

量子力学シミュレーション による

トポロジカル物質の解析

金沢大学大学院自然科学研究科数物科学専攻
GS-GHRコース博士後期課程1年 澤端 日華瑠
指導教員 石井 史之

Outline

量子力学シミュレーション？(5分)

keywords: 物質科学の研究意義、波動関数、
シュレーディンガー方程式

トポロジカル物質？(3分)

keywords: トポロジカル不変量、エッジ状態

量子力学シミュレーション？(5分)

keywords: 物質科学の研究意義、波動関数、
シュレーディンガー方程式

トポロジカル物質？(3分)

keywords: トポロジカル不変量、エッジ状態

量子力学シミュレーションとは(1)

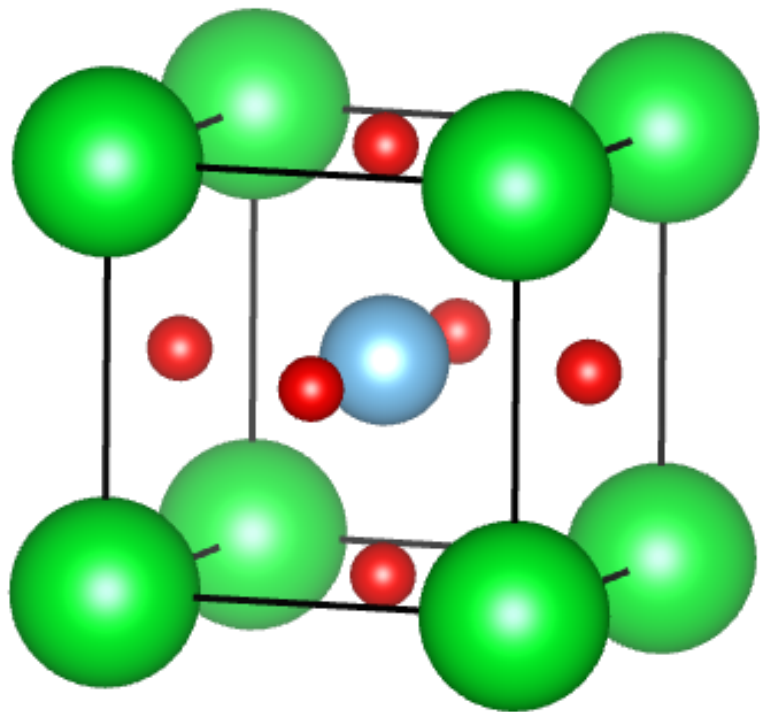
物質は何から出来ているか？

モノの最小単位は？

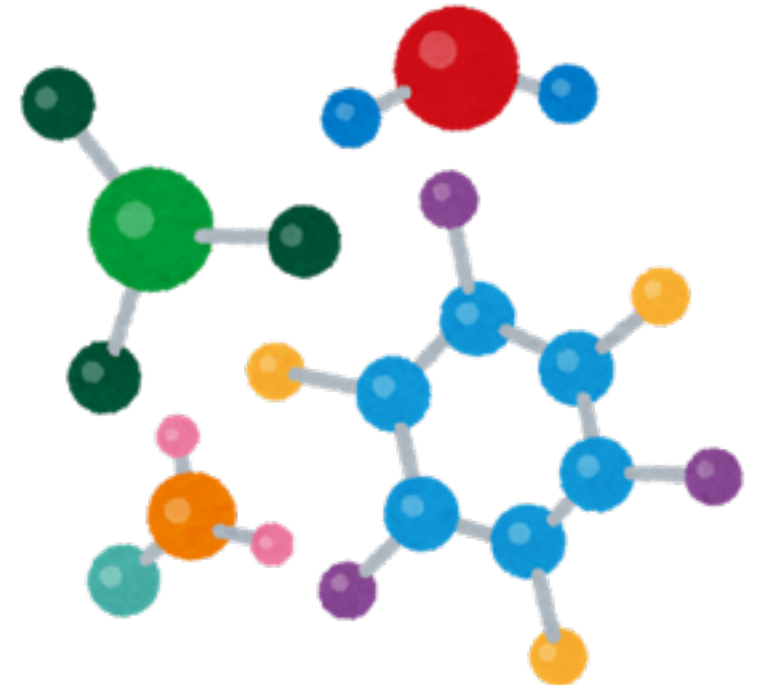
量子力学シミュレーションとは(1)

物質は何から出来ているか？

モノの最小単位は？



原子



量子力学シミュレーションとは(2)

物質は原子から出来ている。

量子力学シミュレーションとは(2)

物質は原子から出来ている。

⇔ 原子の情報だけから全て
物質の性質は説明出来る

量子力学シミュレーションとは(2)

何の原子？ どのような構造？

→電気が通る、通らない、

磁石に付く、付かない、

熱が通り易い、通りにくい

etc...

量子力学シミュレーションとは(3)

原子だけから物質の性質が
予測出来るなら？

- ・ 新しい物質の性質の予言
- ・ 実験で見つかった謎現象の
原因を探れる

量子力学シミュレーションとは(3)

原子だけから物質の性質が
予測出来るなら？

- ・物質設計が実験せずに
可能になる

量子力学シミュレーションとは(3)

原子だけから物質の性質が
予測出来るなら？



量子力学シミュレーションとは(3)

原子だけから物質の性質が
予測出来るなら？

地球に優しい



量子力学シミュレーションとは(4)

原子から物質の性質を予測
するには？

量子力学シミュレーションとは(4)

原子から物質の性質を予測
するには？

→電子の挙動を計算すれば
良い

量子力学シミュレーションとは(5)

電子の挙動を計算する方法



→量子力学



量子力学シミュレーションとは(6)

量子力学とは？



**シュレーディンガー
の猫が有名ですが...**

量子力学シミュレーションとは(6)

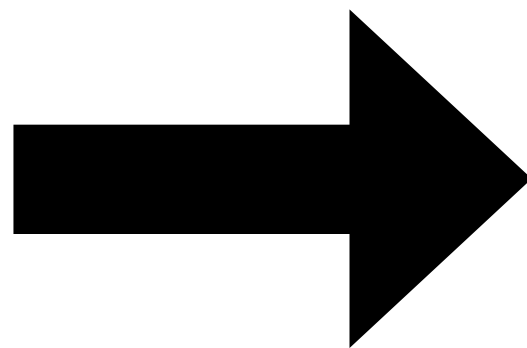
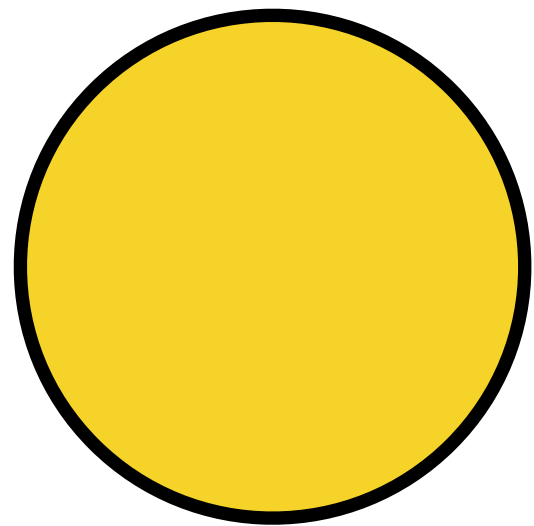
量子力学とは？

→電子の実態は波動関数で
シュレーディンガー方程式
に従う

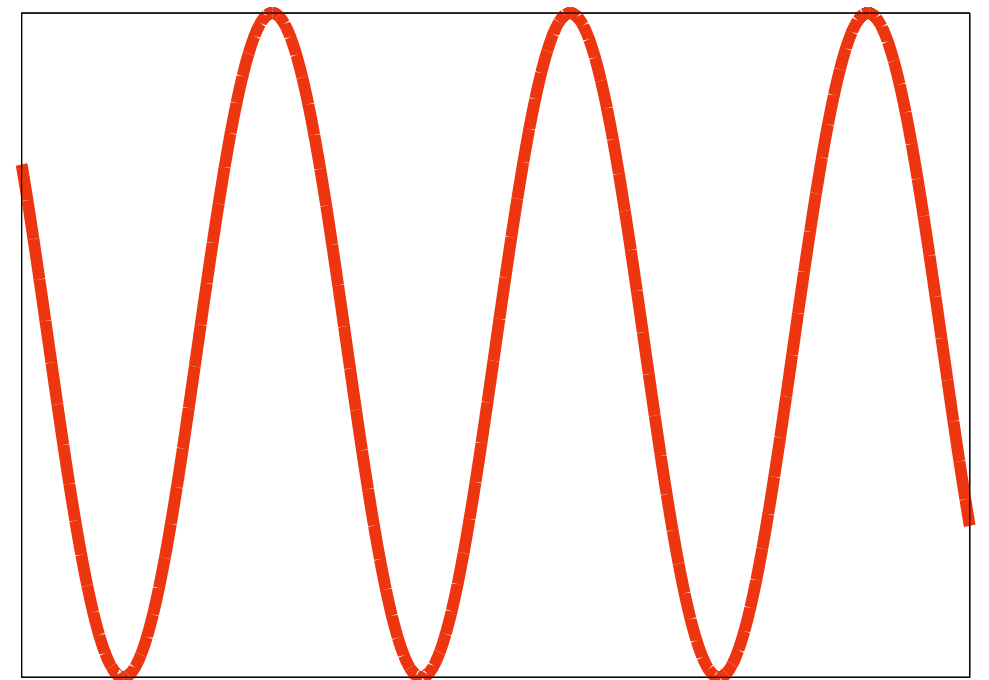
量子力学シミュレーションとは(7)

波動関数とは？

電子



波



【電子 二重スリット実験】で検索

量子力学シミュレーションとは(8)

シュレーディンガー方程式とは？

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi = E \psi$$

電子の波動関数

これを解けば電子状態とエネルギーがわかる

→詳しくはポスター番号6で解説

量子力学シミュレーションとは(9)

方程式の具体的な計算方法は？

(実はそのままでは解けない)

→ポスター番号6へ

量子力学シミュレーションとは？

→ 物質中の電子の波動関数を計算することによって物質の性質を予測する、

究極の物質設計方法

量子力学シミュレーション？(5分)

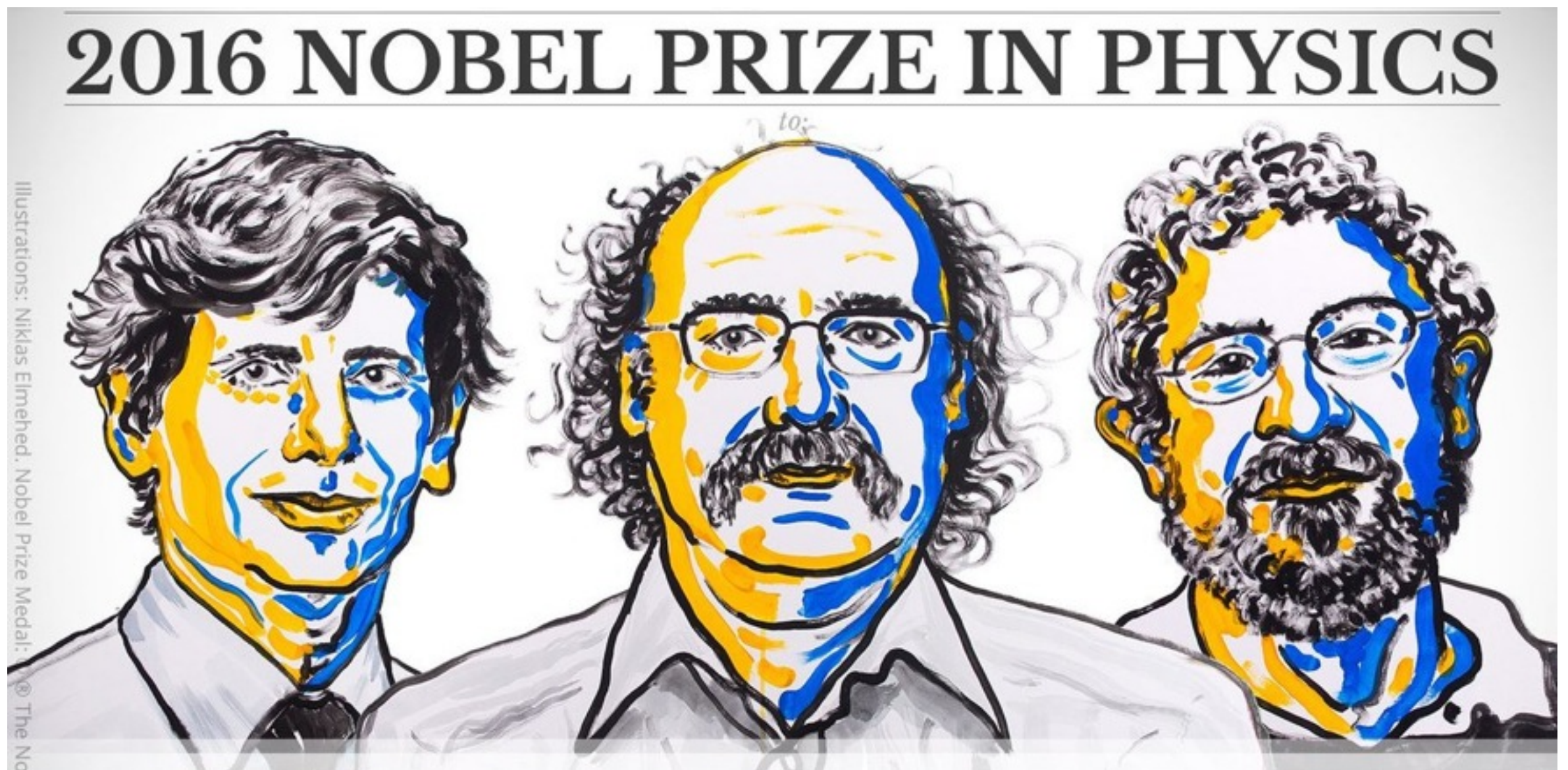
keywords: 物質科学の研究意義、波動関数、
シュレーディンガー方程式

トポロジカル物質？(3分)

keywords: トポロジカル不変量、エッジ状態

トポロジカル物質とは(1)

2016年のノーベル物理学賞



nobelprize.org

トポロジカル物質とは(1)
2016年のノーベル物理学賞

トポロジカル相転移と
物質のトポロジカル相の
理論的発見

トポロジカル物質とは(2)

物質のトポロジカル相とは？

トポロジカル物質とは(2)

物質のトポロジカル相とは？

トポロジカル不変量で

特徴付けられる

通常とは異なる物質の状態

トポロジカル物質とは(2)

物質のトポロジカル相とは？

？

トポロジカル不変量で

？

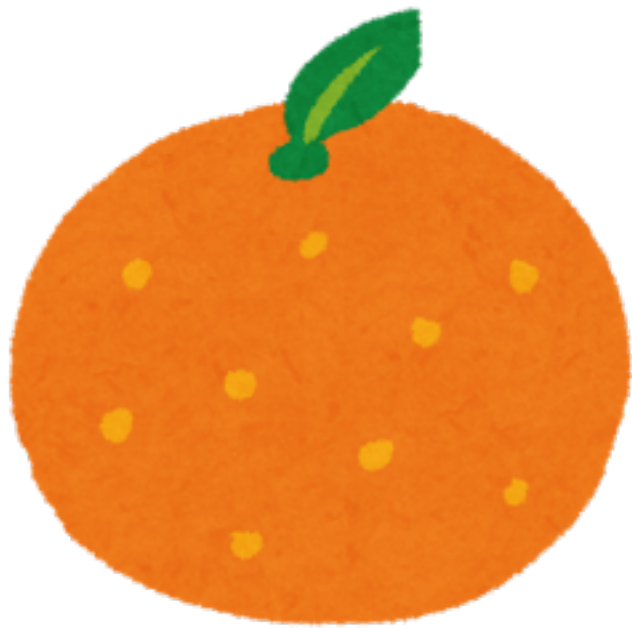
特徴付けられる

常とは異なる物質の状



トポロジカル物質とは(3)

トポロジカル不変量とは？



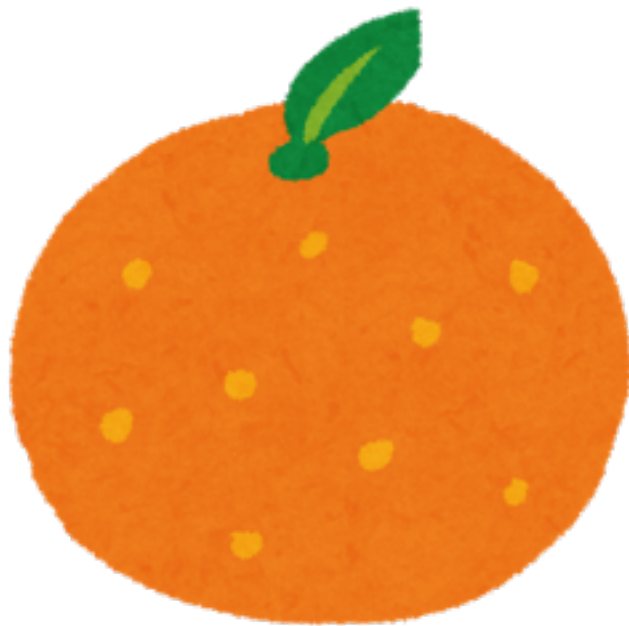
穴の数が0個



穴の数が1個

トポロジカル物質とは(3)

トポロジカル不変量とは？



大域的かつ離散的な特徴量

→物質(電子状態)にも存在

トポロジカル物質とは(4)

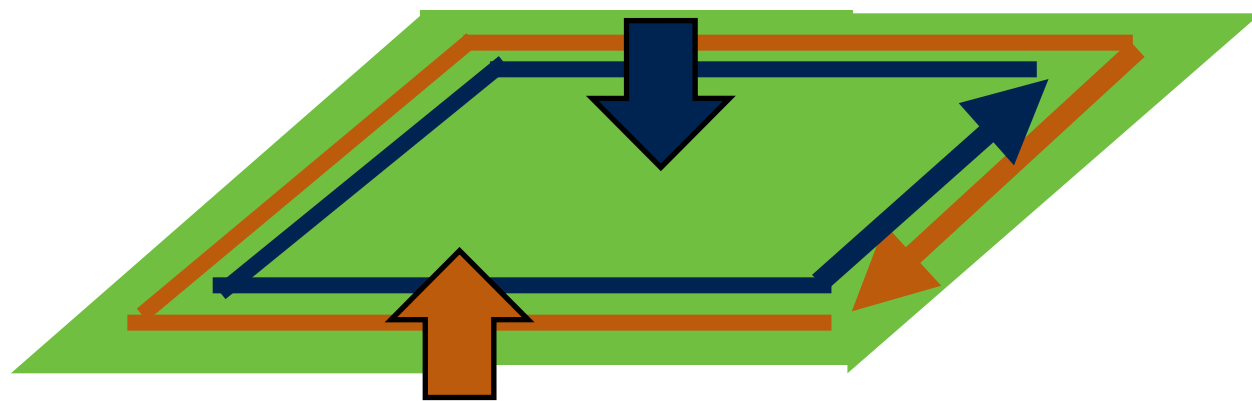
色々なトポロジカル物質

- ・ Chern絶縁体
- ・ Z_2 トポロジカル絶縁体
- ・ 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
- ・ ハイオーダートポロジカル絶縁体
- etc.

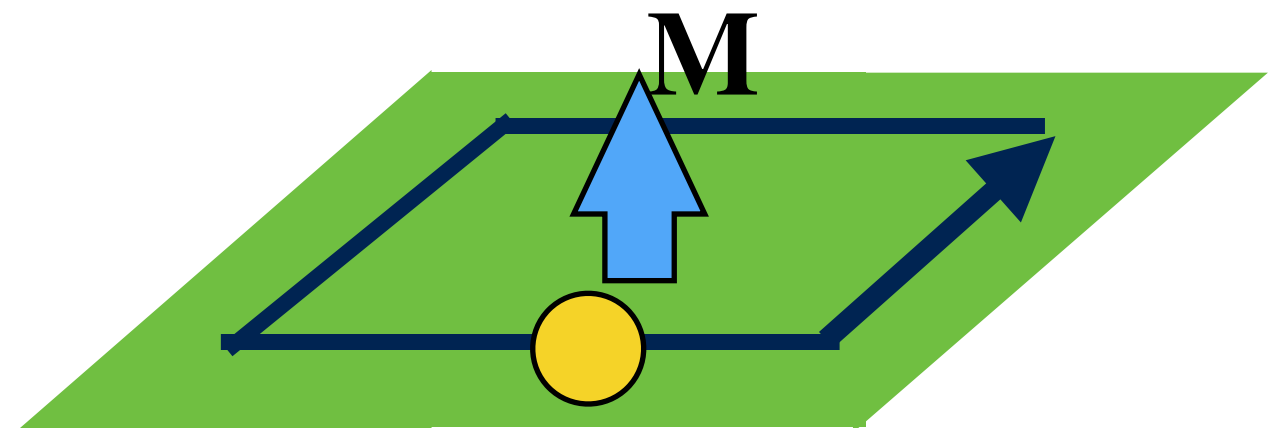
トポロジカル物質とは(5)

トポロジカル絶縁体

Z_2 絶縁体(非磁性)



Chern絶縁体(磁性)



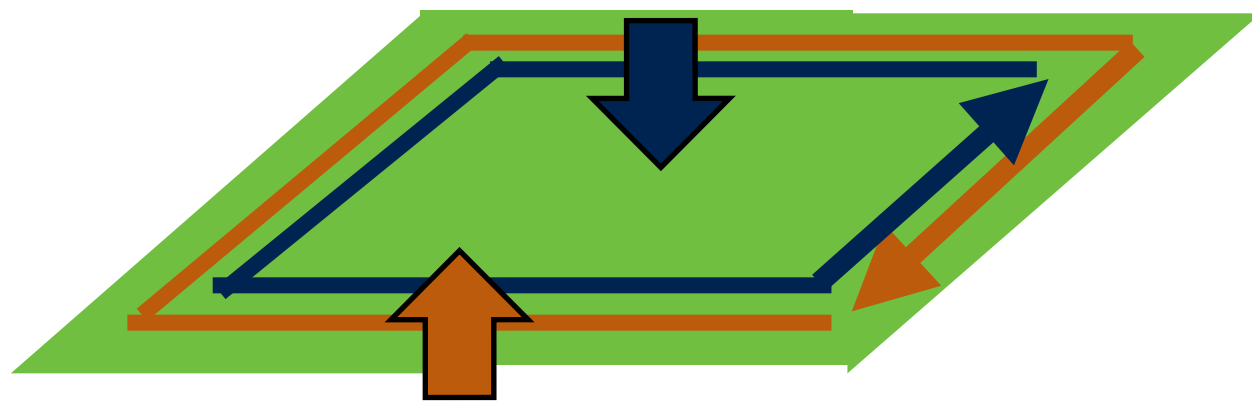
トポロジカル不変量

Z_2 不変量: $Z_2 = 0$ or 1 **Chern数:** $C=0, 1, 2, \dots$

トポロジカル物質とは(5)

トポロジカル絶縁体

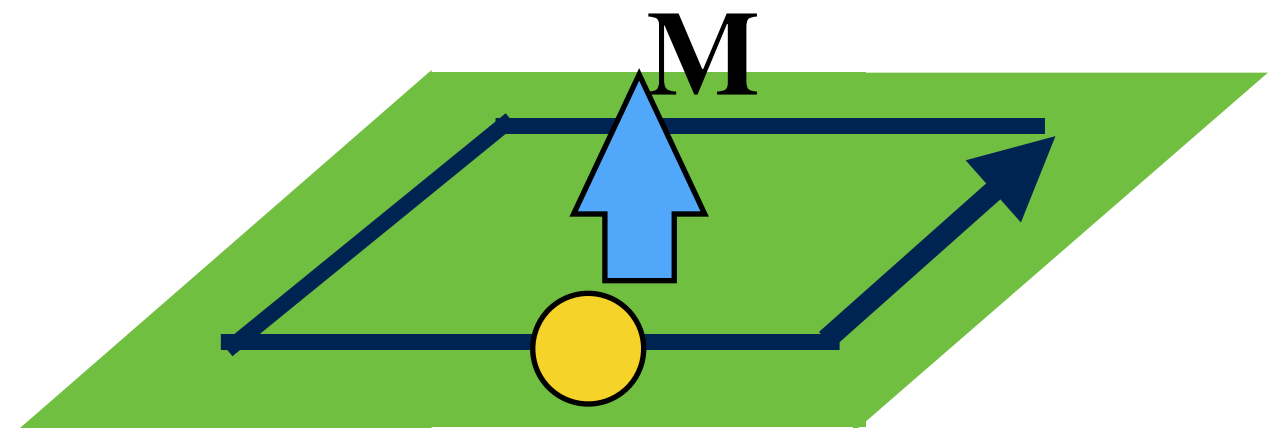
Z_2 絶縁体(非磁性)



Z_2 不変量: $Z_2 = 1$

エッジにスピンの流

Chern絶縁体(磁性)



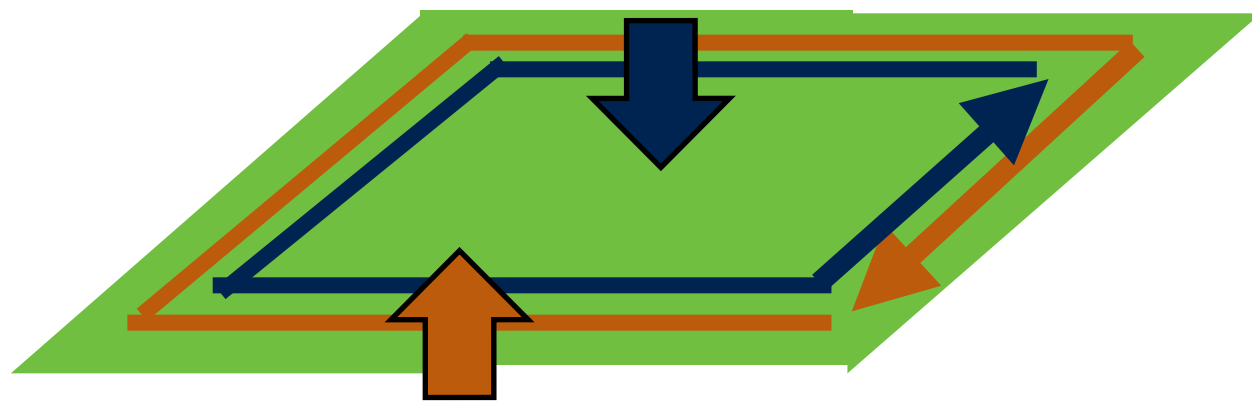
Chern数: $C=1,2,\dots$

エッジにHall電流

トポロジカル物質とは(5)

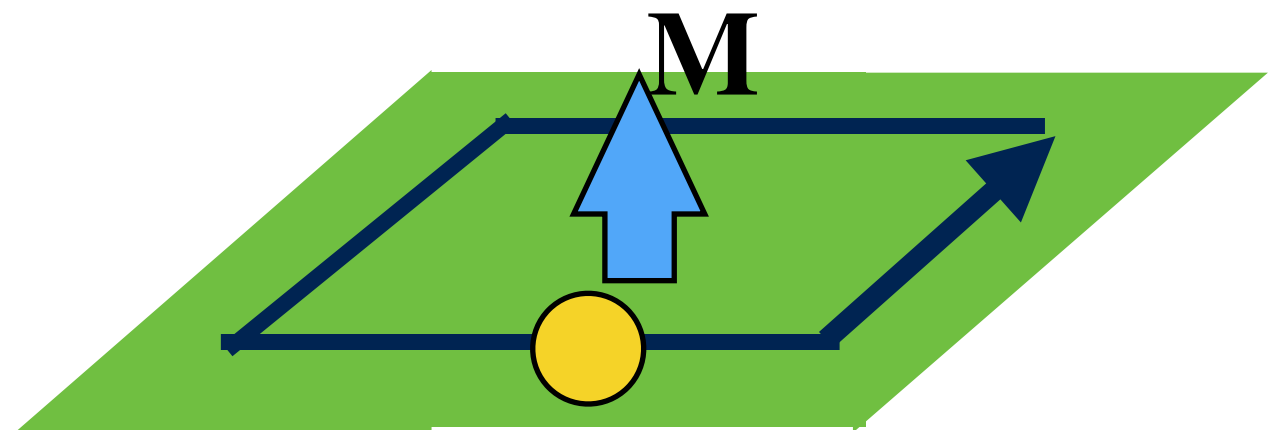
トポロジカル絶縁体

Z_2 絶縁体(非磁性)



Z_2 不変量: $Z_2 = 1$

Chern絶縁体(磁性)



Chern数: $C=1,2,\dots$

絶縁体に**金属エッジ状態**が出現

トポロジカル物質(絶縁体)とは？

→ トポロジカル不変量によって区別される

特殊な物質で、

特異な金属エッジ状態が出現する物質

自分の研究とは

トポロジカル絶縁体の
金属エッジ状態をチューニング
して応用可能性を広げる為の
量子力学シミュレーション
に基づく物質設計

→ポスター番号6へ

まとめ

量子力学シミュレーション

→電子の挙動から物質の性質を予測する
究極の物質設計方法

トポロジカル物質

→応用可能性を秘めた特異な
エッジ状態を持つ物質



論文

1. First-principles study of electric-field-induced topological phase transition in one-bilayer Bi(1 1 1)
Hikaru Sawahata, Naoya Yamaguchi, Hiroki Kotaka and Fumiyuki Ishii,
Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 030309(2018).
2. Large Anomalous Nernst Coefficient in a Doped Skyrmion Crystal Chern Insulator
Yo Pierre Mizuta, Hikaru Sawahata and Fumiyuki Ishii,
Phys. Rev. B **98**, 205125 (2018).
3. Electric field dependence of topological edge states in one-bilayer Bi(1 1 1):
A first-principles study
Hikaru Sawahata, Naoya Yamaguchi, Hiroki Kotaka and Fumiyuki Ishii,
e-J. Surf. Sci. Nanotech., in press.