量子力学と幾何学の奇妙な関係-トポロジカル物性は役に立つ？

澤端日華瑠 金沢大学大学院自然科学研究科

自己紹介、自分の研究

- 富山県富山市生まれ
- 手品、将棋、バックギャモン、FPS、ニセ科学、政治、宗教
- 興味:チェス、囲碁、ポーカー、強化学習、小説
- 2次元Bi薄膜におけるトポロジカル相転移[1] 、スキルミオン結晶の熱電変換効果、分子性結晶のトポロジカル相転移

物性物理学とは？

「この世のものは全て原子から出来ている」

↔ 「原子の情報だけで全ての物の性質が説明出来る」

原子の情報だけから物質を計算、解析する研究分野

スパコンを使って固体の物性を解析

→ 第一原理計算

- 実験をせずに物質の設計が可能
- 表面や界面など、構造の特定が困難な問題への対処
  → Pauli「固体は神が作ったが、表面は悪魔が作った」

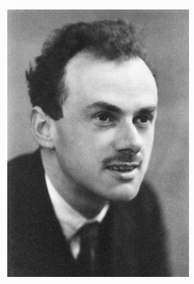
量子力学と電子のバンド構造

物質の性質を解析するには？
→ 電子状態を調べれば良い

電子を支配する方程式、シュレーディンガー方程式を解く(固有値問題)。

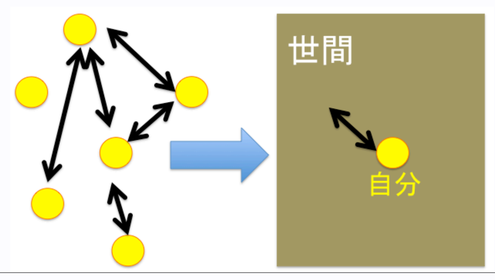
$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2+V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\cdots,\mathbf{r}_N)\right)\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\cdots,\mathbf{r}_N)=E\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\cdots,\mathbf{r}_N)$$

- 系の運動エネルギーを表す部分,微分演算子
- 系の相互作用を表す部分
- 波動関数,未知の部分
  電気分極、磁化、etc.の情報が詰まっている
- 系が取る事を許されるエネルギー、未知
  伝導体か絶縁体かの情報が詰まっている

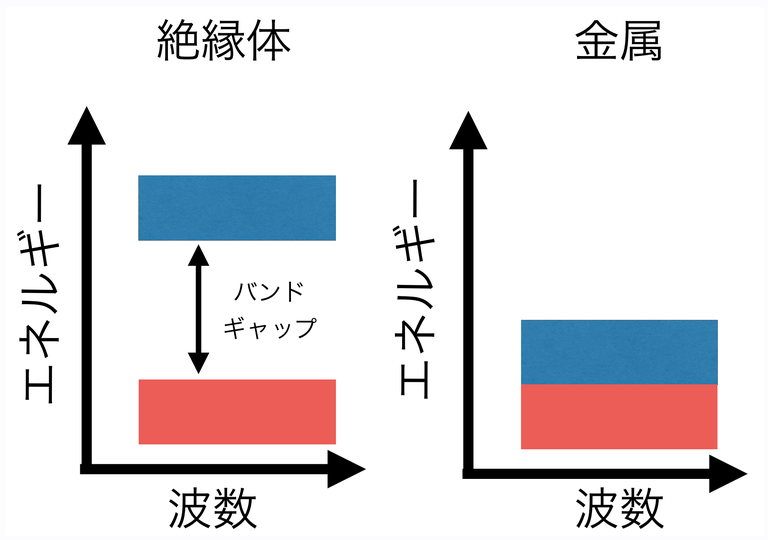


Dirac「物理法則は完全にわかっている、ただし厳密に適用すると複雑すぎて解けない」

そのまま解くのは無理なので、大胆に近似をする
(密度汎関数理論)。



これらの計算からエネルギー固有値が得られる。
→系が取ることが出来る電子のエネルギーがわかる。
→ エネルギーバンドの情報から金属か絶縁体かがわかる。



さて、これらの分類だけで十分か？
エネルギー固有状態、波動関数の情報から更に分類が可能
→トポロジカル物性の世界

量子(異常)ホール効果とChern数

ホール効果→磁場(磁化)による電子の屈折

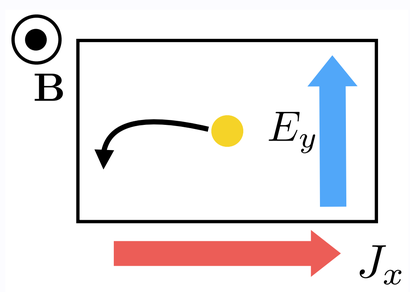
$$\boldsymbol{J}_x=\boldsymbol{\sigma}_{xy}\boldsymbol{E}_y$$

$\boldsymbol{\sigma}_{xy}$:(異常)ホール伝導度

強い磁場化の二次元の電子系 or 磁化された二次元の電子系で

$$\boldsymbol{\sigma}_{xy}=n\frac{\boldsymbol{e}^2}{\boldsymbol{h}}(n=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$

量子化される
→量子(異常)ホール効果[2]



量子異常ホール効果は絶縁体でも起こる
→エッジにHall電流を通す非自明な金属状態が出現
エッジ状態の出現はバルク状態の

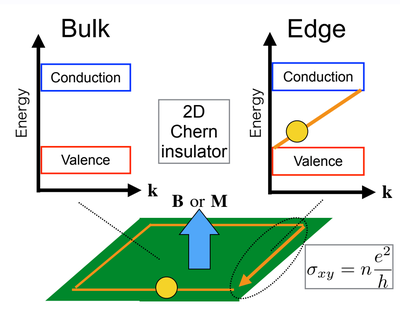
Chern数

$$\boldsymbol{C}=\frac{1}{2\pi}\int_{\mathrm{BZ}}\boldsymbol{F}(\mathbf{k})d\mathbf{k}^2$$

$$\boldsymbol{F}=(\nabla_{\mathbf{k}}\times\mathbf{A})_z,\mathbf{A}=\langle\boldsymbol{u}_{n\mathbf{k}}|\frac{\boldsymbol{\partial}}{\boldsymbol{\partial}\mathbf{k}}|\boldsymbol{u}_{n\mathbf{k}}\rangle$$

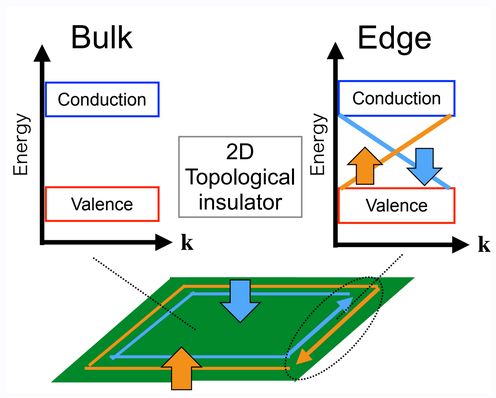
$$\boldsymbol{\sigma}_{xy}=\boldsymbol{C}\frac{\boldsymbol{e}^2}{\boldsymbol{h}}$$

を計算することによって予言出来る。
(Gauss-Bonnetの定理に類似)

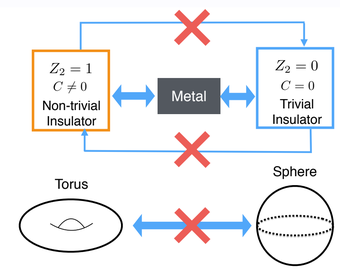


量子スピンホール効果とZ_2不変量

量子ホール効果は
時間反転対称性を破る
→時間反転対称性を保つ量子ホール効果はないか？
量子スピンホール効果[3]
→エッジにスピン流が流れている物質
同様にZ_2不変量を計算することによってエッジ状態の出現を予言出来る。

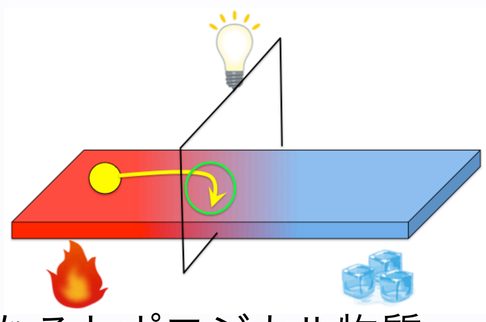


Chern数、Z_2不変量を変化させるには金属状態を経る必要がある。
→トポロジカル不変量

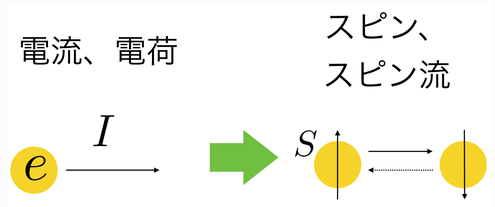


トポロジカル物質が描く未来

量子異常ホール効果
→異常ネルンスト効果
(垂直熱電変換) [4]



量子スピンホール効果
→スピントロニクスデバイス



更なるトポロジカル物質→トポロジカル結晶絶縁体、ワイル半金属、ノーダルライン半金属....etc.

[1] H. Sawahata, N. Yamaguchi, H. Kotaka and F. Ishii, arXiv:1710.04812.
[2] D. J. Thouless et al., Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
[3] L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B **74**, 195312 (2006).
[4] Y. P. Mizuta and F. Ishii, Sci. Reports **6**, 28076 (2016)