

## VII-2. 量子物性理論

教授：初貝安弘

助教：苜宿俊風

大学院生：4名(博士1名、修士3名)

卒論学生：1名

### 1 グラフェン等ディラック電子系におけるトポロジカルな効果と電子相関

#### 1.1 グラフェンのカイラル対称性と電子間相互作用によるカイラル凝縮相の理論

グラフェンは量子干渉効果としての幾何学的位相が重要な物質相である。このグラフェンにおける最も特徴的なディラック型のエネルギー分散の起源は通常時間反転対称性と反転対称性に帰着されることが多いが、蜂の巣格子上の強結合近似のもとでは、単位胞内の2つの炭素原子の等価性ならびに、系の格子が2種類に分類され、飛び移り積分がその間のみをつなぐことに帰着することができる。これがグラフェンのカイラル対称性であり、系の乱れに関するユニバーサリティクラスならびにトポロジカルな性質も規定する重要な特性と考えられている。これに関して、我々は多くの研究を重ねて来たが、本年度は特に電子間相互作用に対するカイラル対称性の意義を明らかとした。現在までのカイラル対称性に関する他の多くの研究は主に電子相関を無視した一電子問題に関するものであり、我々のこの研究は一つの新しい方向であることをここで強調しておく。具体的には最近接の電子間相互作用のみを考慮した場合に、磁場下の電子正孔対称なグラフェンの基底状態がカイラル凝縮相と呼ばれる特殊な相であることを示した。更に数値計算を併用し、この系における励起ギャップの磁場依存性を計算し、関連する実験との整合性を示した(図1参照)。

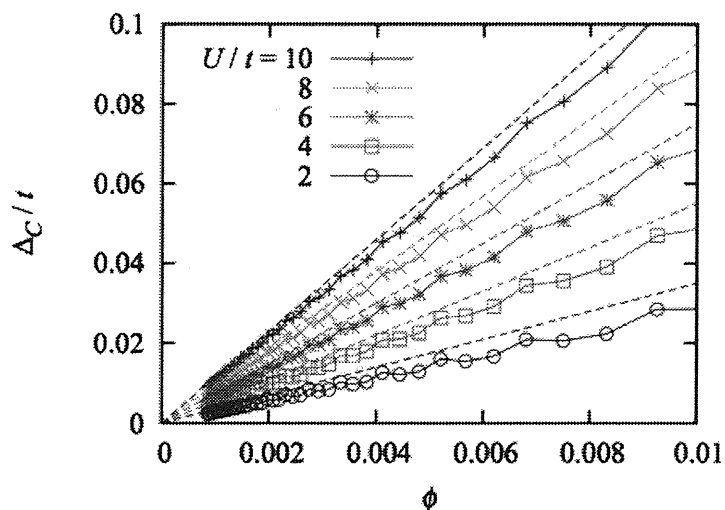


図1: グラフェンの格子あたりの磁場とカイラル凝縮相での励起ギャップ [2,6]

また、一般に磁場下の2次元電子系のホール伝導度はチャーン数とよばれる系のトポロジカルな物理量(位相不変量)で決定される。このチャーン数はベリー接続を仮想ベクトルポテンシャルと見たときの仮想的な磁場に対応するが、我々の見いだしたカイラル凝縮相においては、系の電荷正孔対称性に起因してこのベリー接続は消失し、対応してホール伝導度もゼロとなる。つまり電子正孔対称性の下で不変なカイラル凝縮相はホール絶縁体であることも明らかとなった。

## 1.2 グラフェンの有限の断片（グラフェンフレーク）の特異な電子状態とトポロジカルな性質

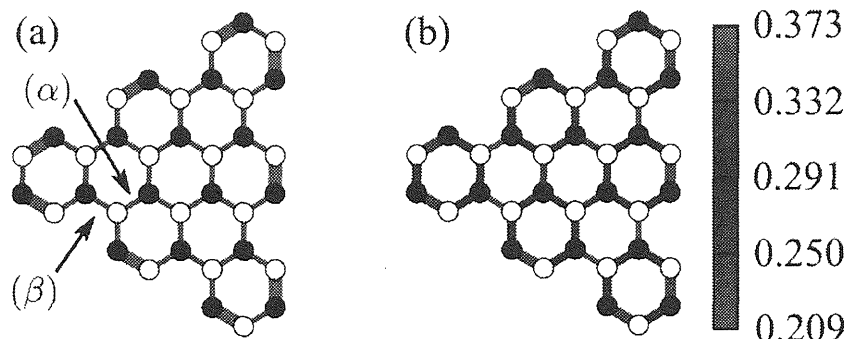


図 2: グラフェンフレークにおける局所ベリー位相 (左) とボンド相関関数 (右) [9]

グラフェンの境界においてはジグザグ端において局在状態が現れることはよく知られているが、有限の形状をもつグラフェンフレークにおいてはこの局在状態の再結合により、ダイマー形成が生じることをトポロジカルな観点から、我々は示してきた。本年度は更にこのダイマー状態に関する電子相関の効果の数値計算を併用して明らかとした(図 2)。

## 2 バルク・エッジ対応の普遍性とその応用

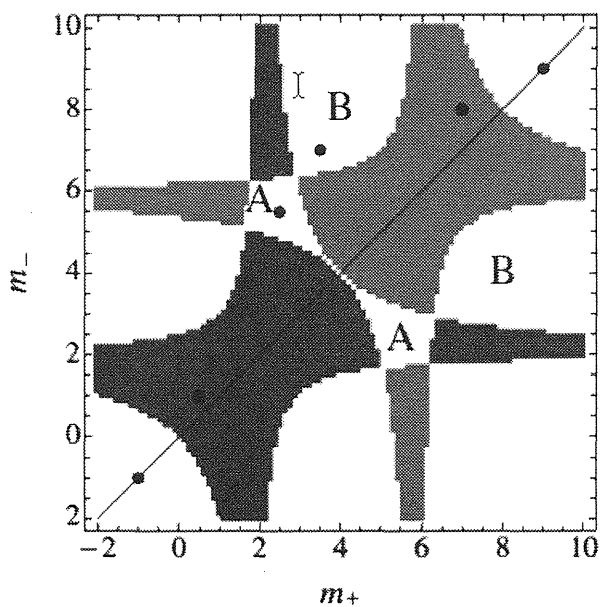


図 3: 弱いトポロジカル相を持つ模型の相図 [3]

近年の物性論において、トポロジカルな物質相が多くの興味を集めているが、一般にバルクのトポロジカル相は絶縁体であり、外界からの摂動に対して応答しないため、特徴をもたない。その一方で、系に不純物が存在する、もしくは、系に境界が存在する場合、不純物近傍もしくは系の境界近傍に局在した状態が現れる。この局在した状態を量子ホール系にならって一般的なエッジ状態と呼んで、このエッジ状態をもって逆にバルクのトポロジカル相が特徴づけられていると見なす。これがいわゆる「バルク・エッジ対応」の視点であり、近年広くその有効性が確認されつつある。本年度はこのバルク・エッジ対応の観点から具体的な系における研究を行い幾つかの新しい成果を得た。

## 2.1 ディラックフェルミオン系のバルク・エッジ対応の理論

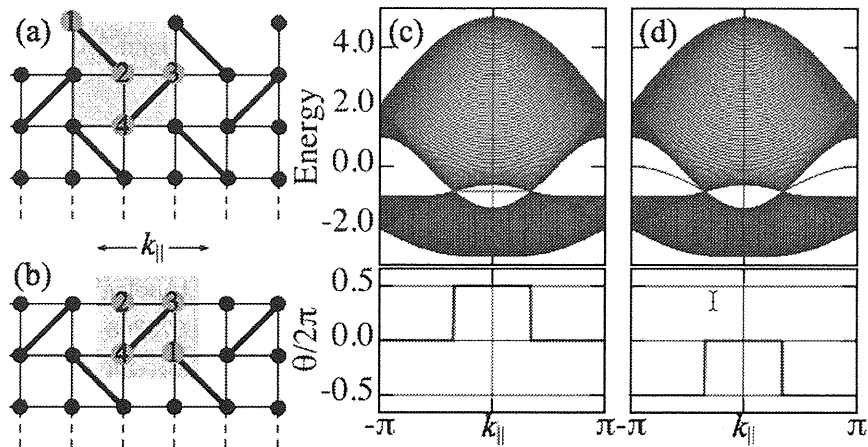


図 4: 対称性で守られたシャストリーサザランド模型における種々の境界とベリー位相、エッジ状態のエネルギー分散 [1]

グラフェンのみならずディラックフェルミオンの物理はギャップ有限の場合も質量有限のディラックフェルミオン系として理解することで、2次元半導体においては普遍的な重要性をもつ。この立場から一般のディラックフェルミオン系に関するバルク・エッジ対応の理論を構築し、2次元層状の弱いトポロジカル相をもつ模型(図3)、ならびに特異分散をもついわゆるシャストリーサザランド型の格子模型(図4)などの種々の模型に対して具体的な研究を遂行し、その特徴をベリー位相等のトポロジカルな物理量とエッジ状態に着目し明らかとした。

## 2.2 シリセンのエッジ状態とその多様性と普遍性

シリコン原子が座屈した蜂の巣格子を形成した2次元物質であるシリセンは、近年実験的に合成することに成功したことともなあって、急速に研究が活発化している。このシリセンにおいては、グラフェンとの構造上の類似性から系の境界に特徴的な局在状態が生じることが期待される。関して我々は、系にシリンダー状の境界が存在する場合に境界近傍に出現する局在状態(エッジ状態)の特性及びその物理的起源をシリセン固有の境界における多様な水素終端の可能性、物理的帰結まで、数値計算とトポロジカルな考察を併用することで理論的に明らかにした。

### 3 トポロジカル秩序の概念とその物性論における応用

「量子液体相」は、古典的物理量で表現できる特徴的な秩序変数をもたないことを最大の特徴とする量子相である。この観点に立つと、通常きわめて有効な「秩序変数」を用いた「対称性の破れ」の概念に基づく相の理論は量子液体相においては無力となる。そこで、我々は量子論固有の幾何学的位相を用いる相分類の理論的枠組みを構築し、ベリー位相並びにチャーン数を用いて具体的な量子液体相の分類、特徴づけに関して研究を進めてきたが、本年度も関連の基礎的理論を構築するとともに具体的な模型に対する有効性を確認し、現在論文を執筆中である。

#### <論文>

1. T. Kariyado and Y. Hatsugai, "Symmetry Protected Quantization and Bulk-Edge Correspondence of Massless Dirac Fermions: Application to Fermionic Shastry-Sutherland Model", *Phys. Rev. B* 88, 245126(7) (2013), doi:10.1103/PhysRevB.88.245126
2. Y. Hamamoto, T. Kawarabayashi, H. Aoki and Y. Hatsugai, "Spin-resolved chiral condensate as a spin-unpolarized  $\nu=0$  quantum Hall state in graphene", *Phys. Rev. B* 88, 195141(6) (2013), doi:10.1103/PhysRevB.88.195141
3. T. Fukui, K.-I. Imura and Y. Hatsugai, "Symmetry protected weak topological phases in a superlattice", *J. Phys. Soc. Jpn.* 82, 073708(5) (2013), doi:10.7566/JPSJ.82.073708
4. T. Shiokawa, G. Fujita, Y. Takada, S. Konabe, M. Muraguchi, T. Yamamoto, T. Endoh, Y. Hatsugai and K. Shiraishi, "Influence of Coulomb Blockade on Wave Packet Dynamics in Nanoscale Structures", *Jpn. J. Appl. Phys.* 52, 04CJ06 (4), (2013), <http://jjap.jsap.jp/link?JJAP/52/04CJ06/>
5. C. M. Puetter, S. Konabe, Y. Hatsugai, K. Ohmori, "Interacting Electron Wave Packet Dynamics in a Two-dimensional Nanochannel", K. Shiraishi, *Applied physics express* 6, 065201(4) (2013) doi:10.7567/APEX.6.065201
6. Y. Hamamoto, Y. Hatsugai, H. Aoki and T. Kawarabayashi, "Chiral Symmetry and Many-Body Effect in Multilayer Graphene", *J. Phys. Conf. Ser.* 456, 012013(6) (2013), doi:10.1088/1742-6596/456/1/012013
7. T. Kawarabayashi, Y. Hatsugai and H. Aoki, "Stability of zero-mode Landau levels in bilayer graphene against disorder in the presence of the trigonal warping", *J. Phys. Conf. Ser.* 456, 012020(4) (2013), doi:10.1088/1742-6596/456/1/012020
8. T. Kawarabayashi, T. Honda, H. Aoki and Y. Hatsugai, "Chiral symmetry and fermion doubling in the zero-mode Landau levels of massless Dirac fermions with disorder", *AIP Conf. Proc.* 1566, 283(2) (2013), doi:10.1063/1.4848396
9. D. Seki, Y. Hamamoto, Y. Hatsugai, "Characterization of Dimers in Graphene Flakes", *JPS Conf. Proc.* 1, 012068(4) (2013), doi:10.7566/JPSCP.1.012068
10. T. Kariyado and Y. Hatsugai, "Emergence of Topologically Stable Dirac Dispersions in a Fermionic Shastry-Sutherland Model", *JPS Conf. Proc.* 1, 012001(4) (2013), doi:10.7566/JPSCP.1.012001
11. H. Sakamoto, Y. Hatsugai, H. Aoki and T. Kawarabayashi, "Sharp Zero-Energy Landau Levels in Multilayer Graphene", *JPS Conf. Proc.* 1, 012069(4) (2013), doi:10.7566/JPSCP.1.012069

## <著書>

1. 初貝安弘「原子崩壊がグラフェンで現実に」 パリティ 28 巻 11 月号 p.30-p32 (2013), “ Graphene yields evidence of atomic collapse ” by Ashley G. Smart, Physics today, Vol. 66, No.5, 2013, American Institute of Physics (翻訳)
2. Y. Hatsugai and H. Aoki, “ Graphene: Topological Properties, Chiral Symmetry and Their Manipulation ”, p.213-p.250 in Physics of graphene, ed. H. Aoki and Mildred S. Dresselhaus, Springer (2014)

## <講演:国際会議>

1. (invited) Y. Hatsugai, “ Symmetry protection and strong correlation in graphene with bulk-edge correspondence ”, Trends in theory of Correlated Materials 2013, Lausanne, Switzerland, Oct. 2 (2013)
2. (invited) Y. Hatsugai, “ Symmetry, Berry connection and Bulk-edge correspondence ”, Emergent Quantum Phases in Condensed Matter, Kashiwa, Japan, June. 5 (2013)
3. (invited) Y. Hatsugai, “ Universality & variety of edge states in graphene & silicene ”, CENIDE-CNMM-TIMS Joint Symposium on Interdisciplinary Nano-Science and Technology, Hsinchu, Taiwan, Jan.1 (2014),
4. T. Kariyado and Y. Hatsugai, “ Fermionic Shastry-Sutherland model: Emergence of Dirac dispersions, edge modes, and topological properties ”, Emergent Quantum Phases in Condensed Matter, Kashiwa, Japan, June. 13 (2013)
5. T. Kawarabayashi, T. Honda, Y. Hatsugai, H. Aoki, “ Landau levels of disordered massless Dirac fermions when the Dirac cones are both shifted and tilted ”, 20th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (EP2DS-20), Wroclaw, Poland, July 1, (2013).
6. D. Seki, Y. Hamamoto, Y. Hatsugai, “ Z2 Berry phase as a local dimer order parameter of graphene flakes ”, Statphys25, Seoul, Korea, July 21 (2013)
7. H. Sakamoto, Y. Hatsugai, H. Aoki and T. Kawarabayashi, “ Sharp Zero-Energy Landau Levels in Multilayer Graphene ”, The 12th Asia Pacific Physics Conference, Chiba, Japan, July 14 (2013)
8. D. Seki, Y. Hamamoto and Y. Hatsugai, “ Characterization of Dimers in Graphene Flakes ”, The 12th Asia Pacific Physics Conference, Chiba, Japan, July 14 (2013)
9. T. Kariyado and Y. Hatsugai, “ Emergence of Topologically Stable Dirac Dispersions in a Fermionic ShastrySutherland Model ”, The 12th Asia Pacific Physics Conference, Chiba, Japan, July 14 (2013)
10. D. Seki, Y. Hamamoto, Y. Hatsugai, “ Kekul structure of graphene flakes by topological order parameters ”, Recent Progress in Graphene Research (RPGR2013) Tokyo, Sep. 12 (2013)
11. T. Kariyado and Y. Hatsugai, “ Symmetry protected Z2 Berry phase in massless Dirac fermion systems ”, FIRST-QS2C WS on “ Emergent Phenomena of Correlated Materials ”, Tokyo, Nov. 13 (2013)
12. T. Sho, S. Konabe, K. Shiraishi and Y. Hatsugai, “ Edge states of silicene ribbons with several types of termination ”, (ISANN2013), Poipu Beach, Kauai, Hawaii, U.S.A. Dec. 8 (2013)

13. T. Shiokawa, G. Fujita, Y. Takada, S. Konabe, M. Muraguchi, T. Yamamoto, T. Endoh, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, “Multi-Electron Wave Packets Dynamics under MOSFET-like Potentials”, (ISANN2013), Poipu Beach, Kauai, Hawaii, U.S.A. Dec. 8 (2013)
14. G. Fujita, T. Shiokawa, Y. Takada, S. Konabe, M. Muraguchi, T. Yamamoto, T. Endoh, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, “Effect of Electric Field in Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Channel of Nanoscale devices”, (ISANN2013), Poipu Beach, Kauai, Hawaii, U.S.A. Dec. 8 (2013)
15. T. Kariyado and Y. Hatsugai, “Edge states and the quantized Berry phase of general massless Dirac fermions”, American Physical Society March Meeting, March 3 (2014)

## <講演:国内会議>

1. [招待講演] 初貝安弘「グラフェンのディラックコーンとゼロエネルギー局在状態」応用物理学会シリコンテクノロジー分科会シリコンナノテクノロジー研究委員会, つくば市 2013年11月11日
2. 苅宿俊風, 初貝安弘「Shastry-Sutherland 格子上のフェルミオンモデルにおけるディラック電子」固体中におけるディラック電子系物理の新展開, 京都大学基礎物理学研究所, 2013年6月19日
3. Y. Hatsugai, “Symmetry of Dirac fermions and Topological effects”, 科研費 新学術領域研究「原子層科学」キックオフミーティング, 仙台, 2013年9月2日
4. 関大地, 濱本雄治, 初貝, 安弘, 「グラフェン断片におけるダイマー状態と電子間相互作用」, 徳島大学, 日本物理学会 2013年秋季大会, 2013年09月28日
5. 本田貴大, 河原林透, 青木秀夫, 初貝, 安弘, 「傾いたディラック・コーンにエネルギー差がある場合の  $n=0$  ランダウ準位の異常性」徳島大学, 日本物理学会 2013年秋季大会/2013-09-28
6. 福井隆裕, 井村健一郎, 初貝安弘, 「二次元超格子系におけるトポロジカル相」, 徳島大学, 日本物理学会 2013年秋季大会/2013-09-28
7. 苅宿俊風, 初貝安弘, 「フェルミオン Shastry-Sutherland 模型におけるディラックコーンとエッジ状態」, 徳島大学, 日本物理学会 2013年秋季大会, 2013年09月28日
8. 坂本紘樹, 初貝安弘, 青木秀夫, 河原林透, 「3層グラフェンのゼロエネルギー・ランダウ準位のランダムネスに対する安定性」, 徳島大学, 日本物理学会 2013年秋季大会, 2013年09月27日
9. 濱本雄治, 河原林透, 青木秀夫, 初貝安弘, 「磁場中グラフェンのスピン非偏極なカイラル凝縮相の相関関数」, 徳島大学, 日本物理学会 2013年秋季大会, 2013年09月27日
10. 初貝安弘, 福井隆裕, 井村健一郎, 「時間反転対称性を破る格子ディラック模型の離散対称性と量子化」, 徳島大学, 日本物理学会 2013年秋季大会, 2013年09月27日
11. 岡本真由子, 井村健一郎, 高根美武, 福井隆裕, 初貝安弘, 「一次元トポロジカル絶縁体とトポロジカル超格子絶縁体」, 徳島大学, 日本物理学会 2013年秋季大会, 2013年09月27日
12. 棚谷翔, 小鍋哲, 白石賢二, 初貝, 安弘, 「シリセンのエッジ状態における水素終端の効果」, 徳島大学, 日本物理学会 2013年秋季大会, 2013年09月26日
13. 苅宿俊風, 初貝, 安弘「対称性によるベリー位相の量子化と質量ゼロのディラックフェルミオン系におけるバルク・エッジ対応」第7回 物性科学領域横断研究会, 2013年12月1日

14. 関大地, 濱本雄治, 初貝, 安弘 「Z2 order parameters for graphene flake」 第7回 物性科学領域横断研究会, 2013年12月1日
15. S. Sho, S. Konabe, K. Shiraishi, Y. Hatsugai, 「水素終端されたジグザグシリセンリボンにおけるエッジ状態」 第7回 物性科学領域横断研究会, 2013年12月1日
16. 苺宿 俊風, 初貝, 安弘, 「ベリー位相の分数量子化とディラック電子系のエッジ状態」 日本物理学会 2014年第69回年次大会, 2014年3月27日
17. 青木秀夫, 初貝, 安弘, Pavel Streda 「グラフェンにおける分極としての第二トポロジカル量子数」 日本物理学会 2014年第69回年次大会, 2014年3月27日
18. 吉村幸徳, 井村健一郎, 福井隆裕, 初貝安弘, 「超格子系の弱トポロジカル相とエッジ状態」 日本物理学会 2014年第69回年次大会, 2014年3月27日
19. 棚谷翔, 小鍋哲, 白石賢二, 初貝, 安弘, 「水素終端されたシリセンリボンにおけるエッジ状態の起源」 日本物理学会 2014年第69回年次大会, 2014年3月29日
20. 井上裕哉, 初貝, 安弘, 青木秀夫, 河原林透, 「ケクレ型ボンド秩序があるグラフェンのドメイン境界における局所状態密度」 日本物理学会 2014年第69回年次大会, 2014年3月29日

## <社会還元等>

1. 初貝安弘, "Progress of Theoretical and Experimental Physics" 編集委員
2. 初貝安弘, 東京大学物性研究所附属施設物質設計評価施設スーパーコンピュータ共同利用課題審査委員会委員

## <アウトリーチ>

1. 初貝安弘, 茗溪学園 Super Science High school (SSH) 学習会「対称性とその自発的破れ：現代物理学の基礎概念」 2013年9月1日

## <卒業論文>

1. 平野裕理：トポロジカル絶縁体のエッジ状態の研究（物理学類、卒業論文、2014.3）

## <博士論文>

1. Sho Tanaya：Numerical studies of edgen hydrogen terminated silicene ribbons(シリセンリボンの水素終端とエッジ状態の数値的研究) (数理物質科学研究科、物理学専攻、博士論文、2014.2)

## <外部資金>

1. 科学研究費 基盤研究 (B)「幾何学的位相による物質相：量子液体及びグラフェンでの応用と展開」研究課題番号：23340112, 2013 年度：5330 千円 (直接経費：4100 千円, 間接経費：1230 千円), (研究代表者: 初貝安弘)
2. 科学研究費 挑戦的萌芽研究「マヨラナ表示による幾何学的位相とトポロジカル秩序変数」研究課題番号：25610101, 2013 年度：2470 千円 (直接経費：1900 千円, 間接経費：570 千円), (研究代表者: 初貝安弘)
3. 科学研究費 基盤研究 (C)「磁場中の電子状態計算と位相不変量による電子物性」研究課題番号:23540460, (研究代表者: 新井正男)(研究分担者: 初貝安弘)
4. 科学研究費補助金 新学術領域研究 (研究領域提案型) 原子層科学, 領域代表 齋藤 理一郎, 理論班 連携研究者 初貝安弘