

令和 3 年 4 月 27 日現在

機関番号：15401

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2018～2020

課題番号：18K03460

研究課題名（和文）トポロジカル物質に対するディラック方程式の発展的適用

研究課題名（英文）Modified Dirac equation approach to topological systems

研究代表者

高根 美武（Takane, Yositake）

広島大学・先進理工系科学研究科（先）・教授

研究者番号：40254388

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,400,000円

研究成果の概要（和文）：ワイル半金属に補助方程式の方法（ワイル方程式と補助方程式を併用する方法）を適用し、2次元のカイラル表面状態や螺旋転位の周囲に現れる1次元のカイラル状態を含む準粒子状態を求めることに成功した。さらに永久電流の解析的な表式を導出し、得られた結果が数値計算結果と定量的に一致することを示した。これらの研究を通して、ワイル半金属のカイラル状態が示す特徴を明らかにした。

当初予定していなかった課題として、非エルミートなディラック系におけるバルク境界対応を記述する理論を定式化した。その他、ディラック系の電磁応答を記述する方法や2次トポロジカル絶縁体の角状態を数値的に求める方法を定式化した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ワイル半金属のバルクな電子状態はワイル方程式（質量ゼロのディラック方程式）によって記述され、波数空間において円錐状のエネルギー分散を示す。しかしこの物質の顕著な特徴と見なされる、表面に局在した2次元のカイラル状態や螺旋転位に沿って現れる1次元のカイラル状態はワイル方程式によって記述できない。本研究では、ワイル方程式から零れ落ちた情報を補助方程式によって補えば、これらのカイラル状態を適切に記述できることを示し、ワイル方程式だけでは不十分な理由を明らかにした。

ワイル半金属はワイル方程式によって記述できると理解されている。本研究はこの広く定着した理解が孕む本質的な問題を明らかにしたものである。

研究成果の概要（英文）：We show that quasiparticle states in a Weyl semimetal, including two-dimensional chiral surface states as well as one-dimensional chiral states along a screw dislocation, can be described by combining the Weyl equation with a supplemental equation that is derived in this study. By using the resulting quasiparticle states, we obtain an analytical expression of a persistent current, which is qualitatively consistent with the result of numerical simulations. We elucidate characteristic features of the chiral states in a Weyl semimetal.

As an unexpected by-product, we give a theoretical framework to describe bulk-boundary correspondence in non-Hermitian Dirac systems. In additions, we formulate a theoretical method to describe the electromagnetic response of a Weyl semimetal and a numerical method to determine the wavefunction of corner states in a second-order topological insulator.

研究分野：物性理論

キーワード：ワイル半金属

## 1. 研究開始当初の背景

代表的なトポロジカル物質であるワイル半金属において、系全体に広がるバルクな電子状態はワイル方程式(質量ゼロのディラック方程式)に従う。しかし、ワイル半金属の顕著な特徴の一つである2次元のカイラル表面状態はワイル方程式では記述できない。螺旋転位に沿って現われる1次元のカイラル状態も同様である。ワイル方程式によって記述されるが故にワイル半金属と呼ばれるにもかかわらず、ワイル方程式だけでは電子状態を適切に記述できないのである。ワイル方程式は微視的モデルを縮約して導かれるが、この事実はその過程で重要な情報が部分的に消失してしまうことを示唆する。

## 2. 研究の目的

本研究の目的は、ワイル方程式を導く過程で消失した情報を補助的な方程式で補完する独自の方法を提案し、その有用性を示すことである。補助方程式の方法はバルクなワイル状態に加えてカイラル表面状態を含む全ての電子状態を統一かつ簡便に記述することを可能にする。これを用いて、これまで解析が困難であったワイル半金属の電子状態に関する問題を解決する。また補助方程式の導出過程を検討し、ワイル方程式だけではカイラル状態を記述できない原因を明らかにする。

## 3. 研究の方法

ワイル半金属に対する微視的な格子模型からワイル方程式を導出する過程を再検討し、その過程で消失した情報を汲み取る補助方程式を導出する。ワイル方程式と得られた補助方程式を連立方程式として円柱状のワイル半金属に適用し、バルク状態とカイラル表面状態に対応する固有状態を求める。また、円柱の中心に螺旋転位が存在する場合に注目し、転位線に沿った1次元のカイラル状態に対応する固有状態を導出する。またこれらの結果を用いて、ゼロ磁場下においてカイラル状態によって引き起こされる永久電流の解析的な表式を導く。相補的な計算として、格子模型を用いて準粒子固有状態を数値的に決定し、その結果に基づいて永久電流を数値的に評価する。この数値計算結果と解析的な表式との比較を通して、補助方程式を用いる方法の有効性を検証する。

## 4. 研究成果

2018年度(初年度)において補助方程式を用いる方法の有効性を確認した。具体的には、有限サイズのワイル半金属に補助方程式の方法を適用して準粒子固有状態を求め、その結果に基づいて永久電流の解析的な表式を導出した。得られた表式は格子モデルに基づく数値計算結果と定量的に一致することを確認したうえで、論文として発表した。螺旋転位を含むワイル半金属に対しても同様な計算を実行し、補助方程式の方法による解析的な結果と数値計算結果が定量的に一致することを明らかにした。この結果については2019年度に論文として発表した。これらの

計算を通して、カイラル表面状態や螺旋転位の周囲に現れる1次元のカイラル状態の性質を明らかにすることができた。これらの解析は従来の単純なワイル方程式の枠内では不可能であり、補助方程式を用いる方法の有効性を如実に示す成果と言える。なお、ワイル方程式だけではカイラル状態を記述できない原因は、エネルギーに強く依存しないエバネッセント解の存在にあることが分かった。このような解は微視的なモデルでは存在するが、ワイル方程式では許容されないものである。補助方程式はこのエバネッセント解を記述する方程式と見なすこともできる。

さらに、ワイル半金属の異常な電気磁気応答を適切に記述できる、連続極限の正則化したワイルモデルを提案し、論文として発表した。この提案を通して、従来の単純なワイルモデルの問題点を明らかにした。ここまでの成果について、和文の解説一編を発表した。関連して、連続極限のディラックモデルにおいて発現する本質的な困難に関連する研究を行った。従来の単純なディラックモデルを用いてベクトルポテンシャルに対する電流応答を計算すると、ゲージ不変性を破る非物理的な結果が生じてしまう。この原因を明らかにし、正しい結果を導く簡便なエネルギー切断の方法を与えた（論文として発表済）。

予定していた主たる課題は2019年度中盤までに達成できたので、以降は発展性のある新しい課題に取り組んだ。一つ目は2次元正方格子上の2次トポロジカル絶縁体の角状態に関する研究である。90度と270度の複数の角によって構成される入り組んだ境界端をもつ2次トポロジカル絶縁体の角状態の波動関数を数値的に求める方法を定式化し、幾つかの場合について波動関数を具体的に求めた。この結果を一編の論文として発表した。二つ目は非エルミートなトポロジカル絶縁体におけるバルク境界対応に関する研究である。従来、「境界の無いバルク系におけるトポロジカル数」と「境界のある系における境界状態の出現」が一対一で対応することが知られていたが、非エルミート系ではこの対応関係が破れてしまう。このバルク境界対応の破れを回復する処方箋を提案した。この処方箋を非エルミートな1次元Su-Schrieffer-Heeger (SSH) モデルに適用し、その有効性を確認したうえで一編の論文として発表した。

2020年度（最終年度）は、主として非エルミートなトポロジカル系におけるバルク境界対応の理論的記述に取り組んだ。前年度に発表した処方箋をさらに発展させ、数学的に精密な理論として定式化した。また、その処方箋を非エルミートな2次元チャーン絶縁体に適用し、バルク境界対応を適切に記述できることを示した。2次元の非エルミート系において精密なバルク境界対応を示した最初の例と見なすことができる。加えて、2次元ディラック電子系における直流ジョセフソン電流の一般的な公式を導出した。これは従来知られていた二つの近似表式を包括する一般的な公式であり、実験結果の解釈に広く利用できると期待される。

最終年度において重点的に研究を進めた非エルミートなトポロジカル系におけるバルク境界対応に関しては、今後の大きな発展が期待できると考えている。提案した処方箋に基づいて非エルミート系におけるバルク境界対応の成功例を増やしつつ、新しい展開を模索したい。短期的には、非エルミートなSSHモデルやチャーン絶縁体モデルとは対称性の異なる系への適用を追求したい。一例として、非エルミートなKitaev鎖モデル（1次元p波超伝導体）におけるバルク境界対応に関する検討を開始した。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Takane Yositate	4. 巻 90
2. 論文標題 Bulk-Boundary Correspondence in a Non-Hermitian Chern Insulator	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 033704 ~ 033704
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.033704	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 Imura Ken-Ichiro, Takane Yositate	4. 巻 2020
2. 論文標題 Generalized Bloch band theory for non-Hermitian bulk-boundary correspondence	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Progress of Theoretical and Experimental Physics	6. 最初と最後の頁 12A103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/ptep/ptaa100	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Takane Yositate	4. 巻 89
2. 論文標題 Unified Formula for Stationary Josephson Current in Planar Graphene Junctions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 094702 ~ 094702
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.094702	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 Kodama Kentaro, Takane Yositate	4. 巻 88
2. 論文標題 Persistent Current due to a Screw Dislocation in Weyl Semimetals: Role of One-Dimensional Chiral States	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 054715 ~ 054715
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.054715	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 Takane Yositate	4. 巻 88
2. 論文標題 Zero-Energy State Localized near an Arbitrary Edge in Quadrupole Topological Insulators	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 094712 ~ 094712
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.094712	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 Imura Ken-Ichiro, Takane Yositate	4. 巻 100
2. 論文標題 Generalized bulk-edge correspondence for non-Hermitian topological systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 165430 ~ 165430
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.165430	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 高根美武	4. 巻 54
2. 論文標題 螺旋転位が引き起こす永久電流 ワイル半金属のカイラル性とその発現	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 767 ~ 774
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 Takane Yositate	4. 巻 87
2. 論文標題 Spontaneous Charge Current in a Doped Weyl Semimetal	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 074706 ~ 074706
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.074706	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 Takane Yositate	4. 巻 88
2. 論文標題 Regularized Continuum Model of a Weyl Semimetal for Describing Anomalous Electromagnetic Response	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 014703 ~ 014703
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.014703	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 Takane Yositate	4. 巻 88
2. 論文標題 Gauge-Invariant Cutoff for Dirac Electron Systems with a Vector Potential	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 034702 ~ 034702
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.034702	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7件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 高根美武
2. 発表標題 非エルミートなチャーン絶縁体におけるバルク-境界対応
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高根美武
2. 発表標題 グラフェン平面接合におけるジョセフソン電流
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 高根美武
2. 発表標題 入り組んだ端構造をもつ四極子トポロジカル絶縁体のゼロ・エネルギー状態
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yositake Takane
2. 発表標題 Persistent current due to a screw dislocation in Weyl semimetals
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 高根美武
2. 発表標題 螺旋転位を含むワイル半金属における永久電流
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 高根美武
2. 発表標題 ワイル半金属の風変わりな電気磁気応答と連続極限モデル
3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高根美武
2. 発表標題 ディラック電子系に対するゲージ不変なエネルギー切断
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019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