

Theoretical study on topological crystalline insulators

米澤, 弦起

<https://hdl.handle.net/2324/7393649>

出版情報 : Kyushu University, 2025, 博士 (理学), 課程博士
バージョン :
権利関係 :



氏 名 : 米澤 弦起

論 文 名 : Theoretical study on topological crystalline insulators
(トポロジカル結晶絶縁体の理論研究)

区 分 : 甲

論 文 内 容 の 要 旨

ブリルアンゾーン内の波数ベクトルでモードを指定するバンド理論は固体電子論で伝統的に用いられてきた手法であるが、量子ホール効果の研究を契機に、バンド構造をトポロジカル不変量で分類するという新たなアプローチが生まれた。量子ホール効果で出現する状態は時間反転対称性の破れた系におけるトポロジカル状態であったが、研究が進んだ現在では、時間反転対称性を有する系においてもスピン軌道相互作用や結晶対称性などを考慮することで、多様なトポロジカル状態が実現できることが認識されている。本論文は、特に結晶の対称性に由来するトポロジカル状態に関して行った二つの研究をまとめたものになる。

一つ目は、鏡映対称性の破れた系におけるトポロジカル相の研究である。鏡映対称性の破れ(キラリティ)はソフトマター物理学では頻出する重要な概念であり、キラリティを反映した興味深い物理現象も多数報告されている。他方、トポロジカル状態の研究は多岐に渡るが、結晶対称性に由来するトポロジカル状態の研究において、キラルな系の研究はあまり行われていない。そこで、トポロジカル状態が出現するようなキラルな系について、それらを記述するユニバーサルなモデルを構築し、その性質を調べることがこの研究の目的である。

そこで、キラルな系を記述するタイトバインディングモデルを新たに提案し、解析計算・数値計算を用いて研究を行った。まず、バルクのエネルギー分散を数値的に求め、モデルのパラメータであるホッピングの値を変えることでバンド反転が生じることを示した。そして、ハミルトニアンを波数に関して1次の項まで摂動展開することにより、バンド反転はディラック方程式の質量項の符号の変化として理解できることを示した。次に、トポロジーの異なる2つの領域から構成される系を考え、その境界にトポロジカル状態が出現することを数値的に示した。また、境界のある系に対しても、ディラック方程式を用いた有効モデルに基づく解析から、解析的にトポロジカル状態が出現することを示した。最後に、境界のある点にエネルギーを注入した時のエネルギーフローを数値的に求め、その流れがキラリティを反映して非対称になるということを示した。

二つ目は、摂動的に実現される高次トポロジカル絶縁体に関する研究である。特に、トポロジカル四重極相が出現するタイトバインディングモデル(BBHモデル)に着目して研究を行った。このモデルはワニエ型の高次トポロジカル絶縁体としばしば呼ばれる。BBHモデルにおいては、局所的にホッピングの符号を反転させており、この符号の反転によってワニエバンドのギャップが開き、ワニエ中心の量子化が保証されている。他方、このようなホッピングの反転は通常の固体物質で行うのは困難であり、BBHモデルを実験系で再現するためには、ホッピングの符号の反転に関して何らかの工夫が必要である。

そこで本研究では、符号の反転を追加のサイトを導入して実現するエクストラサイトモデルを採用し、その高次トポロジカル絶縁体としての性質を解析計算・数値計算を用いて研究した。この研究においても、まずはバルクのエネルギー分散を数値的に計算し、バンドトポロジーに寄与するバンド反転が生じることを示した。また、ワニエバンドの構造の数値計算も行い、エクストラサイトモデルにおいてもワニエバンドのギャップが開くということを示した。さらに、開放境界条件を課した有限系における数値計算を行い、高次トポロジカル絶縁体の特徴的な性質であるコーナー状態が出現することを数値的に実証した。またブリルアン・ウィグナー形式を用いて、トポロジカル相転移点はエクストラサイトモデルのスキームでは必ず存在し、ホッピングの値に依存しないことを解析的に示した。

本研究によるタイトバインディングモデルの理論の適用範囲はかなり広いものだと考えている。というのも、ホッピングとしては実数の値をとるもののみを考えており、要求される結晶の対称性も六回回転対称性などの原始的なものに限られるからである。以上のことから、本研究はメタマテリアルやソフトマターにおけるトポロジカル相の探索に新たな進展を与えるものとなる。