

MERITインターンシップ（国内）報告書

工学系研究科 物理工学専攻

平山研究室 博士1年

MERIT12期生

佐藤 真武

1. インターンシップ概要

【実施期間】

2024年11月1日（金）～2024年11月29日（金）

【受け入れ先】

理化学研究所 創発物性科学研究センター(CEMS) 量子物性理論研究グループ

古崎 昭 グループディレクター

【研究課題名】

$C_{2z}T$ 対称な絶縁体におけるトポロジカル相転移及びWilson loopの研究

2. 研究背景

近年、数学におけるトポロジーの概念を用いて、物質中の電子状態を分類し、その物性を記述する研究が高い注目を集めている。系の対称性のみに基づく一般的な分類理論により、数多くのトポロジカル相やそれを実現する現実物質が発見されてきた。しかし、スピンレス系におけるトポロジカル相の研究は未だに発展途上である。特にスピンレストポロジカル絶縁体は、フォトニック結晶などでの人工量子系では実験的に実現され、トポロジカル相の未開拓領域として注目を浴びているものの、現実物質での候補はまだ発見されていない。

スピンレストポロジカル絶縁体を特徴づけるトポロジカル数は、どのような絶縁体にも定義できるわけではなく、バンド数やその表現に対する条件を満たす系にのみ定義される。その条件はトポロジカル数により異なるが、例えばEuler classというトポロジカル数は、 $C_{2z}T$ 対称性を持つ2次元系の2バンドに対してのみ定義される量で、 2×2 の実反対称Berry曲率 \tilde{F} を用いて

$$e_2 = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{F}}_{12}$$

と書かれる。Euler classで特徴づけられるトポロジカル絶縁体は、その脆弱性に由来する現象や巻きつき数に保護されたバンド交差点が示す特異な振る舞いなどが高い注目を集め、光格子やメタマテリアルなどを用いた実験的研究や理論的研究が精力的に行われている。

そこで本インターンシップでは、現実物質探索も含めたEuler classに関する研究を加速させるために、Wilson loopを用いる従来の手法よりも簡便にEuler classを計算する手法の開発に取り組んだ。また、スピンレストポロジカル絶縁体に関する一般的な理解を深めるために、複数のスピンレストポロジカル数が定義できる系を対象にして、それらのトポロジカル数を結び付ける関係式の導出や、自明な絶縁体との間で起こるトポロジカル相転移の詳細な理解に取り組んだ。

3. 研究内容

Euler classの定義に用いられる実のBerry曲率が回転や鏡映などの対称操作によって波数空間内でどのように変換されるのかを解析的に調べ、Euler classが必ず自明になる条件と非自明になり得る条件を求めた。Euler classが非自明になり得る場合については、多くの場合にEuler classを高対称点における占有バンドの情報のみから計算できる公式を解析計算により導出した。ある条件のもとではその公式を使ってEuler classを計算することができないが、その条件が対称性やトポロジーの観点からどのような意味を持つかを考え、高対称点における占有バンドの情報からトポロジーに関するなるべく多くの情報が得られるように計算を行った。

また、スピンレス絶縁相を特徴づける複数のトポロジカル不変量が同時に定義される系を対象に、それらのトポロジカル不変量の間になり立つ関係式を解析計算により導出した。ここで得られた関係式は、既に知られている理論模型に対する数値計算の結果と整合するものである。さらに、先行研究では調べられていなかったが、今回行った解析計算の結果が示唆する新たなトポロジカル相について、実際にその相を実現する2次元や3次元の強束縛模型を構築し、バルクのバンド構造やトポロジーを数値的に計算した。3次元の強束縛模型に対しては、バルクの非自明なトポロジーを反映して現れるギャップレス表面バンドも数値的に計算した。構築した3次元模型の中には、先行研究における主張に対する反例として捉えられるようなものもあり、その結果の解釈について議論した。これにより、スピンレス絶縁相を特徴づける個々のトポロジカル不変量が、ギャップレス表面状態とどのように対応するのかを詳細に理解することができた。加えて、スピンレス絶縁相を特徴づけるそれぞれのトポロジカル数に対して別々に議論されてきたトポロジカル相転移のプロセスが、それらのトポロジカル数を結び付ける関係式を通して整合することを解明した。

4. 謝辞

本インターンシップでご指導いただいた理化学研究所の古崎昭先生ならびに小林伸吾様、そしてインターンシップとしての受け入れにご協力いただいた量子物性理論研究グループおよび古崎物性理論研究室の全ての皆様に感謝申し上げます。また、本インターンシップの実施を承認して下さった指導教員の平山元昭先生、副指導教員の森本高裕先生に感謝いたします。最後に、貴重なインターンシップの機会をご提供下さったMERITプログラムに感謝いたします。