

令和元年6月17日現在

機関番号：12102

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2018

課題番号：16K13845

研究課題名（和文）四元数のトポロジカル相での意義の解明への挑戦：多体問題と時間反転の破れ

研究課題名（英文）Use of quaternions for topological phases: many body problem and time reversal symmetry breaking

研究代表者

初貝 安弘 (Hatsugai, Yasuhiro)

筑波大学・数理物質系・教授

研究者番号：80218495

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,700,000円

研究成果の概要（和文）：時間反転対称性を持つフェルミ粒子系では一粒子状態はクラマース縮退するが、その2状態を特定の位相で組合せて波動関数自体を四元数表示することは申請者の発案である。一方、トポロジカル相の典型例である量子ホール効果においては、チャーン数とよばれる波動関数由来のベリー接続が本質的であったことに対応し、一般のトポロジカル相においてもベリー接続はやはり本質的である。よって、時間反転対称な系においては、四元数で表示されるクラマース縮退した状態のベリー接続が本質的となる。本課題では、この観点から四元数表示の(1)多体問題への適用と(2)時間反転対称性の破れの議論への応用という極めて挑戦的な研究を実施した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

時間反転対称なフェルミオン系のハミルトニアンが四元数表示されることはDyson以来のよく知られた事実であるが、そのクラマース縮退した波動関数を組み合わせることで波動関数を四元数とできることは申請者の独自の発案であり、この手法をトポロジカル相に対するベリー接続の理論として適用し、電子間相互作用を議論することならび時間反転対称性の破れを議論することは新しい展開をもたらし、学術的意義は大きい。また、四元数という基本的で有用な概念を広く普及するという社会的な意義もある。

研究成果の概要（英文）：As for a fermionic system with time-reversal invariance, Any one particle state is inevitably degenerate with some other state this is known as the Kramers degeneracy. Combining the Kramers pair with a suitable phase, one obtains a quaternionic wave function. This is an idea of the applicant. Also the Berry connection has been quite useful for a study of topological phases as in the case of the quantum Hall effects. Then the quaternionic Berry connection is useful for the study of topological phases with time-reversal invariance. Based on the facts, we have tried to use a quaternionic representation for the time-reversal symmetric systems with electron-electron interaction and also discuss effects of weak time-reversal symmetry breaking.

研究分野：物性理論（トポロジカル相の理論）

キーワード：四元数 時間反転対称性 クラマース縮退 ベリー接続 電子間相互作用 時間反転対称性の破れ

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

スピン1/2をもつフェルミ粒子系のハミルトニアンは系が時間反転対称性を持つとき、四元数により表示できることはよく知られている。四元数(Quaternion)とは複素数の2行2列行列で表現できるので、ハミルトニアンは2行2列のブロック対角行列となる。このとき系の1粒子状態はクラマース縮退とよばれる縮退を持つ。本申請者の独自の発案はこの縮退した2つの状態をある特定の位相の組合せでペアにすることで波動関数自体が四元数で表示できる、つまり、2行2列のブロック化された波動関数となることである。

この手法は申請者の発案によるもので、極めて萌芽的なものであり、種々の具体的な問題に対する有効性は未だ適用例が少なく、未確立であった。

### 2. 研究の目的

四元数(Quaternion)の時間反転対称な系での意義は周知の事実であるが、クラマース対から1つの四元数ベクトルを構成し、見かけ上縮退を消し四元数のペリー接続を簡明に構築することは申請者の発案である。この萌芽的な申請者のアイデアの具体的な問題での有効性の確立と質的な展開を目指し具体的な問題に適用可能な形に理論を整備することが本研究の目的である。具体的には多体問題と時間反転対称性の破れという、極めて挑戦的な問題を設定した。

### 3. 研究の方法

トポロジカル相の典型例である量子ホール効果においては、チャーン数とよばれる波動関数由来のペリー接続が本質的であったことに対応し、一般のトポロジカル相においてもペリー接続はやはり本質的である。よって、時間反転対称な系においては、四元数で表示されるクラマース縮退した状態のペリー接続が本質的となる。波動関数ひいてはペリー接続が四元数となることでコンパクトに表示され、議論の見通しが良くなることが重要である。

これらのトポロジカル相の研究では多様な格子構造に起因するバンド構造を議論に取りこむことが本質的に重要である。一方、多体問題では数値的計算を行う際の行列の次元が極めて大きくなることが困難の原因となり数値的研究を律速する。そのため、扱う空間次元を減少させるために本質的である、擬ポテンシャルの手法をバンド構造を適切に取りこむ形に整備し、その有効性を確立する。その上で多体問題におけるブレイクスルーを目指す。

さらには時間反転対称な系でのトポロジカル数として量子もつれの手法を用いることを申請者等は提案してきたが、本研究ではその独自の手法を時間反転対称性のやぶれの研究にも適用し、有意義な結果を得るために用いることを試みる。

### 4. 研究成果

本課題では、申請者の発案による上記の基礎理論の(1)多体問題への適用ならびに(2)時間反転対称性の破れの議論という極めて挑戦的な研究を実施した。(1)に関しては、問題を特定のバンドに射影することで一般の多体問題を部分空間に限り、多体問題の困難さを軽減することを目指し、擬ポテンシャルの構成を目指した。時間反転対称をつかわない一般の擬ポテンシャルの理論は完成しその有効性も示し論文も出版した。四元数表示による擬ポテンシャルの方法の検討も進み、その基礎理論はおよそ確立に向かっていて、現在各論を検討している。(2)に関しては、これも我々独自の手法である量子エンタングルメントを用いたトポロジカル数の手法を四元数化し、まず時間反転対称な系に適用することに成功した。また実四元数を複素化することで時間反転対称性の破れた系での意義を詳細に検討した。

その結果、当初計画していた研究以外にも多方面に多くの波及効果があり、多数の論文出版にいたるとともに多くの招待講演を行い有効な研究を実施することができたと評価できる。また、関連の解説記事も複数執筆し、関連分野の研究を含めて研究成果、研究分野の社会的意義を高めることにも、貢献できたと考えている。

### 5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計18件)全て査読あり

1. Yuta Takahashi, Toshikaze Kariyado, and Yasuhiro Hatsugai, "Weyl points of mechanical diamond", Phys. Rev. B 99 024102(1-8) (2019), DOI:10.1103/PhysRevB.99.024102
2. Koji Kudo, Haruki Watanabe, Toshikaze Kariyado, and Yasuhiro Hatsugai, "Many-Body Chern Number without Integration", Phys. Rev. Lett. 122 146601 (1-5) (2019),

DOI:10.1103/PhysRevLett.122.146601

3. Hiromu Araki, Tomonari Mizoguchi, and Yasuhiro Hatsugai, "Phase diagram of disordered higher-order topological insulator: A machine learning study", Phys. Rev. B 99, 085406 (1-8) (2019), DOI:10.1103/PhysRevB.99.085406
4. Tsuneya Yoshida, Robert Peters, Norio Kawakami, and Yasuhiro Hatsugai, "Symmetry-protected exceptional rings in two-dimensional correlated systems with chiral symmetry", Phys. Rev. B 99, 121101(1-5) (2019), DOI:10.1103/PhysRevB.99.121101
5. Tohru Kawarabayashi, Kota Ishii, and Yasuhiro Hatsugai, "Fractionally Quantized Berry's Phase in an Anisotropic Magnet on the Kagome Lattice", J. Phys. Soc. Jpn. 88 45001 (2019), DOI:10.7566/JPSJ.88.045001
6. Tohru Kawarabayashi, Hideo Aoki, and Yasuhiro Hatsugai, "Topologically Protected Doubling of Tilted Dirac Fermions in Two Dimensions", Phys. Status Solidi B 1800524(1-5) (2019), DOI:10.1002/pssb.201800524
7. Takahiro Fukui and Yasuhiro Hatsugai, "Entanglement polarization for the topological quadrupole phase", Phys. Rev. B 98, 035147 (1-13) (2018), DOI:10.1103/PhysRevB.98.035147
8. Shun Takahashi, Shuhei Oono, Satoshi Iwamoto, Yasuhiro Hatsugai, and Yasuhiko Arakawa, "Circularly Polarized Topological Edge States Derived from Optical Weyl Points in Semiconductor-Based Chiral Woodpile Photonic Crystals", J. Phys. Soc. Jpn. 87, 123401(1-5) (2018), DOI:10.7566/JPSJ.87.123401
9. Koji Kudo, Toshikazu Kariyado, and Yasuhiro Hatsugai, "Fractional Quantum Hall Effect in  $n = 0$  Landau Band of Graphene with Chern Number Matrix" Many-Body Chern Numbers of  $\nu=1/3$  and  $1/2$  States on Various Lattices", J. Phys. Soc. Jpn. 86, 063701(1-5) (2018), DOI:10.7566/JPSJ.86.063701
10. Koji Kudo and Yasuhiro Hatsugai, "Fractional Quantum Hall Effect in  $n = 0$  Landau Band of Graphene with Chern Number Matrix", J. Phys. Soc. Jpn. 87, 063701(1-5) (2018), DOI:10.7566/JPSJ.87.063701
11. Toshikazu Kariyado, Takahiro Morimoto, and Yasuhiro Hatsugai, "ZN Berry Phases in Symmetry Protected Topological Phases", Phys. Rev. Lett. 120, 247202(1-5) (2018), DOI:10.1103/PhysRevLett.120.247202
12. A. Hattori, S. Tanaya, K. Yada, M. Araidai, M. Sato, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, Y. Tanaka, "Edge states of hydrogen terminated monolayer materials: silicene, germanene and stanene ribbons", J. Phys. Cond. Mat. 29, 115302-1-18 (2017), DOI:10.1088/1361-648X/aa57e0
13. Yuta Takahashi, Toshikazu Kariyado, and Yasuhiro Hatsugai, "Edge states of mechanical diamond and its topological origin", New J. Phys. 19, 035003-1-9 (2017), DOI:10.1088/1367-2630/aa5edb
14. Hiromu Araki, Takahiro Fukui, and Yasuhiro Hatsugai, "Entanglement Chern number for three-dimensional topological insulators: Characterization by Weyl points of entanglement Hamiltonians", Phys. Rev. B 96 165139 (1-8) (2017), DOI:10.1103/PhysRevB.96.165139
15. Yasuhiro Hatsugai and Takahiro Fukui, "Bulk-edge correspondence in topological pumping", Phys. Rev. B 94, 041102(R)-1-5 (2016), DOI:10.1103/PhysRevB.94.041102
16. Takahiro Fukui and Yasuhiro Hatsugai, "A Spin Pump Characterized by Entanglement Chern Numbers", J. Phys. Soc. Jpn. 85, 083703-1-5 (2016), DOI:10.7566/JPSJ.85.083703
17. T. Kawarabayashi, H. Aoki and Y. Hatsugai, "Lattice realization of the generalized chiral symmetry in two dimensions", Phys. Rev. B 94, 235307-1-10 (2016), DOI:10.1103/PhysRevB.94.235307
18. S. Oono, T. Kariyado and Y. Hatsugai, "Section Chern number for a three-dimensional photonic crystal and the bulk-edge correspondence", Phys. Rev. B 94, 125125-1-10 (2016), DOI:10.1103/PhysRevB.94.125125

〔学会発表〕(計 17 件)(招待講演のみ)

1. Yasuhiro Hatsugai, "Topological phases to bulk-edge correspondence", NTT Basic Laboratory Seminar (2019)
2. Yasuhiro Hatsugai, 「バルクエッジ対応の普遍性」Topological Materials Science, The 4-th Annual Meeting (Nagoya Univ.) (2019)
3. Yasuhiro Hatsugai, "Bulk-edge corresponding : another look at", Progress in the mathematics of topological states of matter (WPI-AIMR, Tohoku University), (2018)
4. Yasuhiro Hatsugai, "Bulk-edge corresponding revisited", Recent progress in mathematics of topological insulators (ETH Zurich), (2018)
5. Yasuhiro Hatsugai, "Corner states of Kagome lattice & related", Trends in Theory of Correlated Materials (TTCM) 2018 (Geneve Univ), (2018)
6. Yasuhiro Hatsugai, "Welcome! Bulk-edge correspondence in topological phases", International workshop "Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts" [ BEC2018X ], (2018)
7. Yasuhiro Hatsugai, "Short-range entangled states & bulk-edge correspondence: Symmetry protection and ZN Berry phases", 九州大学セミナー (2018)
8. 初貝安弘, 「トポロジカル相におけるベリー接続とバルク・エッジ対応」早稲田大学セミナー (2018)
9. Yasuhiro Hatsugai, "Bulk-edge correspondence in Thouless pumping and mechanical diamond", Topological metamaterials and beyond Aspen Center for Physics, Winter Conference 2017 January 2-8 (2017)
10. Yasuhiro Hatsugai, "From graphene to topological materials", TIMS-CENIDE-NTHU Joint Symposium, Univ. Tsukuba, Tsukuba, Ibaraki March 11 (2017)
11. Yasuhiro Hatsugai, "Bulk-edge correspondence in Topological phases & Applications", CPEC seminar, Center for Photonics Electronics Convergence, Univ. of Tokyo, Shibuya, Tokyo, March 8 (2017)
12. Yasuhiro Hatsugai, "New Paradigm of Topological Materials", Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (2018)
13. Yasuhiro Hatsugai, "Uses of edge states of topological material and meta-material", JSPS-EPSC core to core program seminar (Univ. Paris-Sud) (2017)
14. Yasuhiro Hatsugai, "Roles of edge states in topological pumping", Trends in Theory of Correlated Materials (TTCM2016), Paul Scherrer Institute, Villigen, Switzerland May 22-27 (2016)
15. Yasuhiro Hatsugai, "Roles of edge states in Thouless pumping", Yukawa Institute for Theoretical Physics (YITP) international workshop, "Physics of bulk-edge correspondence and its universality: From solid state physics to cold atoms", Panasonic Hall, YITP, Kyoto Univ., Kyoto, Kyoto Sep.27-30(2016)
16. Yasuhiro Hatsugai, "Bulk-edge correspondence in topological pumping", Symmetry, Topology, and Quantum Phases of Matter: From Tensor Networks to Physical Realizations, KITP, Santa Barbara, California, USA Oct. 14 (2016)
17. Yasuhiro Hatsugai, "Graphene as a Mother of Topological Materials", JSPS-EPSC Tohoku-Cambridge-CNRS Core to Core program Symposium, Tohoku Univ., Sendai, Miyagi Nov.16-20 (2016)

〔図書〕(計 6 件)

1. 初貝安弘, 「ノーベル物理学賞: 物質をトポロジカルにみる」パリティ 31, 26-28 (2016) 丸善
2. 初貝安弘, 「学界ニュース 2016 年度ノーベル物理学賞: David J. Thouless 氏, F. Duncan M. Haldane 氏, J. Michael Kosterlitz 氏 トポロジカルな相転移とトポロジカルな物質相の理論的発見」, 日本物理学会 会誌 71, 12 月号(2016) 855-856 (2016) 日本物理学会
3. 初貝安弘, 「2016 年ノーベル物理学賞について / 物質中に普遍的に存在するトポロジカルな構造」, 数学セミナー 4 月号 36-41 (2017) 日本評論社

4. 初貝安弘,「物理学と線形代数:量子力学での展開」,数理科学 5月号 15-22 (2017) サイエンス社
5. 初貝安弘,「TKNN数」パリティ 32, No.7, 41-41 (2017) 丸善
6. 初貝安弘,「物質内部と表面状態の深い関係:バルクエッジ対応」,パリティ 32, No.7, 14-18 (2017) 丸善

〔その他〕

ホームページ等

<http://rhodia.ph.tsukuba.ac.jp/~hatsugai>

[http://rhodia.ph.tsukuba.ac.jp/~hatsugai/modules/pico/?ml\\_lang=en](http://rhodia.ph.tsukuba.ac.jp/~hatsugai/modules/pico/?ml_lang=en)

## 6. 研究組織

研究代表者

初貝 安弘 (HATSUGAI, Yasuhiro)

筑波大学・数理物質系・教授

研究者番号 80218495

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。