

氏 名	荒木 広夢
学 位 の 種 類	博 士 (理学)
学 位 記 番 号	博 甲 第 9364 号
学 位 授 与 年 月 日	令和2年3月25日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第4条第1項該当
審 査 研 究 科	数理物質科学研究科
学 位 論 文 題 目	

Numerical study of higher order topological insulators by machine learning and Berry phases
(機械学習とベリー位相による高次トポロジカル絶縁体の数値的研究)

主 査	筑波大学教授	博士(学術)	都倉康弘
副 査	筑波大学教授	工学博士	初貝安弘
副 査	筑波大学教授(連係大学院)	理学博士	胡 暁
副 査	東京大学教授	博士(工学)	岩本 敏

論 文 の 要 旨

本論文は Numerical study of higher order topological insulators by machine learning and Berry phases (機械学習とベリー位相による高次トポロジカル絶縁体の数値的研究)と題され、全 8 章からなる。本論文は、近年物性物理学の分野で研究が大きく進展しているトポロジカル相の物理分野の中で、より新規性の高い研究テーマである高次トポロジカル相の物理に関するものであり、量子化ベリー位相という新しい量子数の意義と有効性を数値的計算により確立すると共に機械学習と呼ばれる新規な数値的研究手法を高次トポロジカル相の研究に適用しその有効性を確立したものである。

第 1 章は、本論文の導入であり、背景、目的、および構成について述べられている。

第 2 章は、トポロジカル相に関する既存の研究の基本的な部分の紹介である。

第 3 章は、本論文が対象とする高次トポロジカル絶縁体のモデルの導入である。具体的には、超立方体上で定義される Benalcazar-Bernevig-Hughes モデルおよび、breathing kagome モデルや breathing Pyrochlore モデルを含む超四面体上で定義される高次トポロジカル絶縁体モデルとそのトポロジカル不変量が記述されている。

第 4 章は、本論文で用いる量子化されたベリー位相の基礎的な議論と系の対称性にその起源をもつ量子化についての記述である。局所的な捻りによりコンパクトなパラメータ空間(閉曲線)を導入することで、多粒子系の基底状態からベリー接続を定義する。このベリー接続は、一般に波動関数の位相の不定性に起因するゲージ変換の自由度をもち、対応してゲージ依存量であるベリー位相は 2π の整数倍の不定性をもつ。さらに、系がある対称操作の下で不変な場合、このベリー位相は、ある種の拘束条件に従い、

ゲージ依存性との両立条件を課すことでベリー位相は離散的な値に量子化し、トポロジカル不変量となる。

第 5 章では、第 4 章で述べた一般論にしたがう量子化ベリー位相を具体的に構築することで、高次トポロジカル絶縁体と呼ばれる新規なトポロジカル相の相分類を行った結果が述べられている。一般にこのベリー位相は境界をもたない周期的な系に対して定義されるが、非自明な量子化ベリー位相を持つ系は、系が境界を持つとき、系の角に局在する角状態 (corner states) を持つことがいくつかの具体的な系で数値的に確認されている。この量子化ベリー位相と角状態の存在は、トポロジカル相では普遍的に成立すると考えられているバルクエッジ対応とよばれる基本原理の一つの例である。具体的な模型としては breathing kagome 模型、breathing Pyrochlore 模型、2 次元および 3 次元の Benalcazar-Bernevig-Hughes 模型に対する有効性が示されている。また、本論文で提案するベリー位相は、電子間相互作用がある系にも適用可能であり、具体的に数値厳密対角化を用いて相互作用を持つ Benalcazar-Bernevig-Hughes 模型での有効性の解析が述べられ、バルクエッジ対応 (バルクコーナー対応) の観点から角状態も議論されている。

第 6 章は、機械学習手法を用いた高次トポロジカル絶縁体の不純物効果に関する研究の記述である。機械学習を物性物理学の研究に用いるのは、新規な試みであり、近年多くの興味を集めているが、本論文では特にトポロジカル物質の境界に局在した状態を、機械学習の基本的手法である画像認識を適用することでその有効性が検討されている。具体的には breathing 構造を持つ kagome 格子上の高次トポロジカル絶縁体模型における不純物ポテンシャルに対する高次トポロジカル絶縁体相の頑強性が議論されている。機械学習としては、既知の不純物を持たない系を教師データとして用いて学習し、不純物のある系の相の推定を行い、そこで得られた相図が既存の手法による相図と整合的なものであることを確認している。物理的には、不純物理による乱れの強度がバルクのエネルギーギャップを超えない限り、高次のトポロジカル絶縁体相が頑強であることが示されている。

第 7 章は論文全体の総括と今後の展望についての記述、第 8 章は謝辞であり、その後、研究業績 (投稿論文、会議での発表)、参考論文が記載されている。

審 査 の 要 旨

[批評]

対称性の破れと独立な相分類であるトポロジカルな相分類と関連のトポロジカル相の物理は物性物理学において、近年多くの興味を集めているが、特にバルク状態が定義する量子化するトポロジカル量と、系が境界を持つ際に現れるエッジ状態としての局在モードの関係はバルクエッジ対応として、系の詳細によらない基本的な原理とされる。特に近年興味を集めている高次トポロジカル相とは、バルクより 2 次元以上小さな境界 (2 次元のバルクに対する 0 次元の角など) に、局在モードを持つトポロジカル相である。本論文では、この高次トポロジカル相に対するバルクのトポロジカル量を量子化ベリー位相により新規に定義すると共に角状態との対応を具体的な種々の模型に対する数値計算で確立したもので、バルクエッジ対応が対象とする相を高次トポロジカル相へ拡張していて、その新規性並びに独自性は極めて高い。また、本論文の後半では、この高次トポロジカル相の特徴である角状態の不純物効果に着目することで、これも近年多くの興味を集めている機械学習の手法を高次トポロジカル相の研究に適用し、その有効性

を確認しており、本論文はこの観点からも新規性とその意義を高く評価できる。

以上の諸点に基づき本論文は、学術的にみて、研究の新規性、独創性が高く、更には具体的な系に対する結果の物理的な有効性に関してもその意義が高く評価でき、筑波大学数理物質科学研究科物理学専攻の博士論文として十分な意義をもつと評価される。

〔最終試験結果〕

令和2年2月10日、数理物質科学研究科学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

〔結論〕

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士(理学)の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。