

令和 5 年 6 月 5 日現在

機関番号：17102

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2022

課題番号：17K17604

研究課題名（和文）重力場の理論を用いたトポロジカル熱応答現象の解明

研究課題名（英文）Gravitational field theory for topological thermal transport phenomena

研究代表者

仲井 良太 (Nakai, Ryota)

九州大学・理学研究院・特任助教

研究者番号：30638987

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：固体物質中で主に電子が運ぶ熱伝導の理論を量子力学的な観点から調べた。その結果、熱伝導現象と時空変換の関係を利用することで固体物質の熱の流れやすさを計算する新しい公式を導いた。この公式は波動関数の境界条件という量子力学的な性質と熱の流れやすさを結びつける公式であり、電流の流れやすさの場合にはコーンの公式として知られていたものを熱伝導に拡張した結果である。また熱の流れやすさが向きによって異なる非相反熱応答の理論を調べた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

固体物質の熱伝導現象の中でも近年特に量子力学的性質が強く現れる現象が実験物理の分野でも重要になりつつある。本研究で導入された公式は広く一般の量子系に適用可能であるため、熱伝導現象の量子力学的側面の理解が深まることが期待される。また非相反熱応答現象は別の言葉で言うと順方向と逆方向で熱の流れやすさが異なるという整流効果である。電気伝導の整流効果を利用したダイオードやトランジスタのように熱の非相反性の強い物質が開発されれば、固体物質中の熱を自在に操ることができ、排熱の有効利用などの熱に関する問題の解決手段となることが期待される。

研究成果の概要（英文）：Thermal transport theory of electrons from the viewpoint of quantum mechanics was studied. A new formula for estimating the thermal conductivity was found by exploiting the relationship between thermal conduction and coordinate transformations. This formula links the quantum mechanical property of the boundary conditions of the wavefunction and the thermal conductivity. A similar formula for the electrical conduction has been known as the Kohn's formula, and hence our formula can be viewed as the thermal version of the Kohn's formula. The theory of nonreciprocity of the thermal and thermoelectric conduction was also studied.

研究分野：物性理論

キーワード：熱伝導 重力場 非相反応答

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

多数の自由度が相互作用するマクロな系が示す物質相はこれまで対称性の自発的破れによって特徴付けられていたが、その枠組みから外れて電子状態のトポロジーによって特徴づけられる新しい物質相がトポロジカル相として大きな注目を集めている。トポロジカル相では、量子ホール効果やトポロジカル電気磁気効果などのトポロジーに由来する特徴的な応答が観測される。これらのトポロジカルな電磁応答は、トポロジカルな場の理論であるチャーンサイモンズ項やシータ項と直接的に関係している。これは別の見方をするとトポロジカル相とトポロジカルな場の理論との対応関係を意味する。

一方でトポロジカル超伝導体やスピン液体相などの電荷を持たない励起を示すトポロジカル相においては、熱応答においてトポロジーに由来する特徴が現れる。この熱応答に対しては、熱応答を駆動する温度勾配が有効的に重力場で表現できること、そしてこれらのトポロジカル相が重力量子異常を示すことなどから、重力場のトポロジカルな場の理論との対応関係が長らく予測されていたが、このナイーブな予測は必ずしも正しくないことを示す証拠が示されつつあった。ではトポロジカル超伝導体と対応した正しい場の理論は何なのかという問題に対してはコンセンサスが得られていなかった。

2. 研究の目的

トポロジカルな熱応答現象を示すトポロジカル相とトポロジカルな重力場の理論の対応関係を解明するために、固体物質中で観測される熱応答現象を量子力学の枠組みでミクロな観点から明らかにすることが一つの目的である。それに加えて、熱応答と時空の対称性の関係を解明することにより、トポロジカルな熱応答現象以外にも熱電変換や熱スピン変換などの熱に関わる固体物性をより基礎的な立場から理解することを目的として研究を行なった。

3. 研究の方法

(1) 電子系の電気伝導性を表す物理量のひとつにドルーデ重みがあり、これがゼロか非ゼロかによって絶縁体と金属が判別できる。ドルーデ重みは交流電気伝導度の周波数ゼロでの特異性として定義されるが、それとは異なる計算方法として Kohn の公式

$$\bar{D} = \frac{L}{2} \frac{\partial^2 E_0(\theta)}{\partial \theta^2}$$

が知られている。これは波動関数の境界条件を位相でツイストした時の電子系の剛性がドルーデ重みと一致するという公式であり、波動関数の境界条件という量子力学的な性質と電気伝導の関係を表している。この Kohn の公式の熱応答版によって熱伝導度を導く量子力学的な境界条件を考えた。

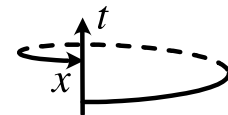
(2) 結晶構造の空間反転対称性の破れに起因する熱の整流効果(非相反性)を調べるために、準古典理論を用いた解析を行なった。外場に関して摂動展開すると、非相反性は外場の向きによらない応答であるため外場の偶数次の項に現れる。そこで温度勾配と電場を摂動として最も大きな寄与を持つ2次の項までを求め、応答係数間の関係および対称性との関係を調べた。また具体的な物質系での応答を評価するため、空間反転対称性の敗れた結晶構造を持つ、遷移金属ダイカルコゲナイドと極性半導体である BiTeI に対して有効模型を用いた評価を行なった。

4. 研究成果

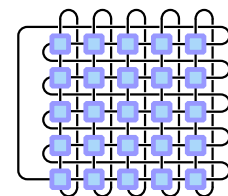
(1) 熱応答に対応した Kohn の公式を導く境界条件として、波動関数の境界を時間並進によってツイストした境界条件(エネルギーツイストと呼ぶ)を導入し、それに対する剛性が熱ドルーデ重みであることを示した。

この新しい境界条件のもとで固有エネルギーを計算すれば熱ドルーデ重みが評価できるが、その計算は位相ツイストと比べて複雑になる。これは時間並進の生成子がエネルギー(ハミルトニアン)であるが、逆にハミルトニアンは境界条件を定めてはじめて定義されるためである。つまりハミルトニアンと境界条件が互いに依存し合う関係であるため、コンシステントになるように互いを定める必要がある。この問題を回避するために転送行列を使って d+1 次元時空上のテンソルネットワークでエネルギーツイストを課す方法を考え、自由フェルミオン模型と横磁場イジング模型で熱ドルーデ重みを評価した。

またエネルギーツイスト境界条件と等価なバルク変換がブースト変形であることを明らかにした。ブースト変形は可積分

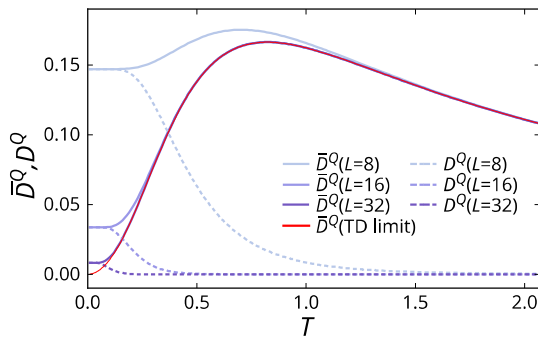


$\psi(t, L) = \psi(t + \Delta t, 0)$
エネルギーツイスト境界条件

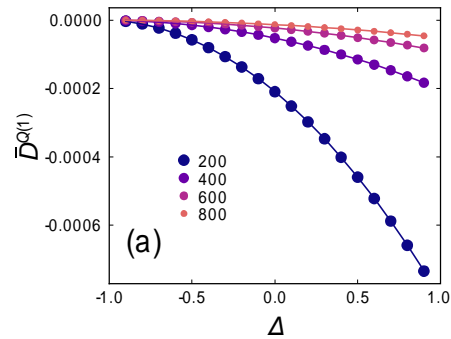


テンソルネットワークによる表現

模型の文脈で研究されており、可積分性を保つ変換の一つとして知られている。ブースト変形を使った熱ドルーデ重みの計算方法を考案し、自由フェルミオン模型(下図)とXXZ スピン鎖に対して熱ドルーデ重みを評価した。さらに XXZ スピン鎖に対しては高次の熱ドルーデ重みも評価し、電気的な高次のドルーデ重みで知られていた発散が現れないことを示した。



自由フェルミオン系の熱ドルーデ重みの温度依存性



XXZ 模型の熱ドルーデ重み

(2) 熱応答および熱電応答における非相反性を、準古典理論を使って外場の2次まで解析した結果、(i)異なる種類の応答係数間に関係式が成り立つこと、および(ii)2次の応答係数では熱および熱電係数が絶対0度でもゼロにならないことを見つけた。

まず(i)に関して、電流と熱流の1次の応答には応答係数の間に Wiedemann-Franz 則と Mott 関係式と呼ばれる関係が成り立つが、2次の応答を考えた場合にも応答係数の間にいくつかの関係式が成り立つことを示した。下の式は電流と熱流を電場と温度勾配の1次と2次まで求めた場合の応答係数とその関係を示したものである。

$$\begin{pmatrix} j \\ jT \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{111} & L_{112} \\ L_{211} & L_{222} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ -\nabla T/T \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} L_{111} & L_{122} \\ L_{211} & L_{222} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} \\ \nabla T \otimes \nabla T/T^2 \end{pmatrix}$$

↔ 比例関係 (Wiedemann-Franz則など)

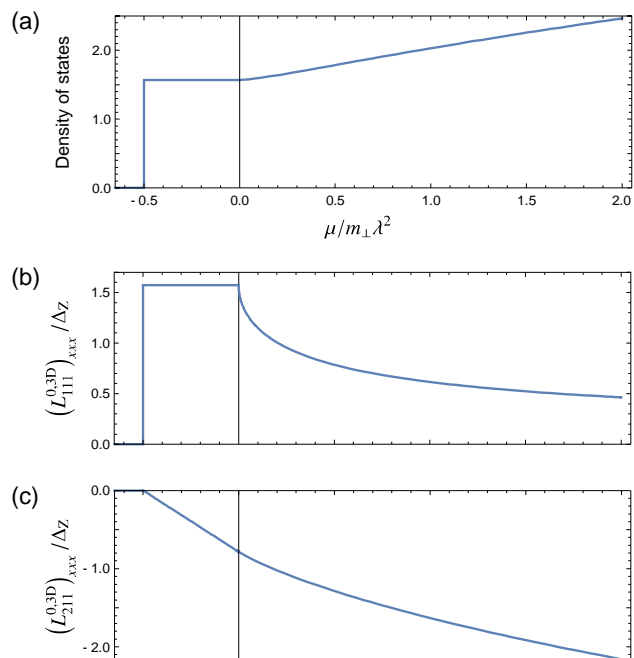
↔ 微分との関係 (Mott関係式など)

※赤字が本研究結果

ここで得られた関係式によって、2次の応答係数も全てが独立というわけではなく、いくつかの共通する関数を使ってすべての応答係数を表現できるということがわかる。特に2次応答の場合にはベリー曲率双極子とよばれるベリー位相の高次モーメントが共通する関数の一つであることを示した。

また(ii)に関して、一般に熱輸送は絶対0度でゼロになるはずであるが、2次の熱・熱電応答係数は絶対0度でも有限になることが明らかになった。その理由としては、たとえば電場の2次に比例する熱流を考えると、それは自らが作り出したジュール熱(電場の1次に比例)が電場によって輸送される(こちら電場の1次に比例)という2つのプロセスの組み合わせとなっている。すでに存在する熱を輸送しているわけではないということから絶対0度でも熱流が流れることが説明できる。

このような2次の熱電応答係数を遷移金属ダイカルコゲナイドと極性半導体のBiTeIで評価し(右図)非相反性が観測可能であることを示した。



BiTeI の2次の非線形電気および熱伝導度

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Nakai Ryota, Guo Taozhi, Ryu Shinsei	4. 巻 106
2. 論文標題 Energy-twisted boundary condition and response in one-dimensional quantum many-body systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155128-1
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.106.155128	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Ohashi Ryoi, Nakai Ryota, Yokoyama Takehito, Tanaka Yukio, Nomura Kentaro	4. 巻 91
2. 論文標題 Andreev-like Reflection in the Pfaffian Fractional Quantum Hall Effect	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 123703-1
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.91.123703	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Nakai Ryota, Nomura Kentaro, Tanaka Yukio	4. 巻 103
2. 論文標題 Edge-induced pairing states in a Josephson junction through a spin-polarized quantum anomalous Hall insulator	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 184509
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.103.184509	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Misawa Takahiro, Nakai Ryota, Nomura Kentaro	4. 巻 100
2. 論文標題 Real-time evolution and quantized charge pumping in magnetic Weyl semimetals	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155123
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.100.155123	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakai Ryota, Nomura Kentaro	4. 巻 101
2. 論文標題 Weyl superconductor phases in a Weyl-semimetal/superconductor multilayer	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 94510
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.094510	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakai Ryota, Nagaosa Naoto	4. 巻 99
2. 論文標題 Nonreciprocal thermal and thermoelectric transport of electrons in noncentrosymmetric crystals	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.115201	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計17件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 9件)

1. 発表者名 R. Nakai, T. Guo, S. Ryu, K. Nomura
2. 発表標題 Twisted Boundary Condition and Thermal Response in One-Dimensional Quantum Systems
3. 学会等名 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 仲井良太
2. 発表標題 超伝導接合系におけるトポロジカル超伝導相とエニオン
3. 学会等名 物性研短期研究会「固体におけるエニオンと分数統計粒子研究の最前線」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 R. Nakai, K. Nomura, Y. Tanaka
2. 発表標題 Edge-Induced Pairing States of the Josephson Current in a Spin-Polarized Quantum Anomalous Hall Insulator
3. 学会等名 APS March Meeting 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 T. Guo, R. Nakai, K. Kawabata, S. Ryu
2. 発表標題 Imaginary boost deformation of integrable models
3. 学会等名 APS March Meeting 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 仲井良太, 野村健太郎
2. 発表標題 3次元多層系における高次トポロジカル超伝導相
3. 学会等名 日本物理学会(2023春季大会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 仲井良太、野村健太郎、田仲由喜夫
2. 発表標題 スピン偏極した量子異常ホール系におけるジョセフソン電流のペア対称性
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Taozhi Guo、Ryota Nakai、Shinsei Ryu
2. 発表標題 Energy twisted boundary condition
3. 学会等名 APS March Meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 仲井良太、Taozhi Guo、笠真生、野村健太郎
2. 発表標題 1次元量子系における境界条件としてのブーストと熱伝導係数
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大橋良伊、野村健太郎、横山毅人、仲井良太、田仲由喜夫
2. 発表標題 パフィアン状態分数量子ホール効果におけるアンドレーエフ的反射の理論
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryota Nakai、Kentaro Nomura
2. 発表標題 Weyl-superconductor phases in the multilayer model of Weyl semimetals and superconductors
3. 学会等名 International Conference on Topological Materials Science 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 仲井良太、野村健太郎
2. 発表標題 ワイル半金属と超伝導体の超格子模型におけるワイル超伝導体相
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 仲井良太、永長直人
2. 発表標題 空間反転対称性の破れた物質における電子系の非相反熱応答
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 R. Nakai, N. Nagaosa
2. 発表標題 Nonreciprocity in Thermal and Thermoelectric Transport of Electrons in Noncentrosymmetric Crystals
3. 学会等名 APS March Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Nakai, S. Ryu, and K. Nomura
2. 発表標題 Gauge-invariance argument for the quantization of the thermal Hall conductivity
3. 学会等名 28th International Conference on Low Temperature Physics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 仲井良太, 笠真生, 野村健太郎
2. 発表標題 量子化された熱ホール効果におけるゲージ不変性
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 R. Nakai, S. Ryu, and K. Nomura
2. 発表標題 Gauge invariance in quantized thermal transport phenomena
3. 学会等名 Novel Quantum States in Condensed Matter 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 R. Nakai, S. Ryu. and K. Nomura
2. 発表標題 Quantization of the heat polarization in twisted spacetime
3. 学会等名 APS March Meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
米国	プリンストン大学			