

VII-2. 量子物性理論

教授：初貝 安弘

助教：苅宿 俊風

大学院生：2名(博士0名、修士2名)

卒論学生：2名

1 トポロジカル相の理論とバルク・エッジ対応

ランダウ理論以来、自発的対称性の破れ概念に基づき、具体的には秩序変数を用いた相の理論は物性物理学において大きな成功をあげてきたが、近年、量子ホール相など対称性の破れを伴わない多くの量子液体相、スピン液体相の発見に伴い、異なる観点から物質相を理解しようとする試みがなされている。これがいわゆるトポロジカル相の理論である。この立場に立つとき、多くのトポロジカルに非自明な相は、Berry位相や Chern 数と呼ばれる一連のバルクのトポロジカルな量で特徴づけられるが、そのほとんどは古典的な観測量とならず、これらの直接の実験的な観測は困難である。その一方、トポロジカル相においては、バルクの非自明な特徴は系に境界や不純物等幾何学的な外乱があるときに生まれる局在状態に反映されると考えられており、これらの局在状態は一般にエッジ状態と称され、非自明なバルクの特徴とエッジ状態の存在の相互関係は一般的に「バルク・エッジ対応」とよばれ、トポロジカル相における一つの指導原理となっている。

本年度は、これらトポロジカル相に関する一般的な理論として「エンタングルメントチャーン数」なる新しいトポロジカル量を提案しその有効性を示すと共に「バルク・エッジ対応」の具体的な有効性を幾つかの系にて確立した。更にグラフェン等に磁場を印加した系におけるいわゆる Streda の分極が新しいトポロジカル数であることを具体的な系に対して示した。以下、各項目に関して、そのハイライトを図示する。

1.1 ベリー位相の分数量子化とエッジ状態

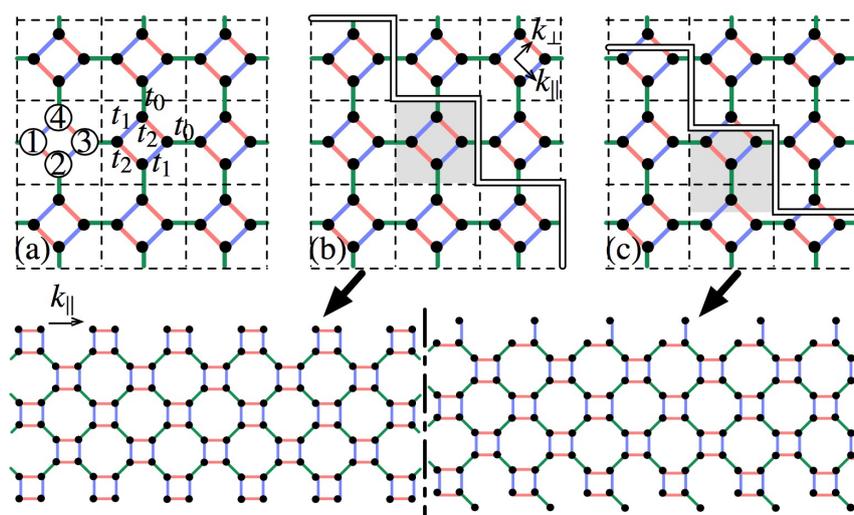


図 1: ベリー位相の分数量子化と対応する 2次元系の境界 [論文 6]

シリンダー状の2次元系を境界に平行な方向の波数に分解した1次元系の和として考えた時、シリンダー境界に存在するエッジ状態の存在は境界のない周期的な1次元系におけるBerry位相（Zak位相）と深く関連する。特に系がカイラル対称性等、高い対称性をもつとき、Berry位相は量子化し、断熱不変量となりトポロジカルな秩序変数となる。グラフェン等よく知られたカイラル対称性の場合、量子化するBerry位相は0または π となるが、本論文では分数量子化と呼ぶべき $\pm\pi/2$ に量子化するBerry位相をもつ系を考察し、その系におけるエッジ状態との関連を明らかとすることで分数量子化するBerry位相を用いた「バルク・エッジ対応」の有効性を始めて示した [図1, 論文6]。

1.2 弱いトポロジカル相における量子化ベリー位相とエッジ状態

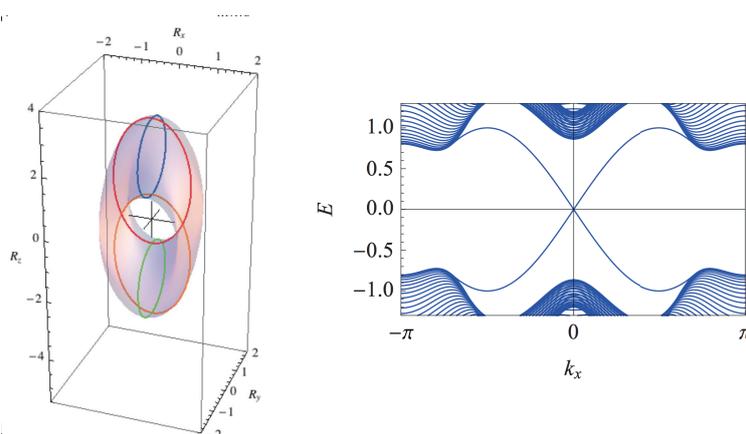


図2: 弱いトポロジカル相のベリー位相の幾何学的表示とエッジ状態の分散の例 [論文5]

トポロジカル相の理論でもっとも基本的なモデルとして2バンド系があるが、この系ではハミルトニアンは、パウリ行列で展開した際の係数が作る3次元空間内の一点と同一視できる。この対応を用いると系のChern数はある種の閉曲面が原点を囲む被覆次数であたえられ、Berry位相は原点周りの立体角から定まる。本年度は、特にある弱いトポロジカル相のモデルに関して、このBerry位相の幾何学的表示を用いてバルクのBerry位相を確定し対応するエッジ状態の関係を確定し、弱いトポロジカル相におけるバルク・エッジ対応の意義を確立した [図2, 論文5]。

1.3 エンタングルメントチャーン数の提案

量子スピンホール相としての2次元トポロジカル絶縁体とは、スピンの磁場を反転点することにより、全系の時間反転対称性を回復した量子ホール系と見なすことができる。ただし、その“有効”磁場はスピン軌道相互作用に起因し、一般にはスピンは保存量とならないため量子ホール相2層として個別に議論することはできない。更に系の時間反転対称性の拘束からクラマース縮退に起因しBerry接続は消失するため、量子ホール相にて相分類に有効であったChern数も常にゼロとなり相分類には使えない。

しかし、この系においても、いわゆる extensive partition とよぶ系の分割を用いてスピンに対して非対称な部分系をトレースアウトすることでエンタングルメントハミルトニアンを構成すると量子スピンホール相においても有限のChern数が得られる。我々は、これをエンタングルメントChern数とよび、そのトポロジカル絶縁体における相分類における有効性を確認した [図3, 論文4]。

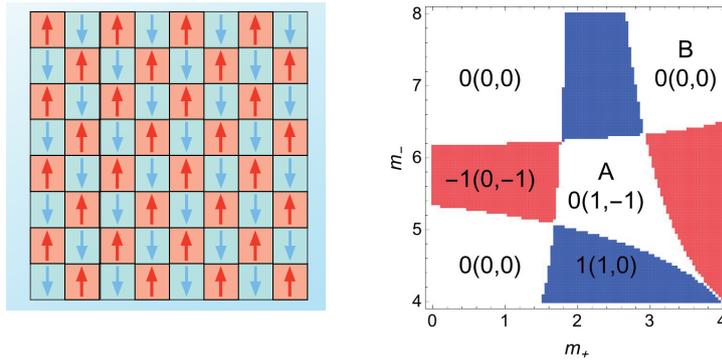


図 3: 弱いトポロジカル相におけるエンタングルメントチャーン数 [論文 4]

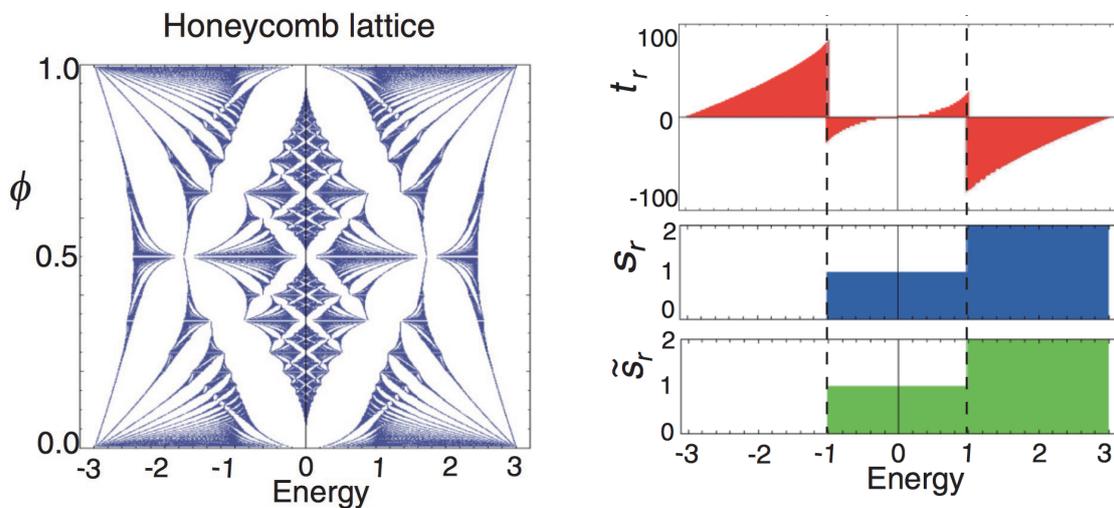


図 4: グラフェンの磁場-一粒子エネルギー図 (Hofstadter の蝶) と一連のトポロジカル数 [論文 7]

1.4 グラフェンならびに Hofstadter 系におけるトポロジカル数としての分極

Hofstadter 系ならびにグラフェン等磁場中の周期系におけるホール伝導度は e^2/h を単位に TKNN 数とよばれ、トポロジカル相における Chern 数のもっとも典型的な例としてよく知られている。この系においてもいわゆる Streda の分極を格子あたりの磁束が磁束単位あたり有理数近傍において準古典近似として考察するとフェルミエネルギーを変化させても不変の位相不変量となることを具体的な模型で示した。この新しい位相不変量は磁場のない時の状態密度のファンホープ特異点をフェルミエネルギーが過ぎるときのみ変化する。すなわち特異性なしに変化できないトポロジカルな不変量である。

2 特異分散の理論

2.1 傾いたディラック電子系のランダウ準位の一般論

量子力学の von Neumann-Wigner の定理によれば、典型的な特異分散である 2 次元のグラフェンの Dirac cone 等のゼロギャップ半導体は、一般的な立場からは偶然には存在せず、カイラル対称性や時間反転 + 空間反転等、何か対称性等による拘束下においてのみ存在し得る。この立場からは波数-エネルギーの分散である Dirac cone は一般には垂直な円錐でなく、傾いたものとなる (図 5)。本年度は、この傾いた Dirac cone

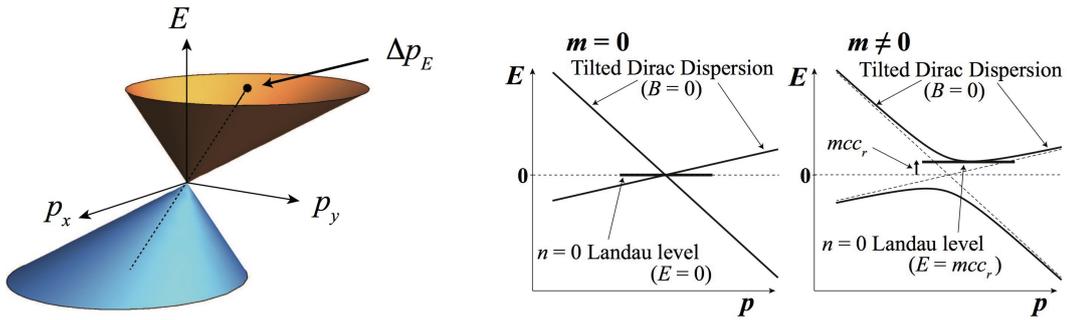


図 5: 傾いた Dirac cone (左) と $n = 0$ のランダウ準位の位置 (右) [論文 1]

を一般的な立場から議論し、そこで現れる一般化されたカイラル対称性について詳述した ([論文 1])。特に磁場効果としての傾いた Dirac cone が作るランダウ準位構造に対して、Dirac cone が質量をもつ場合を含めた統一的な記述も与えた。

2.2 平坦バンドの一般論とシリセンの電子状態

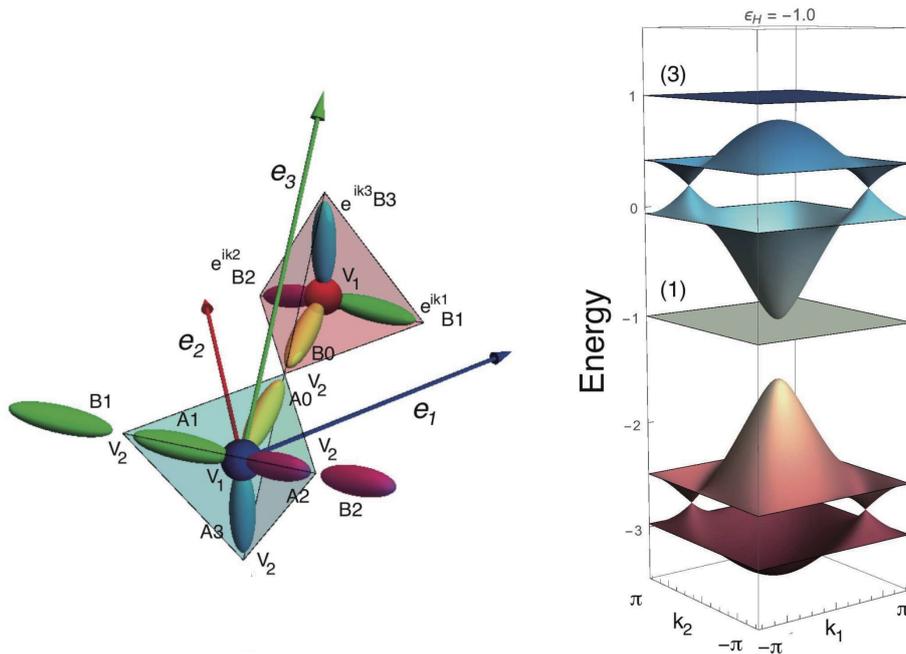


図 6: シリセンの基本格子 (左) と WT 型のシリセンの模型の平坦バンドを含むエネルギー分散 (右) [論文 2]

グラフェンは炭素原子がハニカム格子を作ったものであるが、そのシリコン類似物質であるシリセンは同様にシリコン原子がハニカム構造をとる。ただし、グラフェンは炭素原子が sp^2 型の混成軌道を取り平面状の結合を作る一方結合平面に垂直な π 電子が系全体に遍歴的に拡がり、伝導を担うのに対し、シリセン中のシリコン原子は sp^3 型の混成軌道を取り、その構造も単一平面上になく、ハニカム格子上的隣接原子が面

に垂直方向に出入りしたいいわゆるバックリング構造をとる。よって、系の伝導を考察する際グラフェンでは π 電子による単一軌道モデルでほぼ十分であるのに対し、シリセンではその多軌道性が本質的に重要となる。本研究ではもっとも単純化された多軌道モデルである 3 次元の Wear-Thorpe モデルをシリセンに変形し適用することでシリセンの全エネルギーバンド構造を定性的な理解を与えた。その際、初貝等が過去に与えた平坦バンドの一般論を適用することで、このシリセンのモデルにおいても平坦バンドの存在を一般的な観点から示した [論文 2]。平坦バンドは Dirac cone 等、ギャップレス点とともに特異分散の典型例である。物理的に一般の平坦バンドは実空間で局在した分子軌道から全電子系を構成したとき、一般にはこれらの分子軌道は非直交となり、これが遍歴性の起源となるが、分子軌道の総数に対してその非直交性が十分に存在しないとき電子系は分散を持ち得ず、平坦バンドが生まれることとなる。これはシリセンにおいてもその sp^3 性により、系の遍歴性は弱く、局所的な摂動（電子相関、格子変形）等により対称性が破れる可能性を示唆する。これは実際のシリセンにおいては、理想的なハニカム構造とそれに付随する Dirac cone は実現しにくく、実験的に観測されている多くの構造においては長周期構造等対称性の破れをとともなうことと整合的である [論文 2]。

< 論文 >

1. Y. Hatsugai, T. Kawarabayashi and H. Aoki, "Survival of sharp $n=0$ Landau levels in massive tilted Dirac fermions: Role of the generalized chiral operator", Phys. Rev. **B91**, 085112(12) (2015), doi:10.1103/PhysRevB.91.085112
2. Y. Hatsugai, K. Shiraishi and H. Aoki, "Flat bands in the Weaire-Thorpe model and silicene", New J. Phys. **17**, 025009(17) (2015), doi:10.1088/1367-2630/17/2/025009
3. K. Shiraishi and Y. Hatsugai, "Electronic Structure of Silicene with Dirac Fermion and Recipe for Its Synthesis", Journal of the Vacuum Society of Japan, **57**, 423-427 (2014), doi:10.3131/jvsj2.57.423
4. T. Fukui and Y. Hatsugai, "Entanglement Chern Number for an Extensive Partition of a Topological Ground State", J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 113705(4) (2014), doi:10.7566/JPSJ.83.113705
5. Y. Yoshimura, K.-I. Imura, T. Fukui and Y. Hatsugai, "Characterizing weak topological properties: Berry phase point of view", Phys. Rev. **B90**, 155443(13) (2014), doi:10.1103/PhysRevB.90.155443
6. T. Kariyado and Y. Hatsugai, "Fractionally Quantized Berry Phase, Adiabatic Continuation, and Edge States", Phys. Rev. **B90**, 085132(6) (2014), doi:10.1103/PhysRevB.90.085132
7. H. Aoki and Y. Hatsugai, "Polarization as a topological quantum number in graphene", Phys. Rev. **B90**, 045206(6) (2014), doi:10.1103/PhysRevB.90.045206

< 著書 >

1. 初貝安弘「物理学ガイダンス：大学で学ぶ物理：熱力学」 p.23-p36 (2014) 日本評論社.

< 講演:国際会議 >

1. (invited) Y. Hatsugai, "Symmetry in topological phases: Quantization and entanglement Chern numbers", Trends in Theory of Correlated Materials 2014, Aoyama, Tokyo, Japan, Oct 5-8 (2014).

2. (invited) Y. Hatsugai, "Symmetry protection and Berry connections in condensed matter systems", Geometric Aspects of Quantum States in Condensed Matter, Natal, Brazil, Aug.27 (2014).
3. (invited) Y. Hatsugai, "Geometric aspects of graphene: chiral symmetry and polarization", Geometric Aspects of Quantum States in Condensed Matter, Natal, Brazil, Aug.27 (2014).
4. (invited) Y. Hatsugai, "Bulk-edge correspondence: variety and universality", Topology in the New Frontiers of Materials Science, NIMS, Tsukuba, Japan, April 1 (2014).
5. T. Kariyado, D. Seki and Y. Hatsugai, "Correlation effects on the topological edge states in graphene nanoflakes: Relation between nanostructure and local magnetic order", Dynamics of Strongly Correlated Systems, Kashiwa, Japan March 30 (2015).
6. T. Kariyado and Y. Hatsugai, "Symmetry and Bulk-Edge Correspondence in the Dimerized Spin-1/2 Heisenberg Ladder with External Magnetic Field", American Physical Society 2015 March Meeting San Antonio, U.S.A. March 2-6 (2015).
7. T. Kariyado and Y. Hatsugai, "Topological Characterization of the Plateau Phase in the Dimerized Heisenberg Ladder", International conference on topological quantum phenomena, Kyoto, Japan, Dec. 16-20 (2014).
8. T. Kawarabayashi, Y. Inoue, Y. Hatsugai, and H. Aoki, "Sharp zero modes in disordered graphene with Kekule bond order", High Magnetic Fields in Semiconductor Physics (HMF-21), Panama City Beach, Florida, U.S.A. Aug. 3-8 (2014).
9. T. Kariyado and Y. Hatsugai, "Bulk-Edge Correspondence with the Berry Phase: Symmetry and Fractional Quantization", New Horizon of Strongly Correlated Physics, Kashiwa, Japan, June 25 (2014).
10. T. Kawarabayashi, Y. Hatsugai and H. Aoki, "Local density of states at topological defects in a Kekule bond order in graphene", Graphene week 2014, Gothenburg, Sweden, June 23-27 (2014).
11. T. Kariyado and Y. Hatsugai, "Boundary Shape Dependence of Edge Spectra: A View from Fractional Quantization of Berry phases", The OIST International Workshop on Novel Quantum Materials and Phases, Okinawa, Japan, May 14-17 (2014).

< 講演:国内会議 >

1. [招待講演] 初貝 安弘, "Variety of edge states: QHE to silicone: topological point of view", Nagoya Univ. Tanaka Lab. Seminar/2014-08-04 2014, Nagoya, Japan
2. 関 大地, 苅宿 俊風, 初貝 安弘, 「グラフェン断片の多様なゼロモードエッジ状態」 「日本物理学会第70回年次大会/2015-03-21-2015-03-24 (2015) 早稲田大学, 東京
3. 大野 修平; 苅宿 俊風; 初貝 安弘, 「3次元フォトリック結晶の局在基底によるトポロジカル数の計算」 日本物理学会第70回年次大会/2015-03-21-2015-03-24 (2015) 早稲田大学, 東京
4. 福井 隆裕, 初貝 安弘, 「エンタングルメント・チャーン数の提案と応用」 日本物理学会第70回年次大会/2015-03-21-2015-03-24 (2015) 早稲田大学, 東京

5. 初貝 安弘, 白石 賢二, 青木 秀夫, 「拡張した Weaire-Thorpe 模型による silicene のバンド構造解析 平坦バンドとディラックコーン」日本物理学会第 70 回年次大会/2015-03-21-2015-03-24 (2015) 早稲田大学, 東京
6. 苅宿 俊風, 初貝 安弘, 「メカニカルグラフェンにおけるディラックコーンの生成と消滅」日本物理学会第 70 回年次大会/2015-03-21-2015-03-24 (2015) 早稲田大学, 東京
7. 吉村 幸徳, 井村 健一郎, 福井 隆裕, 初貝 安弘, 「2 次元版弱いトポロジカル相と Berry 位相」第 8 回物性科学領域横断研究会 (領域合同研究会)/2014-11-21-2014-11-22 (2014) 東京大学, 東京
8. 大野 修平, 苅宿 俊風, 初貝 安弘, 「フォトニック結晶におけるトポロジカル数の局在基底による計算とその応用」第 8 回物性科学領域横断研究会 (領域合同研究会)/2014-11-21-2014-11-22 (2014) 東京大学, 東京
9. 苅宿 俊風, 初貝 安弘, 「磁場下のボンド交替スピン 1/2 ハイゼンベルグ 2 本鎖のトポロジカルな性質: 対称性とベリー位相」第 8 回物性科学領域横断研究会 (領域合同研究会)/2014-11-21-2014-11-22 (2014) 東京大学, 東京
10. 関大地, 初貝 安弘, 「グラフェン断片の電子相関とトポロジカルな性質」日本物理学会秋季大会/2014-09-07-2014-09-10 (2014) 中部大学, 愛知
11. 白石 賢二, 白川 裕規, 棚谷 翔, 初貝 安弘, 「シリセンリボンとゲルマネンリボンの端終端の効果の理論的研究」日本物理学会秋季大会/2014-09-07-2014-09-10 (2014) 中部大学, 愛知
12. 大野 修平, 苅宿 俊風, 初貝 安弘, 「フォトニック結晶におけるチャーン数とエッジ状態」日本物理学会秋季大会/2014-09-07-2014-09-10 (2014) 中部大学, 愛知
13. 苅宿 俊風, 初貝 安弘, 「量子スピン系におけるベリー位相の分数量子化とバルク・エッジ対応」日本物理学会秋季大会/2014-09-07-2014-09-10 (2014) 中部大学, 愛知
14. 藤田 弦暉, 塩川 太郎, 小鍋 哲, 初貝 安弘, 山本 貴博, 高田 幸宏, 遠藤 哲郎, 村口 正和, 白石 賢二, 「ナノ構造中における電子輸送の理論的研究」日本物理学会秋季大会/2014-09-07-2014-09-10 (2014) 中部大学, 愛知
15. 河原林 透, 初貝 安弘, 青木 秀夫, 「傾いたディラック電子系における $n=0$ ランダウ準位の異常性と staggered ポテンシャル」日本物理学会秋季大会/2014-09-07-2014-09-10 (2014) 中部大学, 愛知
16. 福井 隆裕, 初貝 安弘, 「必ずしもカイラルでない系におけるベリー位相の量子化」日本物理学会秋季大会/2014-09-07-2014-09-10 (2014) 中部大学, 愛知
17. 初貝 安弘, 「BdG 方程式のトポロジカルな構造」日本物理学会秋季大会/2014-09-07-2014-09-10 (2014) 中部大学, 愛知

< 受賞 >

1. 日本物理学会第 20 回 (2015 年度) 論文賞, 2015 年 3 月, 福井 隆裕, 初貝 安弘, 鈴木 博, "Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances, J. Phys. Soc. Jpn. 74, pp. 1674 (2005) ".

< 外部委員等 >

1. 初貝安弘、東北大学特任教授(客員)(国際集積エレクトロニクス研究開発センター)
2. Y. Hatsugai, "Progress of Theoretical and Experimental Physics", Editorial Board

< アウトリーチ >

1. 初貝安弘, 第 35 回 数理の翼 夏季セミナー 講師「対称性の破れからバルク・エッジ対応へ」2014 年 8 月 17 日~8 月 22 日

< 卒業論文 >

1. 荒木広夢:「Kane-Mele 模型のエンタングルメントチャーン数」(物理学類、卒業論文、2015.3)
2. 關澤拓未:「グラフェンでの原子崩壊」(物理学類、卒業論文、2015.3)

< 修士論文 >

1. 大野修平:「フォトニック結晶におけるバルク・エッジ対応」(数理物質科学研究科、物理学専攻、修士論文、2015.3)
2. 關大地:「ナノグラフェン境界の電子状態の理論」(数理物質科学研究科、物理学専攻、修士論文、2015.3)

< 外部資金 >

1. 科学研究費 基盤研究 (A)「トポロジカル相におけるバルク・エッジ対応の物理とその普遍性: 固体物理から冷却原子まで」研究課題番号: 26247064, 総額: 28340 千円 2014 年度: 15600 千円 (直接経費: 12000 千円, 間接経費: 3600 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, 2014 年度: 1430 千円 (直接経費: 1100 千円, 間接経費: 330 千円), (研究代表者: 初貝安弘)
3. 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