

MERIT 長期海外派遣報告書

派遣期間 2023/1/7~2023/3/17

理学系研究科物理学専攻 小形研究室 D2 北山圭亮

概要

私は、2023年1月7日より2023年3月17日までの間、スイス・フリブール大学の Philipp Werner 教授のグループに滞在し共同研究を行いました。本稿は滞在中の研究内容などについて報告するものです。

渡航の背景

私は修士課程と博士に入学してからの1,2年で、フロケ理論を用いて有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ の光誘起トポロジカル相転移の理論研究を行ってきました。しかし、私のしてきた理論予言では相互作用の項を考慮していないなどの近似が行われています。より正確に新しい現象を理論的に予言するためには、動的平均場理論など新しい手法を学ぶ必要があると考えました。Philipp Werner 教授は動的平均場理論や密度汎関数理論などの手法を用いて物性物理の理論研究を行っている計算物理学の第一人者であり、そのような方と共同研究することは今後の研究生活のためにも重要と考え、渡航を計画しました。

研究内容

近年、レーザー技術の著しい発展から光誘起相転移の研究が大きく発展しています。その中でも円偏光を照射したグラフェンがトポロジカルに非自明な状態になることが岡らによって明らかになって以来、フロケ理論を用いた光誘起トポロジカル相転移の理論研究が世界中の研究者を巻き込んで数多くなされています[1,2]。この光誘起トポロジカル相転移が起こる物質群は、遷移金属ダイカルコゲナイドやノーダルライン半金属、そして申請者がこれまで研究してきた有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ など徐々広がってきています[3,4]。

こうした理論研究は、強束縛模型から出発して光の影響はトランスファー積分にパイエルズ位相を掛けることで考慮する場合があります。しかし、異なる軌道間のホッピングがある系においてはパイエルズ位相で書き表される効果に加えて、ダイポール行

列と光の振動電場の内積で書き表される項も必要であることが明らかにされています。今までの先行研究はこの効果が小さいとして無視されてきましたが、動的平均場理論を用いた輸送係数などの計算からダイポール行列による寄与は小さくないことが示唆されています[5]。そこで、我々は異なる軌道間のホッピングがある物質を対象に、ダイポール行列による寄与が光誘起トポロジカル相転移に与える影響を調査しました。

我々は単分子膜 BC_2N の単純なモデルを研究しました。この材料は、シフト電流との関連でも興味深いです。Michael Schueler 助教が提供したモデルを用いて、異なる駆動条件において双極子励起のあるモデルとないモデルについて、フロケバンド構造およびベリー曲率やベリー曲率ダイポールなどの関連量を計算しました。その結果、双極子励起のある項を入れることによりベリー曲率ダイポール振る舞いに変化することが分かりました。このことから非線形ホール伝導度の振る舞いも変化し得ることが示唆されます。しかし、このモデルの完全な解析、特にシフト電流の解析はまだ完了していません。そのため今後も Philipp Werner 教授と連絡を取って共同研究を続けていくつもりです。

謝辞

フリブール大学での2ヶ月間の滞在を経て、自身の研究テーマについてより深い理解を得られたと同時に、国際性豊かな環境に身を置くという貴重な経験をすることができました。長期海外派遣の機会を与えてくださった指導教官の小形正男教授、旅費のサポートをしてくださった日本学術振興会、お世話になった共同研究者の Philipp Werner 教授と Michael Schueler 助教、そして Werner 研究室のメンバー、MERIT プログラムに感謝いたします。



参考文献

- [1] T. Oka and H. Aoki, Phys. Rev. B **79**, 081406(R) (2009).
- [2] M. S. Rudner and N. H. Lindner, Nat. Rev. Phys. **2**, 229 (2020).
- [3] K. Kitayama and M. Mochizuki, Phys. Rev. Res. **2**, 023229 (2020).
- [4] K. Kitayama, *et al.*, Phys. Rev. B **104**, 075127 (2021).
- [5] Denis Golež, *et al.*, Phys. Rev. B **100**, 235117 (2019).