

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)			
論文調査委員	主 査	九州大学	教授	福田 順一
	副 査	九州大学	教授	野村 健太郎
	副 査	物質・材料研究機構	主任研究員	苅宿 俊風

論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

本学位論文は、近年の物性物理学において重要な研究主題になっている、エネルギーバンドをはじめとする種々のバンドの波数空間における非自明なトポロジーに由来する物性、輸送現象を対象とした理論研究である。より具体的には、結晶の対称性に由来するトポロジカル状態を対象として、以下の2つの主題に関する研究を行なっている。なお、量子力学に支配される系のみならず古典系にも適用可能な理論の構築を目指し、以下に述べるタイトバインディングモデルの構築において、ホッピングの値を、量子系で許される複素数とはせず実数に限定している。また、バンドトポロジーの物性、輸送現象への影響の特に初期の研究は時間反転対称性の破れた系を対象にしていたが、近年発展の著しいトポロジカル絶縁体の研究においては時間反転対称性を有する系の性質に焦点が当てられており、本研究においても時間反転対称性の破れを仮定してはいない。

1つ目の主題は、鏡映対称性の破れた系（キラリティを有する系）におけるトポロジカル状態の性質、およびエネルギー輸送現象である。キラリティを有する系は量子系、古典系を問わず自然界の様々な場所に存在するが、結晶の対称性に由来するトポロジカル状態とキラリティとの関係に関する研究はそれほど多く行われてはいない。本研究では、ハニカム格子におけるタイトバインディングモデルにおいて6回回転対称性に由来する非自明なバンドトポロジーを議論したWu-Huモデルを基に、鏡映対称性を破る形で次近接のホッピング項を導入したモデルを提案した。上述のように時間反転対称性を有し実数のホッピング項からなるモデルについて、最小限の修正でキラリティを導入することを試みたものであり、その意味で普遍性、適用可能性は高い。

本研究ではまずこのモデルについてエネルギーバンドを求め、ホッピングの値を変えることでWu-Huモデルと同様のバンドトポロジーの変化に関係するバンド反転が生じることを示し、波数に関する摂動展開により得られる低エネルギーモデルから、そのバンド反転がディラック方程式の質量項の符号の変化に由来するものと明らかにした。また、Wilsonループと呼ばれるとされる量の解析により、前述のディラック方程式の質量項の符号の違いで特徴づけられた異なる状態について、確かに異なるトポロジカル不変量による特徴づけが可能であることも示した。さらに、バンドトポロジーの異なる2つの領域からなる系の数値解析を行い、(量子力学の言葉で言えば)波動関数が有限の値を示すのが2つの領域の境界に局在しているエッジ状態が確かに出現することを示すとともに、2つの領域の境界を励起するとキラリティに由来する非対称なエネルギー輸送が境界において生じることも明らかにした。

もう1つの主題は、高次トポロジカル絶縁体に関する新たなモデルの提案である。本研究では特に、有限な2次元系の頂点(0次元)に波動関数が局在した状態(トポロジカル4重極相)が出現

する模型の1つである **BBH** 模型に着目している。**BBH** 模型は4頂点を有するサイト内、およびサイト間にホッピングを導入するタイトバインディング模型であり、局所的なホッピングの符号反転を導入している。この符号の反転によりワニエバンドと呼ばれるバンド構造のギャップが開き、ワニエ中心と呼ばれる量に基づくトポロジーの分類を可能としている。ただ、ホッピングの符号の反転を現実の系（特に固体物質）で実現するのは容易ではない。

本研究では、**BBH** 模型に追加のサイトを導入することで実効的に符号の反転を実現するエクストラサイト模型を提案した。この模型についてまずエネルギーバンドを求め、**BBH** 模型と同様のバンドトポロジーの変化に関するバンド反転がパラメータの変化によって生じることを明らかにした。また追加のサイトの影響は摂動論に基づいて議論したものであるが、数値計算により摂動論が成り立たないパラメータ領域でも上述のバンド反転は生じることを示した、さらに Brillouin-Wigner 形式に基づく解析的な議論により、この模型におけるバンド反転は摂動論が適用可能かどうかに関わらず普遍的に起こることも明らかにした。正方形の有限系における波動関数の具体的な計算も行い、摂動論が成り立つパラメータ領域では、**BBH** 模型と同様に波動関数が正方形の頂点に局在するトポロジカル4重極相が確かに生じること、摂動論が成り立たない領域では波動関数の局在に「リーク」が生じること、後者の振る舞いは **BBH** 模型における拡張された鏡映対称性がこの模型では存在しないことに由来することを示した。

本研究は、結晶の対称性に由来するトポロジカル状態の理解を深化させる新規かつ重要な模型を提案し、その性質を精緻に調べたものである。また上述のように、提案された模型は実ホッピングのみを用いるものである。それゆえ、特に古典系として理論的に記述される多様な実験プラットフォームにおいて、本研究の模型は実装可能であることが期待され、その波及効果は大きいと考えられる。よって、本研究者は博士（理学）の学位を受ける資格があるものと認める。