

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 6 日現在

機関番号：32661

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K03660

研究課題名(和文) 二次元トポロジカル状態に伴う非整数電荷励起の普遍性

研究課題名(英文) Robustness of irrational charges in two-dimensional topological systems

研究代表者

河原林 透 (KAWARABAYASHI, Tohru)

東邦大学・理学部・教授

研究者番号：90251488

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、2次元系ディラック粒子系において、トポロジカル欠陥(渦構造)に付随する非整数電荷の値を精密な数値計算により正確に評価し、ランダムネスの効果やディラック・コーンの傾きに対する普遍性を数値的に検証した。具体的には、冷却原子系で実現が期待されている、非可換ゲージ場を持つ2次元格子模型を用いた。この系は、内部自由度を持ち、カイラル対称性を保ったまま傾いたディラック粒子系を実現できるという特徴を持つ。計算の結果、現れた非整数電荷は、カイラル対称性を保存するランダムネスやディラック・コーンの傾きには依存しない幅広い普遍性を持つことがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究のテーマであるトポロジカル欠陥に伴う非整数電荷の研究は、1次元のポリアセチレンにおけるソリトンに付随する非整数電荷の研究に端を発し、グラフェンの発見により、2次元系での渦構造へと研究が進められてきたものである。こうした歴史的な問題に対し、近年の進展が目覚ましい冷却原子系などの新しい実験系への応用を念頭に、非整数電荷の普遍性について、ランダムネスに対する安定性などを具体的に示せたことは、実験での観測に向けた新たな知見として有用であると考えられる。

研究成果の概要(英文)：Irrational charges associated with topological defects (vortex) in two dimensional systems are investigated numerically by the kernel polynomial method. A lattice model with a non-abelian gauge field which hosts vertical/tilted Dirac fermions and respects the chiral symmetry is adopted. A precise numerical analysis reveals that the charges associated with the topological defects are not sensitive to disorder nor tilting the Dirac dispersion, as long as the chiral symmetry is respected. It is further demonstrated that even for the cases where the chiral symmetry is broken by the staggered potential, rational/irrational charges of topological defects are again insensitive to perturbations respecting the chiral symmetry.

研究分野：物性理論

キーワード：トポロジカル欠陥 カイラル対称性 非整数電荷

1. 研究開始当初の背景

トポロジカル構造や欠陥に伴って現れる非整数電荷の研究は、1次元のソリトンに付随する分数電荷の研究に端を発し、以来、物理学の中で長い歴史を持つ。2次元系における分数電荷励起の研究は、これまで主に分数量子ホール系で行われてきたが、この系は強磁場により時間反転対称性の破れた系であり、1次元のソリトンに付随する分数電荷の自然な拡張ではなかった。これに対し、2次元ディラック電子系としてのグラフェンの発見以降、1次元のソリトン系の分数電荷の自然な拡張として、時間反転対称な2次元系における「Vortex (渦)」構造に付随する非整数電荷の研究が進んだ。特に、グラフェンにおける、ダイマー秩序の渦構造に付随して現れる分数電荷の評価や、エネルギーギャップ中のトポロジカルな状態が輸送現象に与える影響など、様々な理論的研究が精力的に行われてきた。その中で、数値的研究も行われていたが、厳密対角化の方法を用いていたため、系の大きさに制限があり、数値計算のみから精度の良い非整数電荷の評価を行うまでには至っていなかった。

その一方で、光格子上の冷却原子系やフォトニック結晶系など、トポロジカル状態を実現する新しい実験系の進展がめざましく、固体物性では実現や制御が難しい系が次々と実現されるようになってきた。従って、こうした新しい実験系での実現可能性を念頭に、トポロジカル状態やそれに付随する非整数電荷の性質を、精密な数値計算により、定量的に明らかにすることの重要性が高まっていた。

2. 研究の目的

上述の研究背景を踏まえ、2次元トポロジカル構造に伴ってエネルギーギャップ中に現れるトポロジカル状態やそれに伴う非整数電荷の普遍性、基礎特性について、解析的なアプローチがそのまま当てはまらないような場合についても、精密な数値計算により非整数電荷の値を高精度で評価し、今後の有効理論の構築の指針となるような数値結果の確立、およびそれに基づく実験の提案を行うことを目指した。特に、実験系につきものの乱れの効果、および、ディラック・コーンの傾きや、カイラル対称性の役割などについて、格子模型に基づく精密な数値計算により明らかにすることを目的とした。

3. 研究の方法

研究背景のなかで述べたように、渦構造のようなトポロジカルな構造を扱うためには、非常に大きな系で数値計算を精密に実行する必要があった。そこで、本研究では、Kernel Polynomial法 (A. Weisse et al., Rev. Mod. Phys. 78, 275 (2006)) を採用した。この手法は、厳密対角化の手法では扱えないような非常に大きな系が扱え、渦構造などのトポロジカル構造を扱うのに適している。さらに、本研究で扱うトポロジカル状態や非整数電荷はトポロジカル構造の中心付近に局在しており、系全体に比べて、比較的小さな領域で局所状態密度を求めさえすれば、非整数電荷の値が高精度で評価することが可能となるため、本研究に適した効率の良い計算手法である。実際に電荷を評価する際には、トポロジカルな構造の中心から半径 r の円内の電荷 $Q(r)$ を求め $r \rightarrow \infty$ の極限への外挿を行なって電荷の値を評価した。こうした解析は、本研究で扱ったような十分大きな系で数値計算を行うことにより初めて可能となる。

具体的な格子模型としては、光学格子上の冷却原子系で実現が期待されている非可換ゲージ場を持つ2次元系を採用した。この模型は、非可換ゲージ場の値を調整することにより、質量ゼロのディラック粒子系を実現することが可能である (F. Mei et al., Phys. Rev. A84, 023622 (2011))。同時に、この模型は内部自由度 (スピン自由度) を有しているため、内部自由度を用いてハミルトニアン H の代数的変形を行うことにより、格子模型全体としてはカイラル対称性を保ったまま、傾いたディラック粒子系を実現できるという特徴を持っている (図1)。このため、カイラル対称性の破れとディラック・コーンの傾きを独立に実現でき、それぞれの効果を別々に明らかにすることができる。ハミルトニアン H の代数的変形は、Kernel Polynomial法に組み込みやすく、計算コストの面でも優れている。

4. 研究成果

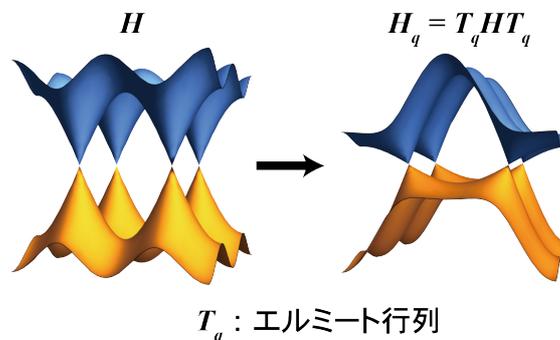


図1 : 内部自由度を用いたハミルトニアン H の代数的変形 $H \rightarrow H_q = T_q H T_q$ により、模型全体としてはカイラル対称性を保ったまま傾いたディラック粒子系を実現できる。

非可換ゲージ場を持つ2次元正方格子上の模型に対し、ダイマー秩序を導入し、バンドギャップを形成したのち、ダイマー秩序のトポロジカル欠陥 (vortex) を導入し (図2 (左))、それに付随する電荷の値を高精度で評価した。数値計算に用いた系は格子点の数が1自由度あたり 10^6 を超える系を考えた。こうした大きな系の中心にトポロジカルな欠陥を配置することにより、電荷等の評価に境界の効果がほとんど効かないようにし、系の大きさを生かして電荷分布の空間的な広がり情報も用いて外挿を行い、非整数電荷を精度良く求めた。Kernel Polynomial 法を実行する際には、チェビシェフ多項式を8192項まで取り入れて十分な精度を確保した。

その結果、渦度が1のvortex構造の場合、内部自由度が2のとき、vortexに付随して現れる局所電荷の値は、1自由度あたりに換算すると、1/2の値(元々の粒子1個の電荷を単位電荷とする)を取ること、すなわち、内部自由度に対して和を取ると、ちょうどvortexの渦度と同じ値の整数値1を取ることがわかった。渦度が2のvortex構造についても調べた結果、電荷の値は2となった。この結果は、渦度が2よりも大きい場合も、やはり渦度と同じ値に量子化されることを示唆する。

さらに、カイラル対称性を保存するようなホッピング積分の乱れや、ディラック・コーンが傾くことが、こうした電荷にどのような影響を与えるのかを調べた。その結果、整数電荷は、カイラル対称性を保存するランダムネスやディラック・コーンの傾きにはほとんど影響を受けないことがわかった (図3)。

さらに、staggered potentialを加えて、カイラル対称性を破った場合の非整数電荷の値を求めた。その結果、内部自由度あたりに換算すると、内部自由度のない場合の結果(T. Kawarabayashi et al., Annals of Physics 435, 168440 (2021))と変化の方向、および大きさのオーダーは一致する結果を得た。その中で、ディラック・コーンを傾けることの非整数電荷への影響は、若干みられるものの、staggered potentialによる変化よりも小さいことがわかった (図4)。

これらの結果は、カイラル対称性さえ保存していれば、整数電荷や非整数電荷の値は、ランダムネスやディラック・コーンの傾きに対して、幅広い普遍性を示すことを示唆している。内部自由度を増やし、フラットバンドが存在する模型に対しても研究を進め、カイラル対称性があれば、フラットバンドの存在が電荷の値にほとんど影響しないことも明らかにした。

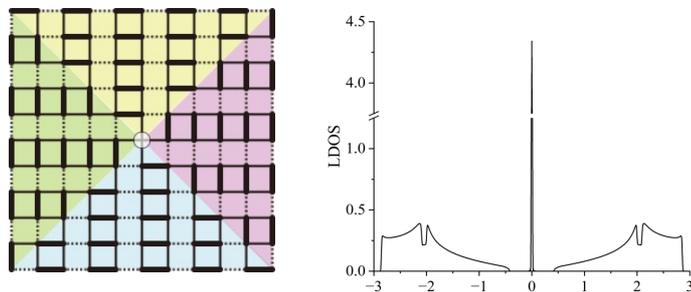


図2 : (左) 2次元正方格子状に導入した渦度が1のダイマー秩序のvortex構造の中心部分。太線(点線)が強い(弱い)ホッピング積分を表す。実際の計算では、 $10^3 \times 10^3$ の大きさの系の中心に渦構造を導入した。(右) Kernel Polynomial法で求めたvortexの中心サイト(左図の丸印)の局所状態密度(LDOS)。Vortexのためにエネルギーギャップ中にエネルギー $E=0$ のトポロジカル状態が生成され、デルタ関数的なピークが現れている。

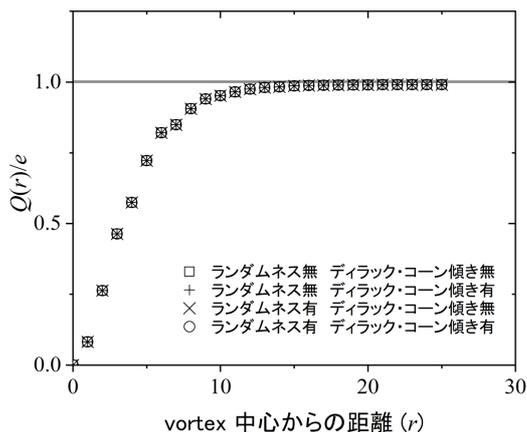


図3 : 渦度が1のvortexの中心から距離 r までにある電荷 $Q(r)$ を r の関数としてプロットしたもの。 $r \rightarrow \infty$ の外挿値がvortexに付随する電荷の評価値となる。非常に大きな系を扱うことにより、はじめてこうした外挿が可能となる。ランダムネスの有無やディラック・コーンの傾きの有無に関わらず、外挿値が1となること、さらに、電荷の空間分布はほとんど変わらないことがわかる。

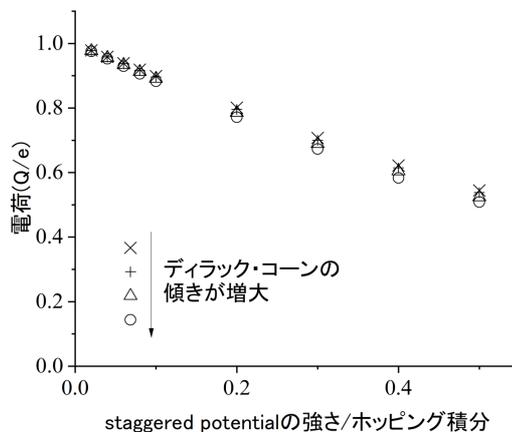


図4 : staggered potentialによってカイラル対称性を破った時の非整数電荷の例。ポテンシャルが強まると、電荷の値は変化するが、代数的変形でディラック・コーンを傾けても(×印は傾いていない場合の結果)、電荷の値はそれほど変化しない。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 T. Kawarabayashi, Y. Inoue, R. Itagaki, Y. Hatsugai, H. Aoki	4. 巻 435
2. 論文標題 Robust zero modes in disordered two-dimensional honeycomb lattice with Kekule bond ordering	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Annals of Physics	6. 最初と最後の頁 168440
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.aop.2021.168440	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 Tohru Kawarabayashi, Yasuhiro Hatsugai	4. 巻 103
2. 論文標題 Bulk-edge correspondence with generalized chiral symmetry	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205306
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.103.205306	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9件（うち招待講演 1件／うち国際学会 4件）

1. 発表者名 T. Kawarabayashi
2. 発表標題 Robust zero modes in disordered fermion-vortex systems
3. 学会等名 Localisation 2020（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 河原林透、初貝安弘
2. 発表標題 変形されたSu-Schrieffer-Heeger模型のトポロジカルな性質
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 石井航太、初貝安弘、河原林透
2. 発表標題 カゴメ格子上の異方的量スピン系の基底状態と Z3ベリー位相
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 河原林透、初貝安弘
2. 発表標題 一般化されたカイラル対称性とバルク・エッジ対応
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 K. Ishii, Y. Hatsugai, T. Kawarabayashi
2. 発表標題 Quantum Monte Carlo study of the Z3 Berry Phase in an Anisotropic Kagome Magnet
3. 学会等名 The international workshop on New Trends in Topological Insulator & Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tohru Kawarabayashi, Yasuhiro Hatsugai
2. 発表標題 Control of Topological Edge States in Finite Systems
3. 学会等名 the 24th international conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 河原林透、初貝安弘
2. 発表標題 有限系の厳密な固有状態としてのエッジ状態
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 河原林透、初貝安弘
2. 発表標題 2次元六角格子におけるエッジ状態の拡張と制御性
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryoichiro Tamotsu, Tohru Kawarabayashi
2. 発表標題 Numerical Study of Irrational Charges in Multi-layered Fermion-Vortex Systems
3. 学会等名 International workshop "Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts" (国際学会)
4. 発表年 2022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
---------	---------