

令和 6 年 5 月 9 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20H01825

研究課題名（和文）量子多体系の多極子に対するmodern theoryの構築

研究課題名（英文）developing the modern theory for multipole moments in quantum many-body systems

研究代表者

渡辺 悠樹（Watanabe, Haruki）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・准教授

研究者番号：20785323

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 12,560,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では絶縁体の分極や軌道磁化に関するmodern theoryを四重極子などの高次のモーメントなどに一般化することを目指した研究を行っていた。実際、絶縁体の四重極子や八重極子に関しては、それらの定式化や分数角電荷の予言といった成果が得られた。これらの研究を通して得られた別の方向性として、非一様な対称性を研究する中で、トポロジカル秩序相や自発的に対称性を破る相の基底状態の縮退についての重要な知見が得られたことが本研究の研究成果である。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究を通して得られた角電荷についての一般的な公式は、NaClといった身近な結晶の角に現れる電荷を予言し、融解や反応性なども含めた物質の特性を理解する上でも重要な意味を持つと考えられる。またトポロジカル秩序や自発的対称性の破れを実現する状態でも系の大きさによっては基底状態の縮退をもたないという研究成果は量子多体系についての統一的な理解を目指す上で重要になると考えられる。

研究成果の概要（英文）：This research was aimed at generalizing the modern theory on the polarization and the orbital magnetization of insulators to higher order moments such as quadrupoles. In fact, several results were obtained for insulators with quadrupole and octupole moments, including their formulation and the prediction of fractional angular charges. Another direction obtained through these studies is that, in studying non-uniform symmetries, important findings on degeneracy of the ground states of topologically ordered phases and spontaneously symmetry-breaking phases were obtained in this study.

研究分野：物性理論

キーワード：角電荷 四重極子 多極子 量子多体系 トポロジカル秩序

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

古典電磁気学から続くこれまでの長い研究の蓄積によって、1 次の多極子である分極（双極子）については解析的な表式や具体的な計算手法が確立していた。例えば電気分極であれば、バンド絶縁体の場合にはプロッホ関数のベリー位相によって計算することができ、粒子間相互作用や不純物ポテンシャルなどによってバンド描像が破綻する場合にもひねり境界条件を用いる定式化などが知られていた。磁気秩序に関しても、プロッホ関数を用いてバンド絶縁体の軌道磁化を表す式が近年確立されていた。これらの先行研究は総じて分極に関する modern theory として知られていた。しかし本研究の研究当初においては、より高次の電気多極子である電気四重極子や電気八重極子、そしてその磁気版を一般的かつ定量的に特徴付ける表式が知られていなかった。

2. 研究の目的

このような背景を踏まえて、量子多体系における電気・磁気多極子や一般的かつ定量的に特徴付けられるように modern theory を拡張する表式を理論的に導き、その物理的な帰結を議論することを目標とした。

3. 研究の方法

近年、位置演算子を用いて分極を特徴づける Resta の公式を多極子に一般化することが提案されていたが、その提案には問題があったため、これを修正することが考えられた。また、近年、海外の研究グループによって「フィリングアノマリー」という結晶の対称性と電荷中性条件の非整合性を特徴づける量が提案されていた。この量を用いて結晶の角電荷を特徴づけることができる可能性も検討できた。

4. 研究成果

当初の研究計画にのべた方向性の研究としては、まず

Corner charge and bulk multipole moment in periodic systems

Haruki Watanabe and Seishiro Ono

Phys. Rev. B 102, 165120 (2020)

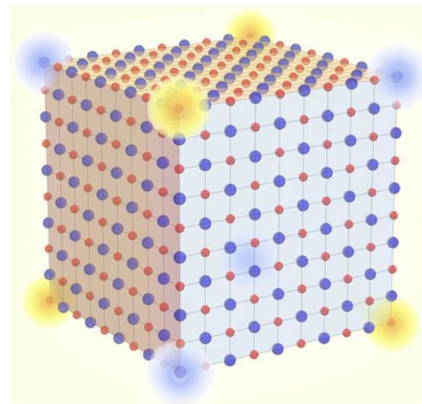
において、点群の対称性がある場合に結晶の多極子の特徴づける公式を導き、多極子とヒンジや角に現れる分数電荷との関係を明らかにした。

また、この結果を踏まえて分数角電荷を実現する身近な物質を探索したところ、塩（NaCl）の結晶がその最も簡単な例であることを明らかにした。本研究成果に関してはプレスリリースも行い、マイナビニュースなどから報道された。

Fractional Corner Charge of Sodium Chloride

Haruki Watanabe and Hoi Chun Po

Phys. Rev. X 11, 041064 - Published 30 December 2021.



さらに、塩の結晶以外の別の結晶構造でも同様の現象が見られるかを明らかにする研究を行った。また、同様の現象が反強磁性体などのスピン系でも見られるかどうかについて考察し、反強磁性体の結晶の角に分数角スピンの出現することを予言した。

この研究とは別の方向性の研究として、近年着目されていた非一様な対称性に対する考察を行った。トポロジカル秩序相や自発的に対称性を破る相では基底状態にトポロジカル縮退や対称性の破れに基づく縮退が生じることが知られていたが、我々は非一様な対称性の場合にはこれらの縮退が必ずしも生じないことを明らかにした。この研究成果は量子多体系の一般的な性質を解明し分類を進める上で重要な意義をもつ。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計14件（うち査読付論文 7件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 8件）

1. 著者名 Takasan Kazuaki、Oshikawa Masaki、Watanabe Haruki	4. 巻 107
2. 論文標題 Drude weights in one-dimensional systems with a single defect	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 75141
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.107.075141	査読の有無 無
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 -
1. 著者名 Watanabe Haruki、Kato Yasuyuki、Po Hoi Chun、Motome Yukitoshi	4. 巻 103
2. 論文標題 Fractional corner magnetization of collinear antiferromagnets	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 134430
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.103.134430	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Tasaki Hal、Watanabe Haruki	4. 巻 104
2. 論文標題 Off-diagonal long-range order implies vanishing charge gap	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L180501
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.104.L180501	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Liu Yankang、Fuji Yohei、Watanabe Haruki	4. 巻 104
2. 論文標題 Bloch oscillations in the spin-1/2 XXZ chain	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205115
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.104.205115	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Tang Feng, Ono Seishiro, Wan Xiangang, Watanabe Haruki	4. 巻 129
2. 論文標題 High-Throughput Investigations of Topological and Nodal Superconductors	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 27001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.129.027001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Haruki	4. 巻 4
2. 論文標題 Bloch theorem in the presence of an additional conserved charge	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 13043
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.4.013043	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Naito Katsuaki, Takahashi Ryo, Watanabe Haruki, Murakami Shuichi	4. 巻 105
2. 論文標題 Fractional hinge and corner charges in various crystal shapes with cubic symmetry	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 45126
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.045126	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kobayashi Hirokazu, Watanabe Haruki	4. 巻 129
2. 論文標題 Vanishing and Nonvanishing Persistent Currents of Various Conserved Quantities	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 176601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.129.176601	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Haruki, Ono Seishiro	4. 巻 102
2. 論文標題 Corner charge and bulk multipole moment in periodic systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 165120
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.165120	査読の有無 無
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 -

1. 著者名 Watanabe Haruki, Kato Yasuyuki, Po Hoi Chun, Motome Yukitoshi	4. 巻 103
2. 論文標題 Fractional corner magnetization of collinear antiferromagnets	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 134430
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.134430	査読の有無 無
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 -

1. 著者名 Matsugatani Akishi, Ono Seishiro, Nomura Yusuke, Watanabe Haruki	4. 巻 264
2. 論文標題 qeirreps: An open-source program for Quantum ESPRESSO to compute irreducible representations of Bloch wavefunctions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 107948 ~ 107948
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2021.107948	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Oh Chang-geun, Watanabe Haruki	4. 巻 6
2. 論文標題 Revisiting electromagnetic response of superconductors in mean-field approximation	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 13058
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.6.013058	査読の有無 無
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 -

1. 著者名 Hu Yaozong、Watanabe Haruki	4. 巻 107
2. 論文標題 Spontaneous symmetry breaking without ground state degeneracy in generalized $\langle \text{mml:math xmlns:mml="http://www.w3.org/1998/Math/MathML"} \rangle \langle \text{mml:mi} \rangle \text{N} \langle \text{mml:mi} \rangle \langle \text{mml:math} \rangle \text{-state clock model}$	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 195139
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.195139	査読の有無 無
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 -

1. 著者名 Watanabe Haruki、Cheng Meng、Fuji Yohei	4. 巻 64
2. 論文標題 Ground state degeneracy on torus in a family of ZN toric code	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Mathematical Physics	6. 最初と最後の頁 51901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0134010	査読の有無 無
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3件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 渡辺悠樹
2. 発表標題 絶縁体の多極子とコーナー電荷の関係
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 渡辺悠樹
2. 発表標題 Multipole moments and fractional corner charges of insulating materials
3. 学会等名 CORRELATED ELECTRONS VIRTUAL INTERNATIONAL SEMINARS (CEVIS) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 渡辺悠樹
2. 発表標題 Multipole moments and fractional corner charges of insulating materials
3. 学会等名 Physics Colloquium at California Institute of Technology (招待講演)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 渡辺 悠樹	4. 発行年 2022年
2. 出版社 サイエンス社	5. 総ページ数 216
3. 書名 量子多体系の対称性とトポロジー	

1. 著者名 渡辺 悠樹	4. 発行年 2024年
2. 出版社 共立出版	5. 総ページ数 352
3. 書名 解析力学 基礎の基礎から発展的なトピックまで	

〔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1件

国際研究集会 Recent Developments on Multipole Moments in Quantum Systems	開催年 2020年～2020年
---	--------------------

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
---------	---------