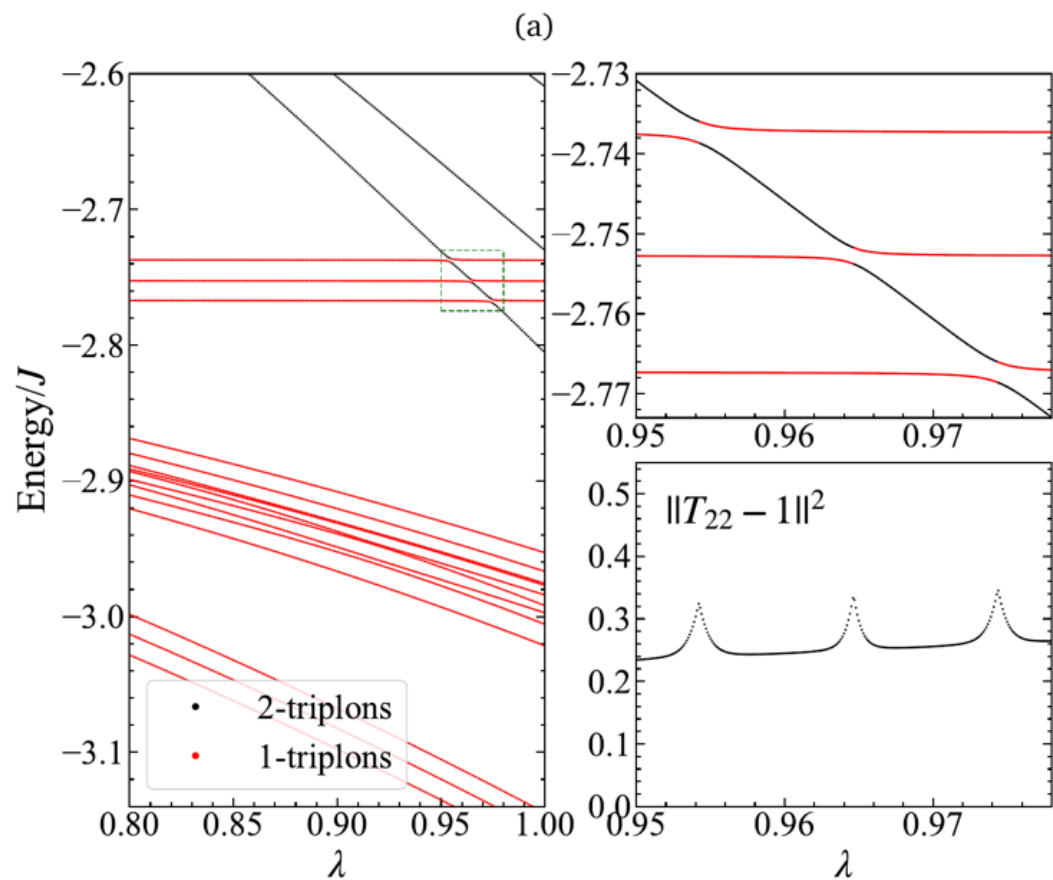
$$H_D = \sum_{\langle ij \rangle_1} [J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)] - h \sum_j S_j^z$$

$$H_{ID} = \sum_{\langle ij \rangle_2} [J' \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{D}'_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)]$$

realistic parameter: $J'/J \simeq 0.62$

- 無摂動基底 : 各 dimer の singlet / triplet
- target : one-triplon sector (unit cell に 2 dimers $\rightarrow$ 6 bands)
- DM 相互作用が triplon 数の異なる sector を混合 $\rightarrow$ avoided crossing と固有状態の入れ替わりが生じる

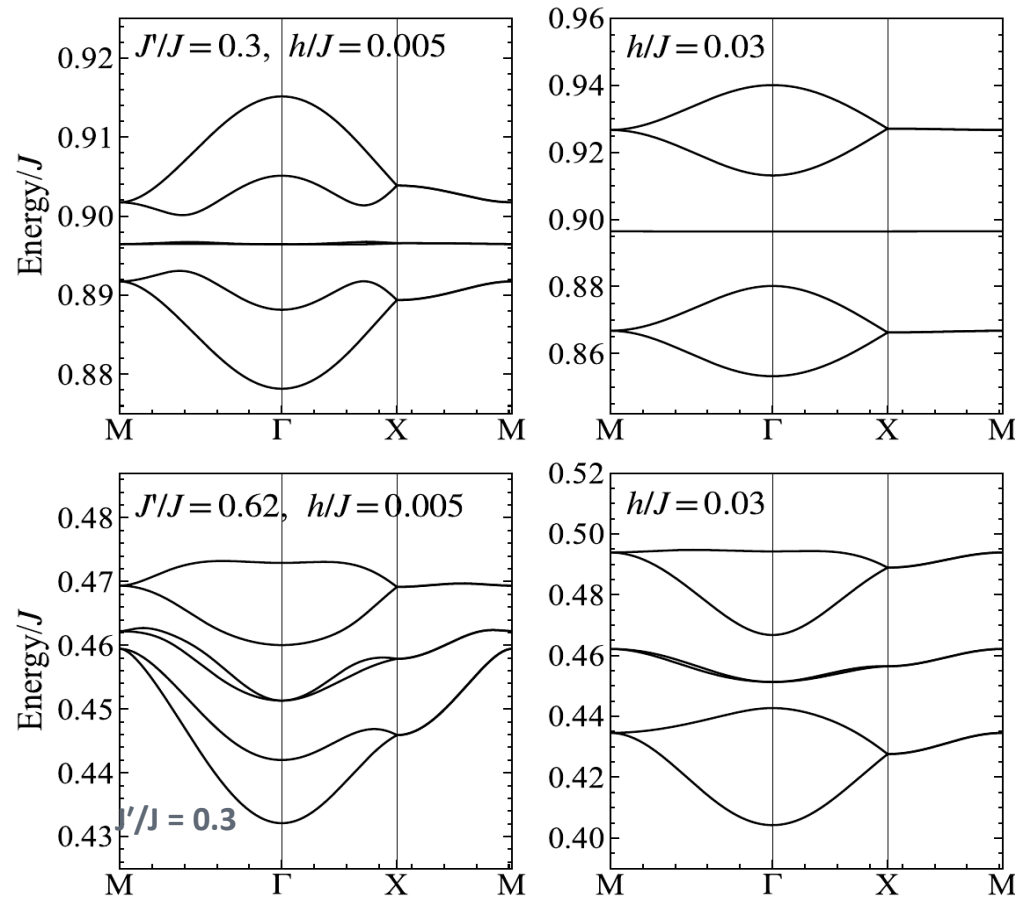
有限クラスターでの固有状態選択



- λ を 0 から 1 まで増やすと、1-triplon と 2-triplon 由来の準位が接近
- avoided level crossing で固有状態の triplon character が入れ替わる
- 最小変形基準により、one-triplon character を保つ固有状態 branch を選択する
- この固有状態集合を用いて H_{eff} の行列要素を計算

個々の固有状態 branch の断熱的連続性ではなく、one-triplon target space への近さを追う

NLCE から無限系の triplon バンドを再構成



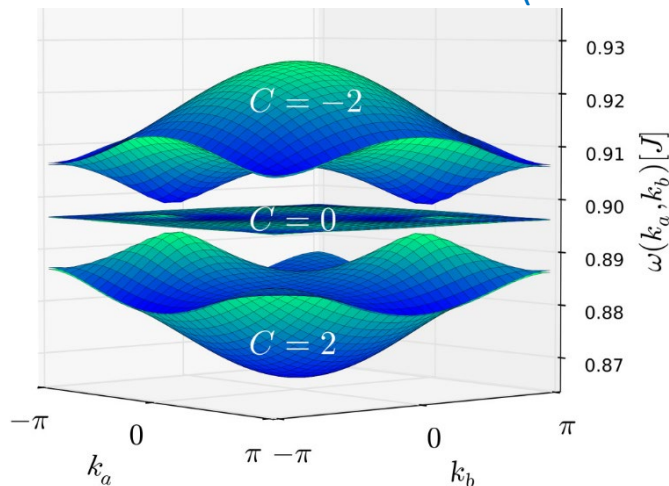
- 最大 7 dimers (14 spins) の連結クラスターを使用
- $J'/J = 0.62$ では、非摂動効果によりバンド分散が大きく繰り込まれる

有限クラスターでブロック対角化
→ 有効結合を抽出
→ 無限系のバンド構造

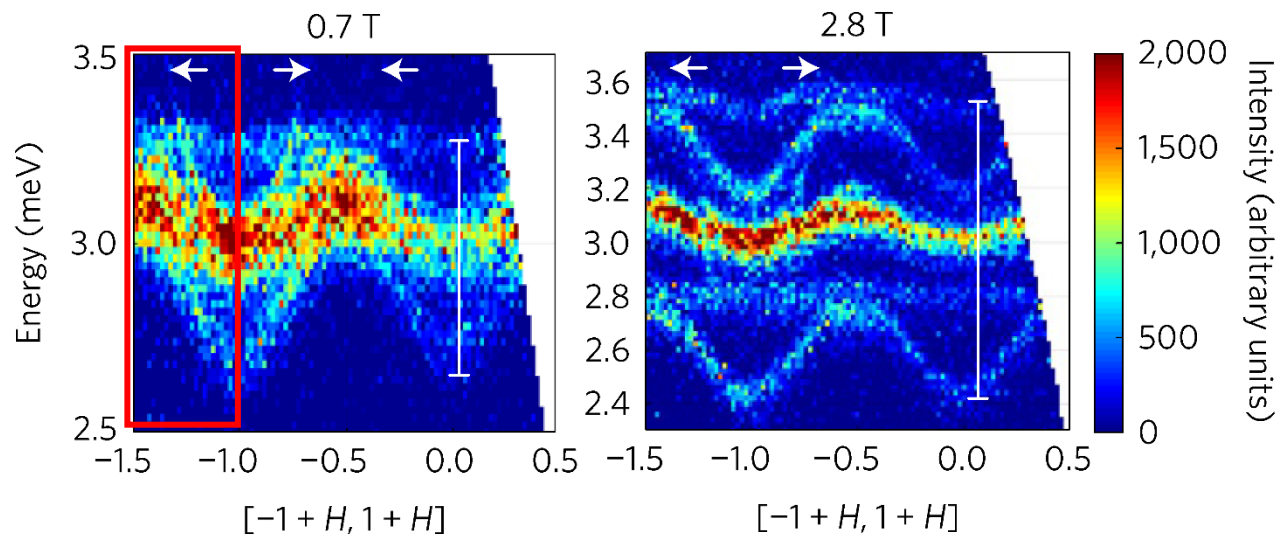
非摂動効果と実験との比較

摂動計算
(7th order)

M. Malki and K. P. Schmidt (PRB 2017)

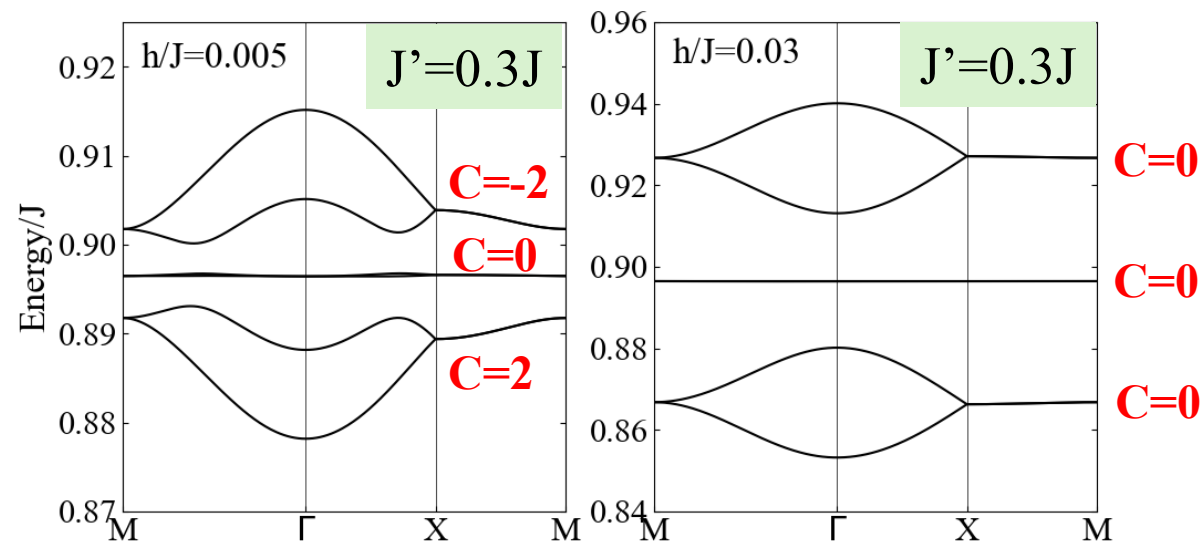


Inelastic neutron scattering

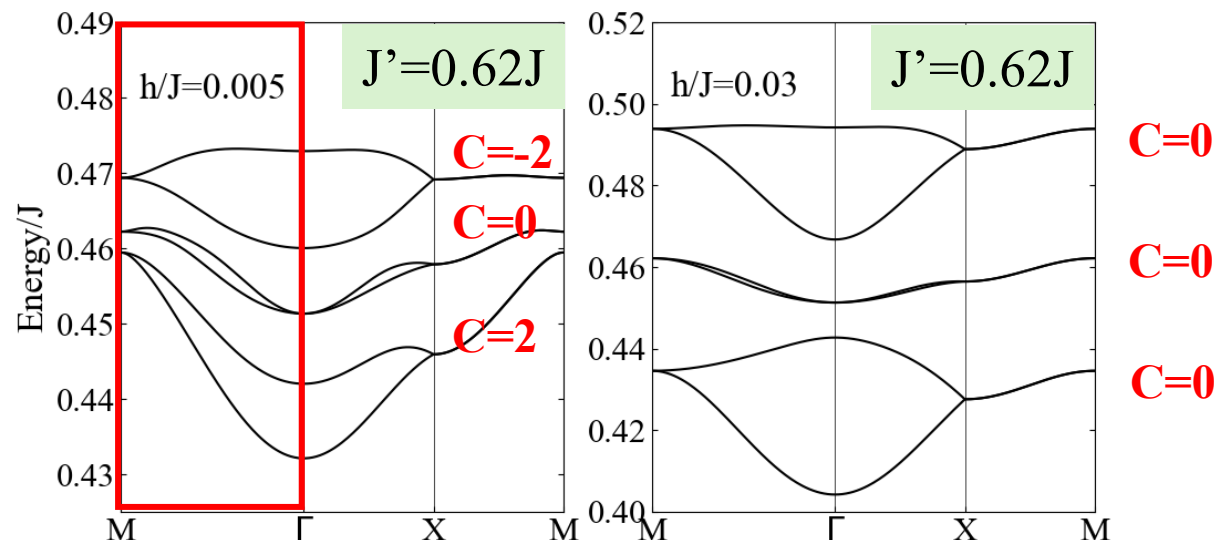


P.A. McClarty et al. Nature Phys. (2017)

Block-diagonalization + NLCE



- ✓ Center band is flat.
- ✓ Upper & lower bands are symmetric, like perturbation theory



- ✓ All bands become dispersive.
- ✓ The upper and lower bands are asymmetric.

6. Summary

- 1 Target-space selection** 基準部分空間 P に最も近い固有空間を「状態空間の近さ」で同定
- 2 Minimal deformation** 同じ最小変形原理により、ブロック対角化の基底選択の自由度も一意に固定
- 3 Cluster additivity** 基底状態が非縮退なギャップ系では、cluster-additive basis を先に構成してから、最小変形によるブロック対角化を行う
- 4 NLCE to the bulk** 有限クラスターで得た非摂動情報を NLCE により熱力学極限へ接続

有効理論の target space を、強結合でも「状態空間の近さ」で追跡する。
その上で cluster additivity と NLCE を組み合わせ、無限系の H_{eff} を構成する。