

令和 6 年 5 月 23 日現在

機関番号：15401

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K03405

研究課題名（和文）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とブロッホ理論の一般化

研究課題名（英文）Bulk-boundary correspondence in non-Hermitian topological systems and generalization of Bloch band theory

研究代表者

高根 美武（TAKANE, Yositate）

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）：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を記述する新しい枠組みを定式化した。この枠組みでは、修正周期境界条件を課した端のないバルク形状におけるトポロジカル不変量と開境界条件を課した端のある境界形状におけるトポロジカル境界状態の有無を関係付ける。修正周期境界条件とは、従来の周期境界条件を拡張したものであり、波動関数の指数関数的な増減を取り込むことができる。これを、3種類の非エルミートなトポロジカル系（純虚数ポテンシャルを含むチャーン絶縁体と量子スピンホール絶縁体、そして3種の非エルミート項を含むKitaev鎖モデル）に適用し、バルク境界対応が精密に成り立つことを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

トポロジカル系では、境界に局在するトポロジカル状態の有無は境界のないバルク形状において計算したトポロジカル不変量と関係付けられる。この関係（バルク境界対応）はエルミートなトポロジカル系において広く成立するが、非エルミート系ではしばしば破れてしまう。また、非エルミート系に関する議論は1次元トポロジカル系に集中しており、2次元系においてバルク境界対応を精密に立証した前例は見当たらない。本研究では非エルミート系におけるバルク境界対応を記述する新しい枠組みを提案し、その有効性を立証した。特に、2次元系においてバルク境界対応が精密に成り立つことを示した結果は、先駆的な成果と言える。

研究成果の概要（英文）：To describe bulk boundary correspondence in non-Hermitian topological systems, we propose a new framework that enables us to relate a topological invariant defined in a bulk geometry under a modified periodic boundary condition to the presence or absence of topological boundary states in a boundary geometry under an open boundary condition. The modified periodic boundary condition is an extension of the conventional periodic boundary condition, in terms of which we can take account of an exponential increase or decrease in wave functions. We applied this framework to three non-Hermitian topological systems (i.e., Chern insulator and quantum spin-Hall insulator with a pure imaginary potential, and a Kitaev chain model containing three types of non-Hermitian terms), and showed that the bulk boundary correspondence holds precisely.

研究分野：物性理論

キーワード：非エルミート系 トポロジカル物質 バルク境界対応

1. 研究開始当初の背景

開境界条件を課した境界形状のトポロジカル絶縁体は、エネルギーギャップ内に境界(端や表面)に局在した特異な状態(トポロジカル境界状態)をもつ。トポロジカル境界状態は系のトポロジカルな性質によって守られており、擾乱に対して安定である。この状態の有無は周期境界条件を課した境界の無いバルク形状において定義されたトポロジカル不変量と一対一で対応する。この関係はバルク境界対応と呼ばれ、通常のエルミートなトポロジカル系において広範に成立することが知られている。しかし、近年注目を集める非エルミートなトポロジカル系では、バルク境界対応はしばしば破れてしまう。

その原因と見なされているのが非エルミート表皮効果である。非エルミート表皮効果とは、非エルミート系における固有関数が系の境界に指数関数的に局在する現象を指す。非エルミート表皮効果は開境界条件下の(境界を持つ)境界形状において顕在化し、周期境界条件下の(境界を持たない)バルク形状では消失する。つまり、非エルミート表皮効果は境界形状におけるトポロジカル境界状態に影響を与えるが、バルク形状において定義したトポロジカル不変量には影響しない。この相違がバルク境界対応の破れの主因と考えられる。

当研究代表者は、バルク形状に課す周期境界条件を修正して非エルミート表皮効果を疑似的に取り込めば、バルク境界対応を成り立たせることができると着想した[1]。具体的には、波動関数の指数関数的な増減を許す境界条件(修正周期境界条件)を提案した。この修正周期境界条件をバルク形状に課すと、トポロジカル不変量に対して非エルミート表皮効果の影響を反映させることができる。このように定義したトポロジカル不変量を用いると、ある種の非エルミートな1次元トポロジカル絶縁体におけるバルク境界対応が適切に記述できることを示した[1,2]。

[1] K.-I. Imura and Y. Takane, Phys. Rev. B **100**, 165430 (2019).

[2] K.-I. Imura and Y. Takane, Prog. Theor. Exp. Phys. **2020**, 12A103 (2020).

2. 研究の目的

当研究代表者らが提案した修正周期境界条件を用いるバルク境界対応の枠組みは、いくつかの非エルミートな1次元トポロジカル絶縁体では成功をおさめた[1,2]。しかし、この枠組みが任意のトポロジカル系において機能する保証はない。本研究の目的は、修正周期境界条件を用いるバルク境界対応の枠組みの汎用性を示し、一般的な理論として成立させることである。特に、非エルミートな2次元トポロジカル絶縁体におけるバルク境界対応に注目する。これを適切に記述した先行研究は見当たらないので、成功すれば大きな成果と言えるからである。

3. 研究の方法

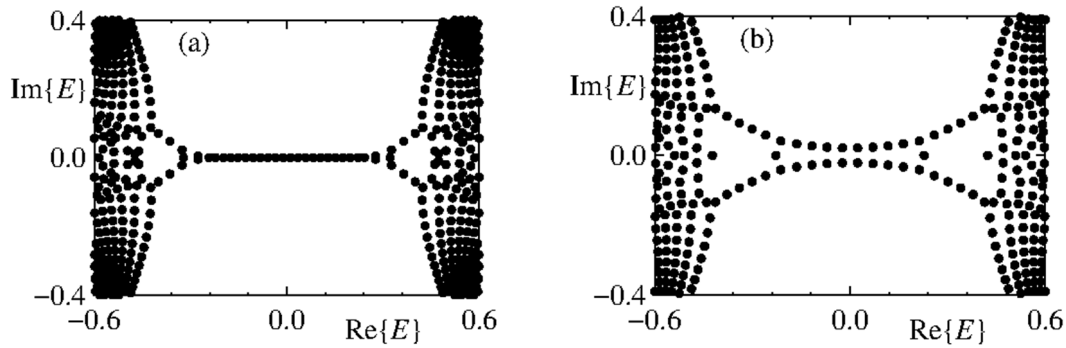
我々のバルク境界対応の枠組みの適用範囲を厳密に明らかにすることは難しい。そこで、この枠組みをいくつかの典型的な非エルミートなトポロジカル系に適用し、バルク境界対応の成功例の蓄積を目指すことにした。研究開始当初は、研究対象として純虚数ポテンシャルを含む非エルミートな2次元チャーン絶縁体(異常量子ホール絶縁体)と3種の非エルミート性を含む1次元キタエフ鎖模型(スピンレスな1次元 p 波トポロジカル超伝導体)を想定していたが、これに加えて、純虚数ポテンシャルを含む非エルミートな2次元量子スピンホール絶縁体についても検討することにした。

具体的には、非エルミートなトポロジカル系に対して我々が提案したバルク境界対応の枠組みを適用し、修正周期境界条件を課したバルク形状におけるトポロジカル不変量から境界形状における相図を導出する。この相図は系を特徴付けるパラメータの空間において、非自明なトポロジカル相(トポロジカル境界状態あり)と自明相(トポロジカル境界状態なし)、ギャップレス相が現れる領域を区分する。得られた相図を開境界条件下の境界形状のスペクトルと比較し、相図の正当性を検証する。境界形状のスペクトルから相境界を精確に決定するためには、極めて大きなサイズの系(例えば、 1000×1000 サイト)で、パラメータを少しずつ変化させながらスペクトルを求める必要がある。このような数値計算を短時間で実行するために、疎行列用のライブラリー(z-Pares)を用いた。

4. 研究成果

(1) 非エルミートな2次元チャーン絶縁体におけるバルク境界対応

この課題に関しては、本研究課題の開始前、バルク境界対応の枠組みを適用し境界形状に対する相図を得ていたが、境界形状のスペクトルと一部で不一致が見られた[3]。試行錯誤の結果、この不一致の原因はトポロジカル境界状態の不安定化に帰することを突き止めた[4]。境界形状のチャーン絶縁体は非自明なトポロジカル絶縁体相においてカイラル端状態を保持するが、純



(左図) 安定なカイラル端状態を持つスペクトル, (右図) 不安定なカイラル端状態を持つスペクトル

虚数ポテンシャル $i\gamma$ を含むチャーン絶縁体では、 γ の増大に伴ってカイラル端状態が不安定化しバルク状態へと変異するのである。カイラルエッジ状態はバンドギャップを横断し、伝導帯と価電子帯をつなぐように現れるが、不安定化してバルク状態へと変異したカイラルエッジ状態の残骸も同様な振る舞いを示す。そのため境界形状のスペクトルを見ただけでは、カイラル状態が安定に存在しているのか、それとも不安定化したかを判断することは困難であった。幸運にも、本研究で用いたモデルでは、安定なカイラル端状態のエネルギー固有値は純虚数ポテンシャルがあっても実数になる(左図)のに対し、不安定化してバルク状態へと変異したカイラルエッジ状態(の残骸)のエネルギー固有値は複素化する(右図)ことを見出した。このスペクトルの差異によって、両者を区別することが可能となった。

カイラルエッジ状態が安定(固有値が実数)な場合、系は非自明なトポロジカル絶縁体相にあると言える。一方、カイラルエッジ状態が不安定化してバルク状態へと変異した場合(固有値が複素化)、伝導帯と価電子帯は第三のバルクバンド(不安定化したカイラルエッジ状態の残骸)によってエネルギー空間において連結されるためエネルギーギャップは消失する。したがって、系はギャップレス相にあると判断すべきである。つまり、 γ の増大に伴ってトポロジカルな非自明相(安定なカイラル端状態あり)からギャップレス相(カイラル端状態が不安定化)への相転移が生じ得る。このような可能性を考慮して境界形状における相図を導出し直したところ、境界形状のスペクトルと完全な一致が得られた[4]。

[3] Y. Takane, J. Phys. Soc. Jpn. **90**, 033704 (2021).

[4] Y. Takane, J. Phys. Soc. Jpn. **91**, 054705 (2022).

(2) 非エルミートな1次元Kitaef鎖モデルにおけるバルク境界対応

Kitaef鎖モデルはスピンレスな1次元 p 波トポロジカル超伝導体のモデルとして知られ、非自明なトポロジカル超伝導相では境界ゼロモードと呼ばれるゼロエネルギー状態(マヨラナ状態)が系の両端に現れる。従来のKitaef鎖モデルに3種の非エルミート性(空間的に均一な純虚数ポテンシャルと左右非対称な飛び移り、対生成・対消滅ポテンシャルの非対称性)を付け加えたモデルを採用し、バルク境界対応に基づいて開境界条件を課した境界形状における相図を解析的に導いた[5]。この系において、線ギャップを持つ非自明なトポロジカル相と自明相の他に、従来知られていなかった点ギャップを持つトポロジカル相を見出した。また、境界ゼロモードに対する非エルミート性の影響を解析的に明らかにした。さらに、これらの結果が境界形状のスペクトルと一致することを確認した[5]。

[5] T. Sakaguchi, H. Nishijima, and Y. Takane, J. Phys. Soc. Jpn. **91**, 124711 (2022).

(3) 非エルミートな2次元量子スピンホール絶縁体におけるバルク境界対応

量子スピンホール絶縁体は非自明なトポロジカル絶縁体相においてヘリカル端状態を保持する。チャーン絶縁体の場合と同様に、純虚数ポテンシャル $i\gamma$ を含む非エルミートな2次元量子スピンホール絶縁体でも、 γ の増大に伴ってヘリカル端状態が不安定化しバルク状態へと転移することを見出した。ここで用いたモデルにおいても、安定なヘリカル端状態のエネルギー固有値は純虚数ポテンシャルがあっても実数になるのに対し、不安定化してバルク状態へと変異したヘリカルエッジ状態(の残骸)のエネルギー固有値は複素化することを見出した。

したがって、この場合も γ の増大に伴う、トポロジカルな非自明相(安定なヘリカル端状態あり)からギャップレス相(ヘリカル端状態が不安定化)への相転移が生じ得る。このような可能性を考慮したうえで修正周期境界条件を用いるバルク境界対応の枠組みを適用して、境界形状における相図を導出した[6]。その結果は、境界形状のスペクトルと完全な一致を示すことが確認できた[6]。

[6] C. Ishii and Y. Takane, J. Phys. Soc. Jpn. **92**, 124707 (2023).

このように(1)から(3)の研究によって、修正周期境界条件を用いるバルク境界対応の枠組みが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を適切に記述できることを示した。

特に，(1)と(3)は，非エルミート表皮効果が顕在化する2次元トポロジカル系において，バルク境界対応が成立することを明確に示した先駆的な成果と言える．

(4) その他

関連する研究として，2次元2次トポロジカル絶縁体の階段端においてギャップレスな端状態が現れる理由を明らかにした[7]．また，空間的に均一な純虚数ポテンシャルと左右非対称な飛び移りを持つ非エルミートな1次元系における伝導現象について考察し，確率密度の保存則を導いた[8]．加えて，3次元トポロジカル絶縁体における螺旋転位に沿った電気伝導について数値シミュレーションによる研究を遂行した[9]．

[7] Y. Nagasato, Y. Takane, Y. Yoshimura, S. Hayashi, and T. Nakanishi, J. Phys. Soc. Jpn. **90**, 104703 (2021).

[8] Y. Takane, S. Kobayashi, and K.-I. Imura, J. Phys. Soc. Jpn. 92, 104705 (2023).

[9] T. Sakaguchi and Y. Takane, J. Phys. Soc. Jpn. 93, 064704 (2024).

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 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 T. Sakaguchi, and Y. Takane	4. 巻 93
2. 論文標題 Electron Transport along Screw Dislocations in a Strong Topological Insulator	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 064704 (1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.93.064704	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 Chihiro Ishii, and Yositake Takane	4. 巻 92
2. 論文標題 Bulk-Boundary Correspondence in a Non-Hermitian Quantum Spin-Hall Insulator	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 124707
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.92.124707	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 Yositake Takane, Shion Kobayashi, and Ken-Ichiro Imura	4. 巻 92
2. 論文標題 Probability Conservation and Localization in a One-Dimensional Non-Hermitian System	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 104705
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.92.104705	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 Tetsuro Sakaguchi, Hiroto Nishijima, and Yositake Takane	4. 巻 91
2. 論文標題 Bulk-Boundary Correspondence and Boundary Zero Modes in a Non-Hermitian Kitaev Chain Model	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 124711 (1-10)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.124711	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 Yositake Takane	4. 巻 91
2. 論文標題 Phase Diagram of a Non-Hermitian Chern Insulator: Destabilization of Chiral Edge States and Bulk-Boundary Correspondence	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 054705 (1-10)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.054705	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 Yuki Nagasato, Yositake Takane, Yukinori Yoshimura, Shin Hayashi, and Takeshi Nakanishi	4. 巻 90
2. 論文標題 Gapless States Localized along a Staircase Edge in Second-Order Topological Insulators	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 104703/1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.104703	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 0件)

1. 発表者名 高根美武, 坂口達郎
2. 発表標題 強いトポロジカル絶縁体における螺旋転位に沿った電気伝導
3. 学会等名 日本物理学会 2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 高根美武, 眞部祐斗
2. 発表標題 キタエフ鎖模型におけるアンドレーフ散乱の解析
3. 学会等名 第29回 渦糸物理ワークショップ
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 高根美武, 石井知海
2. 発表標題 非エルミートな量子スピンホール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78回年次大会 (2023年)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 坂口哲朗, 西島広人, 高根美武
2. 発表標題 非エルミートなKitaev鎖模型におけるバルク境界対応
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高根美武, 小林志遠, 井村健一郎
2. 発表標題 非エルミートな1次元系における散乱問題
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 長郷友紀, 高根美武, 吉村幸徳, 林晋, 中西毅
2. 発表標題 2次トポロジカル絶縁体の階段端におけるギャップレスな端状態
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 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カイラル状態の不安定化
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
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
---------	---------