

令和 5 年 6 月 9 日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19K03662

研究課題名（和文）位相的場の理論によるトポロジカル物質相の特徴付け

研究課題名（英文）Characterization of topological phases of matter as topological field theories

研究代表者

田中 秋広（Tanaka, Akihiro）

国立研究開発法人物質・材料研究機構・国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・グループリーダー

研究者番号：10354143

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,300,000円

研究成果の概要（和文）：二つの主要成果を概観する。1) 反強磁性量子スピン鎖に対するLieb-Schultz-Mattis (LSM) の定理と、Haldaneによる半古典理論の間の密接な関係を示した。（後者は本研究の目的のためには実用上、一種の位相的場の理論として簡便に扱える。）この結果、数学的な色彩を近年強く帯びるようになったLSM流の議論に対し、スピンベリー位相を前面に出した物理的な描像を与えることが（少なくとも量子スピン鎖に関しては）可能となった。2) 強磁性量子スピン鎖において、ハルデインギャップ現象と多くの類似点を持つ新規スピンパリティ効果を見出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

反強磁性スピン鎖のハルデインギャップ現象は近年「対象性に保護されたトポロジカル相」のひな形として新たな意義が見出され、量子計算など周辺分野にも波及効果を示している。その解析にLieb-Schultz-Mattisの定理や、トーフト量子異常などの道具立てが威力を発揮するが、これらは数学的・抽象的色彩を帯びるという側面も持つ。本研究では、スピンのベリー位相を前面に出した物理的な描像からも（位相的場の理論という視座を介して）同種の情報を引き出すことが可能であることを見出した。スピンベリー位相は例えば多成分の複合秩序変数にも一般化ができることから、本アプローチのより広範な系への拡張が期待できる。

研究成果の概要（英文）：The first of our two main achievements is a link that we have established between the Lieb-Schultz-Mattis approach to quantum spin chains, and the semiclassical field theory due to Haldane, where the latter is basically described here as a variant of topological field theories, where only the spin Berry phase term is present. This enables us to relate LSM-type arguments, which can be mathematically intimidating and abstract, to a physically-tractable picture which features spin Berry phases. Our second finding is a new spin parity effect in ferromagnets, where aspects strongly reminiscent of the LSM-AKLT (Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki) approach to Haldane gap physics emerge, together with a semiclassical picture featuring spin Berry phases.

研究分野：物性基礎論、数理物理

キーワード：位相的場の理論、ベリー位相、Lieb-Schultz-Mattisの定理、非線形シグマ模型、量子スピン系、スピンパリティ効果

1. 研究開始当初の背景

2005年以降からバンド絶縁体の分類理論の整備が行われ、物質相としてのトポロジカルバンド絶縁体・超伝導体はその枠組みの中で完全に理解できるようになった。同時にこの分類に収まらないより一般的なトポロジカル物質相の数学的な特徴付けを探る研究が進行し、その中で「対称性に保護されたトポロジカル相」(SPT相)という概念が提出された。ここでプロトタイプとして挙げられたのが、スピン量子数 S が整数の場合の一次元反強磁性体の相図に現れる Haldane gap 相 (正確には、そのうちの S が奇数の場合) であった。

この相は 1980 年代に発見され、Haldane 自身が提案した半古典有効場の理論である「トポロジカル項を持つ非線形シグマ模型」を用いてその存在が予言された。この近似理論と並び当時重要な役割を果たしたのが、厳密に基底状態を求められる Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki(AKLT)模型であり、Haldane gap 相を持つ反強磁性スピン鎖の実例として、またこの相が (スピン相関が乱れているにも拘らず) 何らかの隠れた量子秩序を持つことを解析的に示すのに適した模型として、この新規な相の理解に貢献した。近年 SPT の観点からこの相をとらえなおすに当たり、後者のアプローチが大いに有効性を発揮して、「状態の行列積表示」、「テンソルネットワーク」と呼ばれるより広いコンセプトを用いた SPT 相の研究につながった。その際 Lieb-Schultz-Mattis(LSM)の定理という強力な数学的判別法が援用できることも明らかとなった。

一方、前述の半古典的場の理論からのこの問題へのアプローチはほとんど試みられなかったと言ってよい。基底状態を持つ量子秩序を探索するのに、半古典論は適さないとの印象を多くの研究者が持っていたためではないかと思われる。ただし高エネルギー物理の研究者を中心に、一般化された (t'Hooft の意味での) 量子異常、高次対称性といった場の理論の概念を用いた SPT の特徴付けは盛んに行われるようになり、特に場の理論における t'Hooft 量子異常と物性/統計物理における LSM の定理は密接に関係することも分かった。量子異常のスキームでは仮想的なゲージ場とスピン系を結合させ、非自明な応答を探るが、この抽象的・数学的な操作に分かりやすい物理的な意味が与えられれば、物性系の解析的な道具としての価値が一層高まると筆者が考えていた。

Haldane gap 系の統計物理の隆盛期における場の理論的な研究では、分配関数を経路積分表示した際のトポロジカル項 (スピンベリー位相に由来する項) による位相干渉効果が核心であった。SPT 相としての性質を探る場合も、任意の初期状態を虚時間の時空で時間発展させることで基底状態へと射影できるため、同じく虚時間経路積分の描像が有用と予想できる。特に位相幾何学な量子効果は必然的にトポロジカル項のみからもたらされるはずであり、励起状態を捨象しても差し支えない場合、専らトポロジカル項から作用が成る「位相的場の理論」(TQFT)に帰着できることが予想できる。TQFT は、トポロジカル量子計算において重要となる非可換エニオンのブレイディングを表す場合などごく限られた例を除くと、高度に数学的であるとの印象から物性基礎論では実用的な道具としてほとんど応用されてこなかった。

2. 研究の目的

「基底状態を持つトポロジカルな量子秩序」だけに注目しようという立場を取る場合、TQFT の経路積分表示 (=基底状態波動関数) は、そのような情報を一つの位相因子に集約する見通しの良い理論的道具となるポテンシャルを持つので、有効性の当否は検証する価値が十分にあると思われる。(この場合、TQFT は「半古典理論」から派生するため、明瞭な物理的な描像も得やすいというメリットもある。) しかし上述の通り、SPT 相の研究においてこの潜在的に有望な性質は十分に活用されていないばかりか、むしろトポロジカル秩序や量子エンタングルメントに関する情報の取得には不向きな「半古典近似」と捉えて、顧みない傾向があるように筆者には思える。そこで本研究では SPT 相のひな型である Haldane ギャップ系を含む低次元量子スピン系を TQFT の経路積分理論の立場からとらえなおした。課題の目標として設定したのは、トポロジカル物質相としての肝要な性質をそこから抽出することができるか否かを判定することである。同時に、Haldane 系とは直接関連しない系への同様な手法の適用可能性についても検討することを念頭においた。

3. 研究の方法

場の理論の非摂動的な性質を抽出するには適切なスキームの工夫が研究の大きなウェイトを占

めることが多い。ここでは、

- (1) 虚時間経路積分で基底状態における波動関数の大局的なふるまいをおさえる。
- (2) その上で、ハミルトニアン形式で展開されることが多い LSM の定理のアプローチとの対応関係を明らかにするため、場の理論をシュレーディンガー表示 (汎関数シュレーディンガー形式) で記述する。

という方法を取ることにした。(2) に関しては、Haldane gap の物理の隆盛期における S.-C. Zhang, H. Schulz, T. Zimann の先駆的な研究があるが、大局的な量子効果としてインスタントン配位の役割の考察に終始しているため、Haldane による有効作用の考察と等価な内容以上の情報は得られていない。(波動関数のノードの有無に対するトポロジカル項の影響についての一般性のある議論は提供しており、このアイデアは後述するように本研究においても有用であった。)

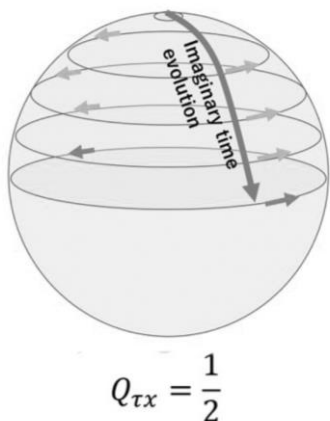
さらに、次項で述べる通り派生的に別系統 (強磁性) の量子スピン系についても新規の顕著な量子効果 (Haldane gap 同様にスピン量子数の整数・半整数の別が系の振る舞いを決める) の研究を実施した。そこでは共同研究者が行ったスピン系に対する直接的な数値計算 (厳密対角化) や可解模型 (基底状態は厳密に求められる模型) を用いた解析と並行して、本課題の方法論に沿って有効的な場の理論を導出してそのトポロジカル項の役割を調べた。

4. 研究成果

今や LSM の定理は広範な量子系の (1) 低エネルギースペクトルにおけるギャップの有無 (2) 対称性の破れの有無 (3) トポロジカル秩序の有無、などを判定するための有用な解析手法として応用されるに至っているが、その原型は本課題が対象とするような Haldane gap 系や関連する量子スピン系の研究であり、この最も基本的な問題において TQFT (または半古典有効理論のベリー位相項) との関連性を詳しく調べておく意義はすでに述べた通り小さくない。

SPT 相としての Haldane gap 系を保護し得る対称性 (または対称性の組み合わせ) は複数存在する。本課題で行う数学的な操作はそのうちのどれを系の対称性として選んだ場合でも本質的には変わらない。そこでここでは z 軸周りの $U(1)$ 回転対称性と並進対称性を選んだ場合について議論の道筋を述べる。

先述の Zhang-Schulz-Ziman (ZSZ) の先行研究に倣い、トポロジカル項付きの非線形シグマ模型をハミルトニアン形式に書く。ここで LSM のツイストを断熱的に加える (周期境界条件を課したスピン鎖に沿って z 軸周りの 2π 回転を施す) 過程に対して基底状態がどのように応答するかを調べた。



Haldane の有効作用の導出法をこの場合に踏襲すると、LSM ツイストは「物質場 (交替磁化の単位方向ベクトル) に結合するベクトル的なゲージ場 (つまり Yang-Mills 的な $SO(3)$ ゲージ場) の付加として表現されることが分かる。これは強さとヘリカル軸の方向を指定した Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用項をハミルトニアンに加えるのと等価であることも確かめられる。仮想 DM 相互作用の印加は並進対称性を保持するため、断熱変化の全プロセスに渡り結晶運動量は良い量子数であり続け、値は一定に保たれると考えるのが自然であろう。ただしこの値はゲージに依存するため、プロセス全体を通しての正味の運動量変化は、印加前の基底 (ゲージ) に戻って比較するためがある。これを実行するとツイストによる結晶運動量の変化 Δk が、 $\Delta k = 2\pi S$ であることが示せ

る。これは直接スピン系のハミルトニアンに対して行われた LSM のオリジナルな議論と合致する。なお、TQFT の真空波動関数を虚時間経路積分で求める方法でも同じ結論に到ることは容易に確かめられる。

以上は単に LSM の結果を TQFT (またはその元となる半古典有効場の理論) を使って、特定の問題に対して再現してみせたという以上の意義を持つと考えられる。

(1) 半古典論に由来する有効理論であっても、スピンベリ一位相を十分注意深く反映さすれば、基底状態の量子秩序についての正しい情報がきちんと得られるという事実は、他の系、例えば同じトポロジカルな構造を持つ高次元版の TQFT に対する有用な応用可能性を強く示唆している。(筆者が 2005 年に導出した二次元反強磁性体に対するトポロジカル項付の $O(5)$ 非線形シグマ模型は適用候補の好例と言える。) ボゾン化法や厳密解などが使えない高次元系の場合には特にこれは有用であると思われる。

(2) 上記のように結晶運動量を決定する際、1 サイト並進操作とゲージ変換との非可換性が用いられている。(実際に非可換になるのはスピン S が半整数の場合のみ。) これは場の理論の言葉では一種の混合アノマリーであると解釈でき、ここに t' Hooft アノマリーを用いた一般論との関連を見出すことができる。(なお SPT 相を保護する対称性が空間反転対称性のように離散的なものである場合も基本的には同様のロジックが使える。この場合のアノマリーの議論は、有効場の理論を向き付け不能な時空多様体上においたことに対する応答 (Stiefel-Whitney 類) として特徴づけられることが知られている。このような抽象的な特徴づけに対して、本アプローチではより明瞭な物理的なプロセスを対応づけることができると言える。)

(3) ZSZ の論文では基底状態にある系へとインスタントプロセスを施す、すなわち交替磁化ベクトルのスナップショット配位が球面上に描き出す立体角を 4π だけ変化させるプロセスを考え、それが波動関数に誘起する位相因子を調べている。一方、本研究で考えた LSM ツイストの印加プロセスについて同様に立体角の変化を調べると、それが 2π であり、インスタントの半分 (前頁の図にあるように時空配位の Pontryagin 数が $1/2$ の「メロン」) に相当することが分かる。これは、本研究で用いた操作が、ZSZ と同じ波動関数関数を扱いながらも、含有する量子力学的な情報をより詳しくプローブしていることを物語っている。

本課題実施期間の後半において、東大総合文化研究科の加藤雄介教授のグループと、強磁性スピン鎖の新規量子効果についての研究を行った。以下、本課題の文脈に沿って概略を記す。具体的にはまず、DM 相互作用とゼーマン磁場のもとでハイゼンベルグ強磁性体中にカイラルソリトンが生成されるたびに、磁化曲線が半整数スピンの場合には不連続に跳び、整数スピンの場合には連続的に変化することが厳密対角化で判明した。さらにこの効果を示す可解モデルも見つけることができた。共同研究者等のこれらの発見を受けて、半強磁性の場合と同様に、半古典的な導出方法により有効場の理論を求めた。(この場合もスピンベリ一位相に由来するトポロジカル項を持ち、適切な極限操作により一種の TQFT として扱える。) カイラルソリトンの集団座標についての情報をここから抽出すると、磁化曲線が示す量子効果を再現できることが分かった。基底状態の結晶運動量を決定する際、先の ZSZ 論文に示されている波動関数のノードとトポロジカル項の係数の関係を応用した。強磁性体のこのようなトポロジカルな量子効果の全容はまだ未解明であるが、多く点で Haldane gap 系と類似性を持ち、ここでも TQFT との関係も深化が見られるものと考えられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Solovvey I. V., Nikolaev S. A., Ushakov A. V., Irkhin V. Yu., Tanaka A., Streltsov S. V.	4. 巻 105
2. 論文標題 Microscopic origins and stability of ferromagnetism in Co ₃ Sn ₂ S ₂	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 014415-1 -12
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.105.014415	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Masashi Hase, Vladimir Yu. Pomjakushin, Lukas Keller, Uwe Stuhr, Andreas Doenni, Masanori Kohno, and Akihiro Tanaka	4. 巻 102
2. 論文標題 Evaluation of field-induced magnetic moments in the spin-1/2 antiferromagnetic trimerized chain compound Cu ₃ (P ₂ O ₆ OD) ₂	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 014403-1-6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.102.014403	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kodama Sohei, Tanaka Akihiro, Kato Yusuke	4. 巻 107
2. 論文標題 Spin parity effects in a monoaxial chiral ferromagnetic chain	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 024403-1-16
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.107.024403	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計14件（うち招待講演 0件/うち国際学会 3件）

1. 発表者名 田中秋広, 野々村禎彦
2. 発表標題 Twisted bilayer grapheneの有効理論おけるベリー位相項に関する考察
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中秋広, 野々村禎彦
2. 発表標題 二次元easy-plane量子Heisenberg模型のメロン励起と統計性-Tchernyshyov予想の理論考察
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 児玉壮平, 田中秋広, 加藤雄介
2. 発表標題 1次元カイラル強磁性体における整数・半奇整数スピンによる違い
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田中秋広, 野々村禎彦
2. 発表標題 ワイル超伝導体のエッジカレントに関する理論的検討
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田中秋広
2. 発表標題 SU(2)モノポール調和関数のSPT状態への応用
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中秋広
2. 発表標題 魔法角ねじれ二層グラフェンとトポロジー
3. 学会等名 ワークショップ(4)「超伝導物質、トポロジカル物質」
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Akihiro Tanaka and Yoshihiko Nonomura
2. 発表標題 Lieb-Schultz-Mattis argument for low dimensional antiferromagnets in the semiclassical sigma model framework
3. 学会等名 APS March Meeting 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中秋広、Sergey Nikolaev
2. 発表標題 theta項のある非線形シグマ模型とLSM定理
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Sohei Kodama, Akihiro Tanaka and Yusuke Kato
2. 発表標題 Spin parity effect in monoaxial ferromagnetic spin chain
3. 学会等名 29th International Conference on Low Temperature Physics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Akihiro Tanaka
2. 発表標題 Spin parity effect of chiral soliton dynamics in 1d ferromagnets-semiclassics
3. 学会等名 Novel Quantum States in Condensed Matter 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Akihiro Tanaka
2. 発表標題 Quantum approach to 1d chiral ferromagnets
3. 学会等名 WPI-MANA International Symposium 2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 児玉壮平、田中秋広、加藤雄介
2. 発表標題 一軸性カイラル強磁性鎖におけるHeight Parity EffectとSpin Parity Effect
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 田中秋広、児玉壮平、加藤雄介
2. 発表標題 一次元カイラル磁性体のスピンパリティ効果に関する半古典理論
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 角田峻太郎、田中秋広、加藤雄介
2. 発表標題 一軸性カイラル反強磁性鎖における量子効果
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------