

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 1 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K17719

研究課題名(和文) 強相関量子多体系への代数的アプローチ

研究課題名(英文) Algebraic approaches to strongly correlated quantum many-body systems

研究代表者

桂 法称 (Katsura, Hosho)

東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・准教授

研究者番号：80534594

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)：フェルミオン系やスピン系などの量子多体系の基底状態に対して、主に数理物理的な観点からアプローチし研究を進めた。特に、1．相互作用や乱れのある系におけるトポロジカル相、2．空間変調した1次元量子系の代数的解析、の2つのテーマに関する研究を行った。1．については、相互作用のあるKitaev鎖の基底状態、乱れのあるトポロジカル絶縁体・超伝導体、量子トライマー模型について成果を挙げた。2．については、1次元連続空間中の自由フェルミオン系および共形場理論のサイン二乗変形について、いくつかの厳密な結果を得ることに成功した。その他に、可解スピン鎖の基底状態におけるエンタングルメントについて結果を得た。

研究成果の概要(英文)：We have studied the ground-state properties of a variety of quantum many-body systems describing interacting fermions or spins, from a mathematical physics point of view. In particular, we focused on the following two aspects: (i) topological phases of systems with interaction and/or disorder, (ii) algebraic analysis of one-dimensional quantum systems with spatial modulation. In the former, we have obtained exact results for the ground states of the interacting Kitaev chain, disordered topological insulators and superconductors, and the quantum trimer model. In the latter, there was also progress in the sine-square deformation of free fermions in one-dimensional continuous space and that of conformal field theories. In addition, we obtained some results for the entanglement in the ground states of solvable spin chains.

研究分野：物性理論、統計力学

キーワード：物性基礎論 数理物理 量子多体系 トポロジカル相 マヨラナフェルミオン スピン鎖 エンタングルメント 正弦2乗変形

## 1. 研究開始当初の背景

トポロジカル絶縁体・超伝導体をはじめとする物質のトポロジカル相に関する研究が近年大きく進展している。これまでの多くの研究は、乱れや相互作用のないフェルミオン系に対するものであり、乱れや相互作用のある場合にどのようなトポロジカル相が存在し、どのような特性を示すかという点は自明でない。これらの系に対して、行列積状態やトポロジカルな場の理論などの抽象的な議論に基づくアプローチはあるものの、具体的なモデルや物理系に基づく議論はあまり例がない。また共形場理論や可解格子模型などとも密接に関係する、マヨラナフェルミオン、パラフェルミオンなどのエキゾチック粒子と、そのトポロジカル相の研究も、今後重要性を増すと考えられる。

さらにトポロジカル絶縁体・超伝導体のボゾン系での類似物については、(マグノンの熱ホール効果などを除き)従来あまり議論されてこなかったが、近年では光学格子において多彩なボゾン系が実現可能であることから、今後ボゾン系のトポロジカル相の一般的な性質や固有の現象を調べることは重要であると考えられる。

代表者が継続して研究を行っている空間変調した1次元量子多体系も、実空間におけるトポロジー制御や長距離エンタングルメント生成などの観点から注目されている。特に量子臨界系にサイン二乗変形と呼ばれる特定の変形を施した場合、その基底状態が1様周期系の基底状態と一致することが、一連の解析的・数値的な研究から明らかになっている。

## 2. 研究の目的

本研究では、上記のような問題に対して、主に数理物理的な観点からアプローチする。特に、次の2つのテーマの研究を重点的に行う。1. 相互作用や乱れのある系におけるトポロジカル相、2. 空間変調した1次元量子系の代数的解析。それぞれにおいてトポロジーは重要なキーワードとなるが、これら2つのテーマを代数的な観点から有機的に結び付けて研究を行う。

より具体的には、テーマ1については、相互作用するマヨラナフェルミオン系におけるトポロジカル相やマヨラナ端状態の解析、乱れのあるトポロジカル相を特徴づけるトポロジカル不変量の定式化、ボゾン系の新奇特トポロジカル相の探索などを想定している。テーマ2については、代表者が「強相関電子系への代数的アプローチ」で行っていた、サイン二乗変形の解析を推し進める。特に現在まであまり調べられていない、連続空間上で定義された自由粒子系や、場の理論のサイン二乗変形についてその性質を詳しく調べる。

## 3. 研究の方法

### (1) 不等式などを用いた手法

「基底状態の波動関数には節がない」という量子力学でよく知られた事実は、線形代数の言葉では Perron-Frobenius の定理として定式化することができる。また、変分原理の一般化として、ミニマックス原理などの行列の固有値に関する不等式も知られている。これらの手法を、量子多体系の基底状態エネルギーの下限を求めることや、エネルギーギャップの存在証明などに応用する。また、整数の分割やエントロピーに関する不等式などを、スピン鎖の問題に応用する。

### (2) 可解模型・可解な場の理論

可解模型は大きく2つのクラスに分類することができる。ひとつは可積分系と呼ばれるクラスで、自由フェルミオン・ボゾン系や、Bethe 仮説によって解くことのできる模型が含まれる。もうひとつは、フラストレーション・フリー系と呼ばれるクラスで、基底状態が局所的なハミルトニアン基底状態になっており、多くの場合あらわに書き下すことができる。これらの可解模型の性質・結果をいろいろな物理系に応用する。また、超対称性量子力学や共形場理論などの連続系についての性質も多用する。

### (3) 数式処理・数値対角化を用いた手法

Mathematica の数式処理機能を、方程式の簡約化や複雑な代数的演算に応用する。また、少数系の数値対角化を用いて、いろいろな予想を立てながら研究を進めることは、数理物理的研究においても大変有用である。さらに、有限系の数値結果から無限系での結果を証明する計算機援用証明 (computer-assisted proof) が可能である場合もある。

### (4) 非可換幾何の手法

トポロジカル相を特徴づけるトポロジカル不変量は、並進不変な系では波数空間におけるある種の積分として表現される。一方で乱れが存在する場合には、波数が良い量子数ではなくなるため、トポロジカル不変量の定義は自明でない。しかしこのような場合も、実空間における演算子の交換関係などを導入して、トポロジカル不変量を定義することができる。

### (5) エンタングルメント

近年、エンタングルメントを用いて量子多体系を特徴づけることが盛んに試みられている。このような中で、特に基底状態の密度行列に対するエンタングルメント・エントロピーやエンタングルメント・スペクトル(部分系の密度行列の固有値分布)が重要な役割を果たすことが知られている。本研究では、これらの量による量子多体系の基底状態の解析を積極的に用いる。

#### 4. 研究成果

##### (1) 相互作用のあるKitaev鎖の厳密な基底状態・マヨラナ端状態

1次元  $p$  波超伝導体の模型である Kitaev 鎖は、そのトポロジカル相ではマヨラナフェルミオンの端状態が現れることが知られている。この模型に粒子間相互作用を導入した模型を調べ、相図中のある線上ではフラストレーション・フリーであり、基底状態が厳密に求まることを示した。またエネルギーギャップの存在を証明し、縮退した2つの基底状態の間を結ぶマヨラナ演算子(弱いゼロモード)の具体的な表式を求めた。これらの結果は、論文 [1] としてまとめている。

また、論文 [2] では捻り境界条件課した Kitaev 鎖について調べた。その結果、この系では端が存在しないにもかかわらずマヨラナ・ゼロモードが現れる場合があることを明らかにした。また粒子間相互作用を導入した場合にも、フェルミオン・パリティによる議論および数値対角化から、トポロジカル相では弱いゼロモードが存在する捻り角が存在することを明らかにした。

##### (2) サイン二乗変形における厳密な結果

サイン二乗変形の性質については、これまで多くの1次元格子模型について調べられてきたが、連続系や場の理論における例はあまり知られていない。本研究では、そのような場合の最も単純な例として、1次元連続空間中の自由フェルミオン系のサイン二乗変形を、超対称性量子力学の逆問題として定式化できることを明らかにした。また副産物として、この系の1粒子固有関数が、Gegenbauer 多項式を用いて表せることを明らかにした。これらの結果は、論文 [3] としてまとめている。

また、量子臨界系のサイン二乗変形の連続極限に対応すると考えられる、共形場理論のサイン二乗変形についても詳しく調べた。特に、ハミルトニアン固有状態は(変形前の一様系の)真空状態を除いて有限のノルムを持たないことを示した。さらに、サイン二乗変形系のハミルトニアンは、一様系のハミルトニアンから、ユニタリー変換とある種の極限操作により得られることを示した。これらの結果は、論文 [4] としてまとめている。

##### (3) 乱れのあるトポロジカル絶縁体

非可換微分幾何に基づき、乱れのあるトポロジカル絶縁体・超伝導体に対して有効なトポロジカル不変量の表式を、任意の次元・クラスについて導入した。これらの結果は、論文 [5] としてまとめている。

また、得られたトポロジカル不変量の表式を、 $2 \cdot 3$ 次元のトポロジカル絶縁体を記述

する代表的な模型(Bernevig-Hughes-Zhang 模型、Wilson-Dirac 型模型)に適用した。これらの模型では時間反転対称性があり、非自明な  $Z_2$  指数によってそのトポロジカル絶縁体相が特徴づけられることが期待される。実際に数値計算により、そのことを乱れがある場合にも確認した。これらの結果は、論文 [6] としてまとめられている。

##### (4) 量子トライマー模型

トポロジカル秩序との関係で古くから興味を集めている量子ダイマー模型の自然な拡張として、正方格子上の量子トライマー模型を提案した。ここでトライマーとは、3つのスピン1から構成されるスピン三重項状態を指している。正方格子上的のトライマー配置の総数は、系のサイズに対して指数関数的に増大する。この模型が可解である Rokhsar-Kivelson 点では、このようなトライマー配置の重ね合わせ状態(トライマーRVB 状態)が基底状態であることを示した。また、この点近傍における基底状態の縮退度や相関関数の振る舞いから、この系は  $Z_3$  トポロジカル秩序を持つことを明らかにした。これらの結果は、論文 [7] としてまとめられている。

また関連する話題として、ダイマー相互作用とトライマー相互作用が競合する1次元スピン鎖の基底状態相図を調べた。その結果、この系にはダイマー相、対称性に保護されたトポロジカル(SPT)相、トライマー液体相、巨視的に縮退した相、の4つの相が現れることを明らかにした。これらの結果は、論文 [8] としてまとめられている。

##### (5) Fredkin スピン鎖のエンタングルメント

Fredkin スピン鎖と呼ばれる、新しいクラスの新しいクラスの可解な半奇整数スピン鎖の基底状態におけるエンタングルメントについて調べた。この模型の厳密な基底状態は、色付き Dyckパスと呼ばれる組み合わせ論的オブジェクトとの重ね合わせにより記述される。この模型では特に色の自由度がある(スピン  $S > 1/2$  の)場合には、エンタングルメント・エントロピーのスケールリングが体積則を満たす場合があることを明らかにした。さらに、エネルギーギャップの振る舞いについても、変分的な議論などにより調べた。これらの結果は、論文 [9] にまとめられている。

この他に、格子上のフェルミオン模型における超対称性の破れ(論文 [10])や  $SU(N)$  対称性のある可積分な量子スピン鎖におけるエンタングルメント・スペクトルについての解析(論文 [11])なども行った。また、研究当初に計画していたボゾン系のトポロジカル相についても、 $Z_2$  トポロジカル不変量によって特徴づけられる磁性体(マグノン)系の構成に成功した。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 20 件)

A. Bolens, H. Katsura, M. Ogata, and S. Miyashita, "Mechanism for sub-gap optical conductivity in honeycomb Kitaev materials", *Phys. Rev. B* **97** (2018) 161108(R)/1-5 (査読有)  
DOI: 10.1103/PhysRevB.97.161108

W. Nie, H. Katsura, and M. Oshikawa, "Particle statistics, frustration, and ground-state energy", *Phys. Rev. B* **97** (2018) 125153/1-17 (査読有)  
DOI: 10.1103/PhysRevB.97.125153

H. Katsura and T. Koma, "The noncommutative index theorem and the periodic table for disordered topological insulators and superconductors", *J. Math. Phys.* **59** (2018) 031903/1-76 (査読有)  
DOI: 10.1063/1.5026964

Y. Akagi, H. Katsura, and T. Koma, "A New Numerical Method for Z2 Topological Insulators with Strong Disorder", *J. Phys. Soc. Jpn.* **86** (2017) 123710/1-4 (査読有)  
DOI: 10.7566/JPSJ.86.123710

S. Tamura and H. Katsura, "Zero-energy states in conformal field theory with sine-square deformation", *Prog. Theor. Exp. Phys* **2017** (2017) 113A01/1-17 (査読有)  
DOI: 10.1093/ptep/ptx147

Y-t. Oh, H. Katsura, H. Lee, and J.H. Han, "Proposal of a spin-one chain model with competing dimer and trimer interactions", *Phys. Rev. B* **96** (2017) 165126/1-11 (査読有)  
DOI: 10.1103/PhysRevB.96.165126

T. Udagawa and H. Katsura, "Finite-size gap, magnetization, and entanglement of deformed Fredkin spin chain", *J. Phys. A: Math. Theor.* **50** (2017) 405002/1-17 (査読有)  
DOI: 10.1088/1751-8121/aa85b5

A. Bolens, H. Katsura, M. Ogata, and S. Miyashita, "Synergetic effect of spin-orbit coupling and Zeeman splitting on the optical conductivity in the one-dimensional Hubbard model", *Phys. Rev. B* **95** (2017) 235115/1-8 (査読有)  
DOI: 10.1103/PhysRevB.95.235115

O. Salberger, T. Udagawa, Z. Zhang, H. Katsura, I. Klich, and V. Korepin, "Deformed Fredkin Spin Chain with Extensive Entanglement", *J. Stat. Mech.* (2017) 063103/1-17 (査読有)  
DOI: 10.1088/1742-5468/aa6b1f

K. Kawabata, R. Kobayashi, N. Wu, and H. Katsura, "Exact zero modes in twisted Kitaev chains", *Phys. Rev. B* **95** (2017) 195140/1-13 (査読有)  
DOI: 10.1103/PhysRevB.95.195140

N. Sannomiya, H. Katsura, and Y. Nakayama, "Supersymmetry breaking and Nambu-Goldstone fermions with cubic dispersion", *Phys. Rev. D* **95** (2017) 065001/1-13 (査読有)  
DOI: 10.1103/PhysRevD.95.065001

H. Lee, Y-t. Oh, J.H. Han, and H. Katsura, "Resonating Valence Bond States with Trimer Motifs", *Phys. Rev. B* **95** (2017) 060413(R)/1-4 (査読有)  
DOI: 10.1103/PhysRevB.95.060413

N. Sannomiya, H. Katsura, and Y. Nakayama, "Supersymmetry breaking and Nambu-Goldstone fermions in an extended Nicolai model", *Phys. Rev. D* **94** (2016) 045014/1-13 (査読有)  
DOI: 10.1103/PhysRevD.94.045014

Y. Hatsuda, H. Katsura, and Y. Tachikawa, "Hofstadter's Butterfly in Quantum Geometry" *New J. Phys.* **18** (2016) 103023/1-16 (査読有)  
DOI: 10.1088/1367-2630/18/10/103023

P. Kim, H. Katsura, N. Trivedi, and J.H. Han, "Entanglement and corner Hamiltonian spectra of integrable open spin chains" *Phys. Rev. B* **94** (2016) 195110/1-13 (査読有)  
DOI: 10.1103/PhysRevB.94.195110

H. Katsura and T. Koma, "The Z2 Index of Disordered Topological Insulators with Time Reversal Symmetry", *J. Math. Phys.* **57** (2016) 021903/1-13 (査読有)  
DOI: 10.1063/1.4942494

H. Katsura, D. Schuricht, and M. Takahashi, "Exact ground states and topological order in interacting Kitaev/Majorana chains", *Phys. Rev. B* **92** (2015) 115137/1-12 (査読有)  
DOI: 10.1103/PhysRevB.92.115137

K. Okunishi and H. Katsura, "Sine-square deformation and supersymmetric quantum mechanics", J. Phys. A: Math. Theor. **48** (2015) 445208/1-16 (査読有)  
DOI: 10.1088/1751-8113/48/44/445208

桂 法称, 丸山 勲, "フラットバンドの構成法 分子の奏でるハーモニー", 固体物理 vol.50 (2015) 41-54 (査読無)  
<https://www.agne.co.jp/kotaibutsuri/kota1050.htm>

桂 法称, "非線形方程式とトポロジカル励起", 数理科学, vol.631 (2016) 20-25 (査読無)  
[http://www.saiensu.co.jp/?page=book\\_details&ISBN=4910054690163&YEAR=2016](http://www.saiensu.co.jp/?page=book_details&ISBN=4910054690163&YEAR=2016)

[学会発表](計 37 件)

桂 法称, Y-t. Oh, H. Lee, J.H. Han, 『S=1 ダイマー・トライマー模型の基底状態相図』, 日本物理学会第 73 回年次大会, 東京理科大学, 2018 年

H. Katsura, "Quantum Hangu", Novel Quantum States in Condensed Matter 2017 (NQS2017), 京都大学, 2017 年

H. Katsura, "Topological order and zero modes in interacting Kitaev/Majorana chains", Quantum Devices, Natal (Brazil), 2017 年

桂 法称, "Sine-square deformations of one-dimensional critical systems: exact results", サイン 2 乗変形(SSD)とその周辺, 理研, 2017 年

桂 法称, H. Lee, Y-t. Oh, J.H. Han, 『量子トライマー模型の RVB 状態と Z3 トポロジカル秩序』, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 岩手大学, 2017 年

田村翔太, 桂 法称, 『共形場理論におけるサイン二乗変形とそのゼロエネルギー状態』, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 岩手大学, 2017 年

宇田川拓麻, 桂 法称, O. Salberger, V. Korepin, Z. Zhang, I. Klich, 『変形 Fredkin スピン鎖におけるエンタングルメントおよび量子相転移』, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 岩手大学, 2017 年

三ノ宮典昭, 桂 法称, 中山 優, 『U(1)対称性のない拡張 Nicolai 模型における超対称性の破れと南部-Goldstone フェル

ミオン』, 日本物理学会 第 72 回年次大会, 大阪大学, 2017 年

赤城 裕, 桂 法称, 高麗 徹, 『乱れのある 3 次元トポロジカル絶縁体の非可換 Z2 指数』, 日本物理学会 第 72 回年次大会, 大阪大学, 2017 年

H. Katsura, "Microscopic mechanisms of spin-driven ferroelectricity and the thermal Hall effect in insulating magnets", SCES 2016, 杭州(中国), 2016 年

H. Katsura, "Supersymmetry breaking and Nambu-Goldstone fermions in lattice models", Quantum Matter, Spacetime and Information, 京都大学, 2016 年

H. Katsura, "Topological indices of disordered insulators with time-reversal symmetry", LMU-UT Cooperation in Physics Workshop, 東京大学, 2016 年

三ノ宮典昭, 桂 法称, 中山 優, 『拡張 Nicolai 模型における超対称性の破れと Goldstone フェルミオン』, 日本物理学会第 71 回年次大会, 東北学院大学, 2016 年

桂 法称, 高麗 徹, 『カイラル対称性をもつトポロジカル絶縁体と非可換指数定理』, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 関西大学, 2015 年

他 22 件

[図書](計 0 件)

[産業財産権]

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

[その他]

ホームページ等

<http://park.itc.u-tokyo.ac.jp/hkatsura-lab/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

桂 法称 (KATSURA, Hosho)

東京大学・理学系研究科・准教授

研究者番号: 80534594

(2) 研究分担者

なし