

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 27 日現在

機関番号：32606

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2011～2013

課題番号：23740298

研究課題名(和文) 強相関電子系への代数的アプローチ

研究課題名(英文) Algebraic approaches to strongly correlated electron systems

研究代表者

桂 法称 (KATSURA, HOSHO)

学習院大学・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) 2,100,000円、(間接経費) 630,000円

研究成果の概要(和文)： 強く相互作用する格子上的フェルミオン系・ボゾン系・スピン系の理論的研究を行った。具体的にはHubbard模型や量子ハードスクエア模型などの基底状態を、Perron-Frobeniusの定理のような数学的な道具や、関連する模型の可積分性を利用して解析した。その結果、多くの厳密な結果を得ることに成功した。例えば、 $SU(n)$ 対称性のあるHubbard模型において、長岡の定理の自然な拡張が成立することを証明した。また、解析的・数値的手法を組み合わせることで、二次元のVBS状態のエンタングルメント・ハミルトニアンは一次元ハイゼンベルグ模型のハミルトニアンによって非常によく記述されることを明らかにした。

研究成果の概要(英文)： We have studied a variety of lattice models that describe systems of strongly interacting fermions, bosons, and spins. Examples of the models include Bose- and Fermi-Hubbard models, and the quantum hard-square model. Various exact and/or rigorous results were obtained by exploiting the integrability or using some mathematical tools like the Perron-Frobenius theorem. For example, we have proved a natural analogue of Nagaoka's theorem in the  $SU(n)$  Hubbard model. We have also studied entanglement spectra of solvable lattice models in two dimensions by combining analytical and numerical techniques. The results obtained suggest that the entanglement Hamiltonian of the valence-bond-solid (VBS) state is well described by the one-dimensional Heisenberg model.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学(数理物理・物性基礎)

キーワード：強相関電子系 物性基礎論 数理物理 エンタングルメント 記号計算

## 1. 研究開始当初の背景

高い対称性をもつ格子模型、たとえば  $SU(n)$  対称性のある Hubbard 模型は、従来はラージ  $n$  極限からの展開を議論するための技術的な道具と考えられることが多かったが、近年、冷却原子系において実験的にこのような高い内部自由度をもつ系を実現することが可能になってきている。また、通常の Hubbard 模型は、スピン  $1/2$  をもつ電子に対する模型であるが、スピノール自由度をもつボゾン系に対する Bose-Hubbard 模型の性質も近年盛んに議論されている。これらの系において、通常の Hubbard 模型において知られている性質がどのように拡張されるのか、今までに知られていないような新奇量子相が発現するか、電子系とボゾン系の本質的な違いは現れるか、などは興味深い問題である。

また、従来は教科書に現れるだけのトイ・モデルと考えられていたようなスピン系の模型も、最近では、光学格子中の Rydberg 原子などを用いることによって実現できる可能性 (量子エミュレーター) が指摘されている。このような原子系におけるトポロジカル相や、エニオンなどの新奇粒子の実現可能性を探ることも興味深い問題である。

## 2. 研究の目的

本研究では、上記のような格子上のフェルミオン系・ボゾン系・スピン系に対して主に数理物理的な観点からアプローチする。強相関電子系への代数的な観点からのアプローチは、一次元 Hubbard 模型などの可積分な模型に対しては非常に有効であることが知られている。このようなアプローチを、より広いクラスの模型に適用することをひとつの目的としている。また可解でない模型に対しても、演算子に関する不等式などを用いて、物理的な帰結を厳密に示すことを目指す。

また、Hubbard 模型からの Heisenberg 模型の導出のように、複雑な内部自由度をもつ系の低エネルギー有効ハミルトニアンを系統的に導出する手法を開発することも重要であると考えられる。このような摂動論的な方法と少数系の数値的対角化などを組み合わせ、多角的にアプローチする。

## 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。このようなハミルトニアン行列としての表示に着目し、量子多体系の基底状態に関する諸性質を調べる。また、Gershgorin の定理、半正定値行列の性質、ミニマックス原理などの演算子に関する不等式を巧みに組み合わせることで、エネルギーギャップの存在証明や、異なる模型の基

底状態エネルギーの比較などを行うことができる。

### (2) 可解格子模型・可解な場の理論の手法

一次元 Heisenberg ( $XXX$ ,  $XXZ$ ) スピン鎖、Hubbard 模型などの格子模型、 $1+1$  次元の sine-Gordon 模型や massive Thirring 模型は、Bethe 仮設法を用いて解ける模型であることが知られている。また、これらが臨界的な場合、その連続極限は共形場理論により記述されることが知られている。これらの可解格子模型や場の理論の結果を、いろいろな物理系に応用する。また、より簡単な自由ボゾン・フェルミオン系や一次元横磁場 Ising, XY 模型の結果も多用する。

### (3) 数式処理・数値対角化を用いた手法

複雑な内部自由度をもつ系の低エネルギー有効ハミルトニアンを導出するには、縮退のある場合の摂動論が有用である。これを Mathematica の数式処理機能を用いて「解析的」に実行する。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、エネルギーギャップの存在証明などに少数系の結果を応用することができる (computer-assisted proof)。

### (4) 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明らかになりつつある。本研究では、これらを数値的・解析的に計算することにより、量子多体系の基底状態を調べる。

## 4. 研究成果

### (1) Bose-および Fermi-Hubbard 模型

通常の電子系の Hubbard 模型では、全電子数が全格子点数よりひとつ少なく、斥力が無限大の場合に、格子が connectivity condition というものを満たせば、基底状態のスピンは完全偏極していること (長岡の定理) が知られている。この結果の自然な拡張を、 $SU(n)$  対称性のある Fermi-Hubbard 模型において、Perron-Frobenius の定理を用いて示した。この場合の基底状態は、内部自由度の置換に関して完全対称な状態である。また、 $SU(6)$  の場合に、この状態を観測する実験的なスキームの提案を行った (論文 [7])。

スピノール自由度をもつ Bose-Hubbard 模型の基本的な性質も調べた。その結果、基底状態はスピンに依存する相互作用の符号に応じて、i) 強磁性, ii) スピン一重項, iii)  $SU(3)$  強磁性, となることを厳密に証明した。これらは、従来は特定の占有数の場合に、有効スピン模型を用いて議論されていたもの

を、元の Bose-Hubbard 模型で、より一般的な状況に拡張したものである。(論文[6])

平坦なバンドをもつ梯子格子上的 Bose-Hubbard 模型の、基底状態の性質を調べた。特に、ボゾンのペアの自由度を基本自由度とみなすことで、低エネルギーの有効模型が可積分な XXZ スピン鎖になることを示した。その結果、平坦バンドの占有数に応じて、i) Wigner 結晶相, ii) ボゾンのペアの朝永-Luttinger 液体相, iii) 両者の共存相, が実現することを明らかにした。(論文[3])

さらに、Bose-Hubbard 模型の相互作用無限大の極限と考えられる、ハードコアボゾンの模型の基底状態と、全く同じ格子上的自由フェルミオン系の基底状態のエネルギーの比較を、ミニマックス原理などの不等式を用いた手法により行った。その結果、ホッピングにフラストレーションが存在する場合には、ボゾン系の基底状態エネルギーの方が、フェルミオン系のそれより下がる場合があることを、具体例を構成して示した。(論文[4])

## (2) 量子ハードスクエア模型

Lesanovsky により提案されていた、一次元光学格子中の Rydberg 原子系の有効模型は、パラメタ をうまく選ぶと、別の文脈で議論されていた相互作用する Fibonacci エニオン系と等価になることを示した。(論文[8])

また別のパラメタ では、この模型はフラストレーション・フリーとなり、基底状態と幾つかの励起状態を求めることができるが、この場合にエネルギーギャップが存在することを Knabe の方法を用いて厳密に証明した。(論文[2])

Lesanovsky の模型は二次元格子上でも定義することができ、これはハードスクエア模型とよばれる古典統計力学模型の量子版と考えられる。この模型の基底状態におけるエンタングルメントを数値的に調べ、エンタングルメント・ハミルトニアンと対応する共形場理論の関係性を明らかにした。特に梯子状の三角格子の場合に、 $c=4/5$  の二次元 3 状態 Potts 模型のユニバーサルリティクラスに対応すること、対応するエンタングルメント・ハミルトニアンが可積分であることを明らかにした。(論文[9])

## (3) 一次元量子臨界系のサイン二乗変形

開放端を持つ一次元量子臨界系のハミルトニアンを、サイン二乗関数により変調した系の基底状態は、一様周期系の基底状態と非常によく一致するということが先行研究 (H. Hikihara and T. Nishino, Phys. Rev. B 83, 060414 (2011)) において数値的に明らかにされていたが、この結果を XY スピン鎖の場合について厳密に証明した。(論文[19])

さらに、横磁場 Ising 鎖・Dirac フェルミオン系についても同様に、一様周期系とサイン二乗変形を施した系の基底状態が等価であることを示した。さらに、サイン二乗変形

したハミルトニアンは、連続極限で Virasoro 代数の生成子で表現できることを仮定すると、これらの結果を統一的に説明できることを明らかにした。(論文[14]) この結果は、数値計算において、サイン二乗変形を用いることの妥当性を保証する点で重要である。また自由フェルミオンの場合について、二次元以上への一般化も議論した。(論文[17])

これらの結果は、日本物理学会誌および雑誌・数理学において、和文で広く一般の読者に公表している。(論文[5, 12])

## (4) 二次元量子系のエンタングルメント

先行研究において、ギャップのある系のエンタングルメント・スペクトルと、境界をもつ系の物理的な端状態の間関係が指摘されていた (H. Li and F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 101, 010504 (2008); D. Poilblanc, Phys. Rev. Lett. 105, 077202 (2010)) が、これを二次元の Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki 模型の基底状態である valence-bond-solid 状態において、解析的な手法・モンテカルロ計算・数値的対角化を組み合わせることで調べた。その結果、この系のエンタングルメント・スペクトルは、一次元 Heisenberg スピン鎖のエネルギー・スペクトルと非常によく似ていることを明らかにした。(論文[16])

元々の Li と Haldane の仕事は、二次元のトポロジカル秩序をもつ系の典型例である、量子ホール系のエンタングルメント・ハミルトニアンを調べたものであるが、彼らの予想を境界のある共形場理論の観点から調べた。その結果、数値的研究によって得られていたエンタングルメント・スペクトルは、共形場理論における石橋状態によって自然に説明できることを明らかにした。また実際に、自由フェルミオンの場合について、これが正しいことを示した。(論文[15])

この他に、非自明な Chern 数をもつ平坦なバンドと格子系での整数量子ホール効果 (論文[18])、強磁性絶縁体におけるマグノンによる熱ホール効果 (論文[13])、量子スピン鎖における Raman 散乱 (論文[11])、Fibonacci 格子上的非線形 Schrodinger 方程式のマルチフラクタル解析 (論文[10])、多成分の非線形 Klein-Gordon 方程式のキंक解の構成 (論文[1]) などに関する研究をおこなった。

## 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 19 件)

[1] H. Katsura, “Composite-kink solutions of coupled nonlinear wave equations”, Phys. Rev. D 89 (2014) 085019/1-5 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevD.89.085019

[2] H. Katsura, “Existence of an energy gap in a one-dimensional Lesanovsky model”, *Phys. Rev. A* 88 (2013) 065602/1-3 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevA.88.065602

[3] S. Takayoshi, H. Katsura, N. Watanabe, and H. Aoki, “Phase diagram and pair Tomonaga-Luttinger liquid in a Bose-Hubbard model with flat bands”, *Phys. Rev. A* 88 (2013) 063613/1-5 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevA.88.063613

[4] W-X. Nie, H. Katsura, and M. Oshikawa, “Ground-State Energies of Spinless Free Fermions and Hard-Core Bosons”, *Phys. Rev. Lett.* 111 (2013) 100402/1-5 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.100402

[5] 桂 法称, “量子力学と恒等式”, *数理科学*, vol. 600 (2013) 14-20 (査読無)  
[http://www.saiensu.co.jp/?page=book\\_details&ISBN=4910054690637&YEAR=2013](http://www.saiensu.co.jp/?page=book_details&ISBN=4910054690637&YEAR=2013)

[6] H. Katsura and H. Tasaki, “Ground States of the Spin-1 Bose-Hubbard Model”, *Phys. Rev. Lett.* 110 (2013) 130405/1-5 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.130405

[7] H. Katsura and A. Tanaka, “Nagaoka states in the SU(n) Hubbard model”, *Phys. Rev. A* 87 (2013) 013617/1-8 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevA.87.013617

[8] I. Lesanovsky and H. Katsura, “Interacting Fibonacci anyons in a Rydberg gas”, *Phys. Rev. A* 86 (2012) 041601(R)/1-5 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevA.86.041601

[9] S. Tanaka, R. Tamura, and H. Katsura, “Entanglement spectra of the quantum hard-square model: Holographic minimal models”, *Phys. Rev. A* 86 (2012) 032326/1-9 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevA.86.032326

[10] M. Takahashi, H. Katsura, M. Kohmoto, and T. Koma, “Multifractals competing with solitons on Fibonacci optical lattices”, *New J. Phys.* 14 (2012) 113012/1-16 (査読有)

DOI: 10.1088/1367-2630/14/11/113012

[11] M. Sato, H. Katsura, and N. Nagaosa, “Theory of Raman Scattering in One-Dimensional Quantum Spin-1/2

Antiferromagnets”, *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012) 237401/1-5 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.237401

[12] 引原俊哉, 桂 法称, 丸山 勲, 西野友年, “エネルギー・スケール変調による量子系の境界条件・トポロジーの制御”, *日本物理学会誌*, 67, No. 6 (2012) 394 (査読有)  
<http://www.jps.or.jp/books/gakkaishi/2012/06/67-06.html>

[13] T. Ideue, Y. Onose, H. Katsura, Y. Shiomi, S. Ishiwata, N. Nagaosa, and Y. Tokura, “Effect of lattice geometry on magnon Hall effect in ferromagnetic insulators”, *Phys. Rev. B* 85 (2012) 134411/1-11 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevB.85.134411

[14] H. Katsura, “Sine-square deformation of solvable spin chains and conformal field theories”, *J. Phys. A: Math. Theor.* 45 (2012) 115003/1-17 (査読有)

DOI: 10.1088/1751-8113/45/11/115003

[15] X-L. Qi, H. Katsura, and A. W. W. Ludwig, “General Relationship between the Entanglement Spectrum and the Edge State Spectrum of Topological Quantum States”, *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012) 196402/1-5 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.196402

[16] J. Lou, S. Tanaka, H. Katsura, and N. Kawashima, “Entanglement spectra of the two-dimensional Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki model: Correspondence between the valence-bond-solid state and conformal field theory”, *Phys. Rev. B* 84 (2011) 245128/1-9 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevB.84.245128

[17] I. Maruyama, H. Katsura, and T. Hikihara, “Sine-square deformation of free fermion systems in one and higher dimensions”, *Phys. Rev. B* 84 (2011) 165132/1-8 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevB.84.165132

[18] K. Sun, Z-C. Gu, H. Katsura, and S. Das Sarma, “Nearly Flatbands with Nontrivial Topology”, *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 236803/1-4 (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.236803

[19] H. Katsura, “Exact ground state of the sine-square deformed XY spin chain”, *J. Phys. A: Math. Theor.* 44 (2011) 252001/1-9 (査読有)

DOI: 10.1088/1751-8113/44/25/252001

〔学会発表〕(計 26 件)

[1] 汪 正元, 中村 正明, 桂 法称, 「Laughlin 状態を記述する 1 次元格子模型における基底状態の一意性とエネルギーギャップの存在証明」, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学(徳島), 2013 年 9 月 28 日

[2] W-X. Nie, 桂 法称, 押川 正毅, “Ground-state Energies of Spinless Free Fermions and Hard-core Bosons on Infinite Lattice”, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学(広島), 2013 年 3 月 29 日

[3] 桂 法称, 「量子 hard-square 模型の基底状態と励起ギャップ」, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学(広島), 2013 年 3 月 28 日

[4] 田中 宗, 田村 亮, 桂 法称, 「2 次元量子格子気体模型におけるエンタングルメント」, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学(広島), 2013 年 3 月 28 日

[5] [招待講演] H. Katsura, “Interacting Rydberg atoms as quantum hard-squares”, Workshop on Disordered and Topological Systems, Zhejiang University, 杭州, 中国, 2013/3/18

[6] [招待講演] H. Katsura, “Inhomogeneous but solvable/integrable models”, Infinite Analysis: Past, Present, and Future, 京都大学(京都) 2013/3/4

[7] [招待講演] H. Katsura, “Sine-square deformation of one-dimensional critical systems”, Novel Development of Statistical Physics, 東京大学(東京) 2012/12/4

[8] [招待講演] H. Katsura, “Entanglement spectra of two-dimensional solvable models”, Entanglement Spectra in Complex Quantum Wavefunctions, MPIPKS, Dresden, Germany, 2012/11/16

[9] 桂 法称, 「Li-Haldane 予想と VBS/CFT 対応」, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学(神奈川), 2012 年 9 月 19 日

[10] 田中 宗, 田村 亮, 桂 法称, 「ハードコア格子ガスモデルにおけるエンタングルメント・スペクトル」, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学(神奈川), 2012 年 9 月 19 日

[11] 桂 法称, Igor Lesanovsky, 「Rydberg Blockade を用いた Fibonacci エニオンの実現」, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学(神奈川), 2012 年 9 月 18 日

[12] 桂 法称, 田中 彰則, 「SU(n)ハバード模型における長岡状態」, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学(神奈川), 2012 年 9 月 18 日

[13] [招待講演] H. Katsura, “Entanglement spectra of two-dimensional solvable models”, Correlations and Entanglement in Many-body Systems Out of Equilibrium, 精華大学, 新竹市, 台湾, 2012/9/11

[14] [招待講演] H. Katsura, “Golden chain of strongly interacting Rydberg atoms”, APCTP Focus Program on Quantum Condensation(QC12), APCTP, Pohang, Korea, 2012/8/21

[15] Jie Lou, 田中 宗, 桂 法称, 川島 直輝, “From entanglement entropy to entanglement spectrum: 1+1D CFT embedded in 2D valence bond solid”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学(富山), 2011 年 9 月 23 日

[16] 佐藤 正寛, 桂 法称, 永長 直人, 「1 次元量子磁性体におけるラマン散乱理論」, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学(富山), 2011 年 9 月 22 日

[17] K. Sun, Z-C. Gu, 桂 法称, S. Das Sarma, “Nearly flat band with nontrivial topology”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学(富山), 2011 年 9 月 22 日

[18] 桂 法称, 「可解スピン鎖・場の理論における sine 変形」, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学(富山), 2011 年 9 月 21 日

[19] [招待講演] H. Katsura, “Thermal Hall effect of magnons”, International Discussion Meeting on Thermoelectrics and Related Materials, Aalto University, Helsinki, Finland, 2011/6/15

[20] [招待講演] H. Katsura, “Entanglement spectrum of valence-bond-solid states: VBS/CFT correspondence”, The 5th Asia Pacific Workshop on Quantum Information Science, NTU, Singapore, 2011/5/28

他 6 件 (ポスター発表を含む)

〔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://www-cc.gakushuin.ac.jp/~20100072>

/

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

桂 法称 (KATSURA HOSHO)

学習院大学・理学部物理学科・准教授

研究者番号：80534594