Lieb-Schultz-Mattis 定理の高次元化とトポロジカル秩序変数

中村研究室　　西村崚佑

量子多体系において、エネルギーギャップの有無や基底状態の縮退度は、系の物理的性質を特徴づける重要な要素であり、例えば、電子系においては金属か絶縁体の違い、磁性体においては整数スピン鎖における Haldane ギャップの問題などと関連する。Lieb Schultz Mattis (LSM) の定理 [1] は $S = 1/2$ の 1 次元反強磁性 Heisenberg 模型

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] \qquad (i, j \text{ はサイト番号}) \tag{1}$$

において、基底状態のエネルギー E_0 にギャップがない (あるいは縮退している) ことを示すものであり、系の対称性のみに基づく証明法であることから非常に汎用性が高く、Oshikawa, Yamanaka, Affleck らによる一般化や [2]、Oshikawa による高次元系への適用の可能性が議論されている [3]。この高次元版の LSM 定理は Hastings の議論を加えて Lieb-Schultz-Mattis=Oshikawa-Hastings (LSMOH) の定理と呼ばれている。

一方、1 次元量子系に対する LSM 定理において用いられるひねり演算子 U の基底状態での期待値 $z = \langle U \rangle$ は、相転移前後でのその符号の変化によって 1 次元量子系のトポロジカルな情報を特徴づける秩序変数となることが知られており [4]、その性質と応用に関する研究が近年盛んに行なわれている。

本研究では LSM 定理の高次元化の議論と並行して、ひねり演算子による秩序変数の高次元化について議論する。LSMOH 定理で用いられるひねり演算子は空間 $\boldsymbol{r} = (x_1, \cdots, x_d)$ の 1 次元方向 (長さ L_1) にフラックスを通す形のもの

$$U = \exp\left(\frac{2\pi \mathrm{i}}{L_1} \sum_{\boldsymbol{r}} x_1 n_{\boldsymbol{r}} \right) \tag{2}$$

が用いられているが、この議論では低エネルギー励起の有無に関する条件において系のサイズに制限が加わるなど、不自然となる点が多い。そのような問題点の改善のため、ひねり演算子を

$$U = \exp\left(\frac{2\pi \mathrm{i}}{V} \sum_{x}^{V} x n_{\boldsymbol{r}} \right), \qquad V = L_1 \cdots L_d \tag{3}$$

とし、x が全座標点を 1 次元的に網羅するような境界条件を設定した改良版 [5,6] が提案されており、これについて検討したうえで、2 次元電子系へのひねり演算子の期待値による秩序変数の導入を試みる。2 次元正方格子上の拡張ハバード模型におけるスピン密度波相 (SDW) と電荷密度波相 (CDW) の間の相転移では、(2) で定義されるひねり演算子を用いると、2 つの相において符号の変化が現れず区別がつかなくなるが、適切な境界条件を設定した (3) の型のひねり演算子を導入することで、トポロジカルな分類が可能となることを多変数変分モンテカルロ法 (mVMC[7]) を用いた数値計算をまじえて議論する。

[**1**] E. H. Lieb,T. Schultz, and D. J. Mattis, Ann.Phys.(N.Y.) **16**, 407 (1961)

[**2**] M. Oshikawa, M, Yamanaka, and I. Affleck, Phys. Rev. lett. **78**, 1984 (1997)

[**3**] M. Oshikawa, Phys. Rev. Lett **84**, 1535 (2000); Hastings, EPL **70**, 824 (2005)

[**4**] M. Nakamura and J. Voit, Phys. Rev. B **65**, 153110 (2002); M. Nakamura and S. Todo Phys. Rev. Lett. **89**, (2002) 077204.

[**5**] Y. Yao and M. Oshikawa, arXiv:1906.116627

[**6**] S. C. Furuya and Y. Horinouchi, Phys. Rev. B **100**, 174435 (2019)

[**7**] T. Misawa, *et al.*, Comp. Phys. Comm., **235**, 447 (2019)