

令和 5 年 6 月 27 日現在

機関番号：12608

研究種目：若手研究

研究期間：2021～2022

課題番号：21K13865

研究課題名(和文) Diagnosing topological phononic materials by first-principle calculations

研究課題名(英文) Diagnosing topological phononic materials by first-principle calculations

研究代表者

Zhang Tiantian (ZHANG, TIANTIAN)

東京工業大学・理学院・特任助教

研究者番号：50875101

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,600,000円

研究成果の概要(和文)：I proposed node-line surface phonon material SnIP, kagome node-line metal Ni₃In₂S₂, Z₂ Dirac point with multi-helicoïd surface states. I built the theory for chiral phonons in non-symmorphic systems and systems with approximate screw symmetry, and demonstrate the truly chiral phonon in HgS.

研究成果の学術的意義や社会的意義

The first proposed node-line surface phonon material SnIP and Z₂ Dirac point with multi-helicoïd surface states promote the topological band theory. Theories on chiral phonons in non-symmorphic/approximate symmetry systems will trigger follow-up studies, and open new avenues in this field.

研究成果の概要(英文)：I proposed node-line surface phonon material SnIP, kagome node-line metal Ni₃In₂S₂ (which is also demonstrated by experiments), Z₂ Dirac point with multi-helicoïd surface states. I built the theory for chiral phonons in non-symmorphic systems and systems with approximate screw symmetry, and demonstrate the truly chiral phonon in HgS together with Raman scattering collaborators.

研究分野：theoretical physics

キーワード：Z₂ Dirac points node-line surface states chiral phonon theory truly chiral phonons new surface states kagome node-line metal

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1 . 研究開始当初の背景

Phonons are also important (quasi)particles in solids, but studies on their topology are not as much as in electrons. One of the reasons might be that people think topologies in phonons and spinless electrons are much alike in the previous studies. However, phonons and electrons have essential differences which may lead to discoveries of new topological aspects of phonons, such as new quantum degrees of freedoms (*e.g.*, pseudospin and chiral phonons), phonon angular momentum, fragile topological phonons and new topological states (like different types of Weyl phonons and node-line phonons). Unfortunately, studies on topological phonons are still on their early stage.

2 . 研究の目的

In the previous theories on topological phases, phonons have been treated to be in the same class as spinless electrons. Nonetheless, there are several good reasons to expect new topological phenomena unique to phonons, but not in spinless electrons. Thus, the main purpose of this research is to unveil new topological phenomena unique to phonons. This main purpose is divided into three topics, which are combined to reveal new aspects of topological phases in condensed matter physics. (A) In the context of topological phonons, we theoretically study the new quantum degrees of freedom like Weyl/node-line phonons pseudospin, chiral phonons, phonon angular momentum, and fragile topology. (B) Propose materials with newly discovered topological Weyl/node-line phonons, and verify our prediction with experimental collaborators. (C) Extend new theories on phonons developed in (A) and (B) to other particles and quasiparticles in solids, like spinless electrons and photons.

3 . 研究の方法

- (1) We use band theories and other theories in condensed matter physics to built new topological band theories and discover new topological states.
- (2) Combining condensed matter theories with material databases to find material candidates having new topological states. We also use DFT calculations to predict the topological and other physical properties.
- (3) Collaborate with experimental groups (like x-ray scattering, Raman scattering, neutron scattering) to verify our predictions on both the topological band theory and the topological material

4 . 研究成果

We have some achievements on topological band theory [1], which can be applied to phonon systems, spinless electronic systems, magnon systems and so on. Such as Topological phonons in oxide perovskites controlled by light [1], Degenerate topological line surface phonons in quasi-1D double helix crystal SnIP [2], General corner charge formula in two-dimensional C_n-

symmetric higher-order topological insulators [3] and Z₂ Dirac points with topologically protected multihelical surface states [4]. We also have predicted several materials with different topological phonons, and some of them have been demonstrated by our experimental collaborators. Such as, BaPtGe[5], Ni₃In₂S₂[6]. We also proposed new theories and corresponding materials in chiral phonons, which is also verified by our experimental collaborators. Chiral phonons entangled with multiple Hall effects and unified convention for pseudoangular momentum in 2D materials [7], Chiral phonons and pseudo-angular momentum in non-symmorphic systems [8], Chern numbers of topological phonon band crossing determined with inelastic neutron scattering [9] and Truly chiral phonons observed in α -HgS [10].

- [1] Science Advances 6 (46)(2020)
- [2] npj Computational Materials 7, 195 (2021)
- [3] Physical Review B 103 (20), 205123 (2021)
- [4] Physical Review Research 4 (3), 033170 (2022)
- [5] Physical Review B 103 (18), 184301 (2021)
- [6] npj Computational Materials 8 (155) (2022)
- [7] Physical Review B 105 (23), 235204 (2022)
- [8] Phys. Rev. Research 4 (1), L012024 (2022)
- [9] Physical Review B 106 (18), 184104 (2022)
- [10] Nature Physics 19 (1), 142-142 (2023)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 5件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Zhang Tiantian, Murakami Shuichi	4. 巻 4
2. 論文標題 Chiral phonons and pseudoangular momentum in nonsymmorphic systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 1012024
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.4.L012024	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 該当する
1. 著者名 Zhang Tiantian, Hara Daisuke, Murakami Shuichi	4. 巻 3
2. 論文標題 Unique surface-state connection between Weyl and nodal ring fermions in ferromagnetic material Cs ₂ MoCl ₆	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 1042037
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.3.L042037	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 該当する
1. 著者名 Peng Bo, Murakami Shuichi, Monserrat Bartomeu, Zhang Tiantian	4. 巻 7
2. 論文標題 Degenerate topological line surface phonons in quasi-1D double helix crystal SnIP	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41524-021-00667-6	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 該当する
1. 著者名 Li Haoxiang, Zhang T.T., Yilmaz T., Pai Y.?Y., Marvinney C.E., Said A., Yin Q.W., Gong C.S., Tu Z.J., Vescovo E., Nelson C.S., Moore R.G., Murakami S., Lei H.C., Lee H.N., Lawrie B.J., Miao H.	4. 巻 11
2. 論文標題 Observation of Unconventional Charge Density Wave without Acoustic Phonon Anomaly in Kagome Superconductors AV ₃ Sb ₅ (A= Rb, Cs)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review X	6. 最初と最後の頁 31050
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevX.11.031050	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 該当する

1. 著者名 Tiantian Zhang、Shuichi Murakami	4. 巻 54
2. 論文標題 Predicting topological materials: symmetry-based indicator theories and beyond	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics D: Applied Physics	6. 最初と最後の頁 414002
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 オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

[学会発表] 計3件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Tiantian Zhang
2. 発表標題 Discovering charge-Z2 Dirac materials with quad-helicoid surface states
3. 学会等名 JPS spring meeting
4. 発表年 2021年 ~ 2022年

1. 発表者名 Tiantian Zhang
2. 発表標題 Local and global topology for Z2 Dirac points
3. 学会等名 BE/BC2022 (Bulk-Edge/Boundary Correspondence) (国際学会)
4. 発表年 2021年 ~ 2022年

1. 発表者名 Tiantian Zhang
2. 発表標題 Discovering Dirac materials with quad-helicoid surface states
3. 学会等名 APS March Meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2021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
---------	---------