

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 17 日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540460

研究課題名(和文) 磁場中の電子状態計算と位相不変量による電子物性

研究課題名(英文) Electronic structure in uniform magnetic field and topological invariance

研究代表者

新井 正男 (ARAI, Masao)

独立行政法人物質・材料研究機構・理論計算科学ユニット・主幹研究員

研究者番号：40222723

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,000,000 円、(間接経費) 1,200,000 円

研究成果の概要(和文)：(1) 結晶中の電子が一様な磁場中で示す振る舞いを、量子力学的に計算するプログラムの拡張した。標準的な規模の計算機(ワークステーション)を複数台接続したクラスターを対象として、計算効率の向上を行った。

(2) 結晶中の電子から生じる磁化の大きさを、(1)の計算結果から評価するために利用できる定式化を、磁化の定義に基づいて導出した。

(3) 以上の成果を用いて、簡単なモデルに対して一様磁場中での電子の挙動を解析した。

研究成果の概要(英文)：(1) We extended a computer program which calculates electronic structures in uniform magnetic field. Using both MPI and OpenMP, the modified code can run effectively on standard workstation cluster.

(2) An expression for orbital-magnetic moments was derived from Wannier function description. In magnetic field, Wannier function is dressed with phase factors. Using this basis set, magnetic moments were calculated as the derivative of thermodynamic function by applied uniform magnetic field.

(3) Using above results, the magnetic breakdowns were investigated.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：電子構造

1. 研究開始当初の背景

周期ポテンシャル中で、電子系は結晶運動量 k でラベル付けされるエネルギーバンドを構成するこの状態を出発点として、一電子近似での電子物性を理論的に解析することができる。エネルギーバンドの局所構造、つまり、エネルギーの k 微分により、フェルミ速度や有効質量が得られる。さらに、エネルギーバンドの大域的構造、すなわち位相幾何学的に特徴付けられる量(位相不変量)が電子物性に対して影響を与えることが指摘されている。このような最初の例は、2次元系の量子化されたホール伝導度 σ_{xy} であり、化学ポテンシャル μ がバンドギャップ中に存在すると、 σ_{xy} は占有されたバンドに対する Chern 数の和によって表現される。最近では、位相不変量により通常の絶縁体とは異なるタイプの相(トポロジカル絶縁体)が発見され、エネルギーバンド構造に対する位相不変量の重要性が高まりつつある状態であった。

電気分極といった基本的な物理量に関して、その表式は自明なものではなく、Berry 位相と呼ばれる、やはりバンド構造の幾何学的性質で特徴付けられる量で表現できることが知られている。この表式は、現在では第一原理電子構造計算プログラムに広く取り入れられ広く用いられている。一方、電気分極と同様に重要な物理量である軌道磁化に関する表式も、境界を明示的に考慮した方法や、半古典的な手法などによって導出されたが、第一原理計算に広く持ちいられるまでには至っていなかった。

2. 研究の目的

(1) 本研究では、位相不変量を用いた物性評価を現実的なバンド構造に対して計算できるように拡張することを旨とした。

(2) 厳密には位相不変量ではないが、それに類似したかたちで定式化されている軌道磁化についても解析をすすめる。これらの成果を用いて、一

様磁場中での電子構造に関する解析を行う。

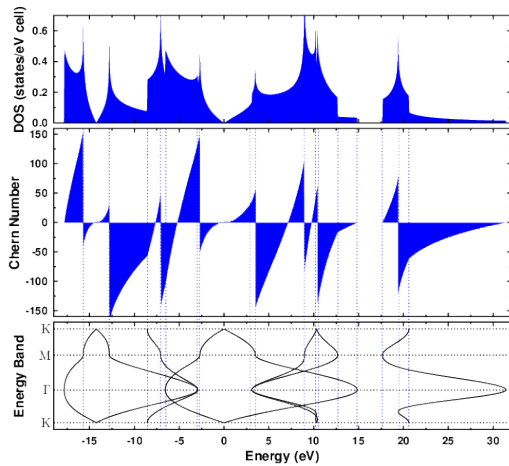
3. 研究の方法

本研究が開始される以前から、2次元系の量子化されたホール伝導度を数値的に解析するために、一様磁場中の電子構造をタイトバインディング(強結合)近似を用いて計算するプログラムの開発を進めてきた。本研究では、このプログラムの拡張をすすめる。まず、プログラムの効率化を進め、これまで以上に大規模な計算を可能にする。さらに、ホール伝導度以外の物性量を評価できるように拡張をすすめる。

軌道磁化については、ワニエ関数を基底として用いて、熱力学ポテンシャルを一様磁場で微分することで軌道磁化の表式を得る。

4. 研究成果

(1) 周期格子に一様磁場を印加した系では、単純な並進対称性に基づく Bloch の定理を用いることはできず、貫く磁束が量子磁束の整数倍となるようなスーパーセルに対する磁氣的並進操作を考える必要がある。そのため、弱磁場になるにつれて、大きなスーパーセルが必要になる。固有エネルギーを単純な行列対角化により求める場合、計算量はスーパーセルサイズの3乗に比例することになり、計算時間が増大する。本研究では、プログラムを並列化することにより効率的な計算を目指した。並列化のターゲットとしては、標準的なワークステーション(WS)を複数台接続したワークステーションクラスタを対象とする。各 k 点に対する計算を、異なる WS で実行するように MPI を用いて並列化した、各 WS 内では固有エネルギーの計算をすべてのコアを用いて実行するように並列化した。この拡張のおかげで、従来よりも低磁場まで、短時間で計算することが可能となった。一例として、グラフェンに適用した例を図に示す。



グラフェンに関する Chern 数の数値計算結果については、すでに先行論文で報告しているが、当時の計算に比べて弱磁場での計算が可能となり、ホール伝導度の量子化に対応する Chern 数のステップ構造がこの解像度では判別できず、連続的に変化しているように見える。

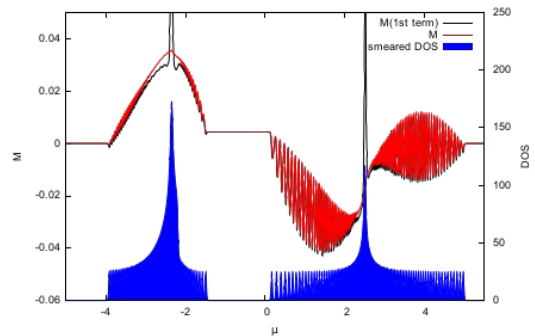
(2) 軌道磁場の表式を、ゼロ磁場でのワニエ関数を出発点として導出した。磁場中では、各ワニエ関数に空間座標に依存した位相を付けた基底を用いて理論展開できることが様々な研究で報告されている。この手法を軌道磁化に適用して、熱力学ポテンシャルを一様磁場の一次まで評価することにより、下図に示した表式が導出できることを示した。

$$M = \frac{ie}{2} \sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(\epsilon_{nk}) \langle \nabla_{\mathbf{k}} u_{nk} | \times (\hat{H}(\mathbf{k}) + \epsilon_{nk} - 2\mu) | \nabla_{\mathbf{k}} u_{nk} \rangle - ie \sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} g(\epsilon_{nk} - \mu) \langle \nabla_{\mathbf{k}} u_{nk} | \times | \nabla_{\mathbf{k}} u_{nk} \rangle$$

f : Fermi 分布関数
 $g \equiv \frac{\partial f}{\partial \epsilon}$

このうち、第2項は系が金属的な場合に寄与する項である。また、絶対零度で化学ポテンシャルがバンドギャップに位置するときには、軌道磁化を化学ポテンシャルで微分した量が、占有バンドの Chern 数で表現でき、ホール伝導度のストラダ公式と関係していることがわかる。ここでの導出には、各バンドからワニエ関数が構

成されていることを用いているため、この仮定が成り立たない場合、例えば一様磁場中でランダウバンドが構成される状況では使えない。本研究では、そのような状況下で熱力学ポテンシャルの数値微分と上式から求めた量を比較し、この表式が熱力学ポテンシャルの微分により定義して軌道磁化を再現することを数値的に確かめた。下図に一様磁場中の Haldane 模型に対する計算例を示す。



青色で指名した量は状態密度であり、ランダウ量子化の影響でスパイク状の構造を持つ。赤線は先に示した表式を用いて求めた軌道磁化であり、数値的に熱力学ポテンシャルを微分して求めた軌道磁化と完全に一致する。黒線は、軌道磁化の表式の第1項のみを用いて軌道磁化を計算した場合の値を示し、条件によっては第2項が重要になることを示している。

(3) これらの結果を用いて、磁場破壊を引き起こすと考えられる簡単なタイトバインディング模型に対する研究を進めた。また、2次元電子系のモデルとなるような物質群の電子構造を探索した。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 3 件)

1. M. Khazaei, M. Arai, T. Sasaki, M. Estill, and Y. Sakka, “The effect of the interlayer element on the exfoliation of layered Mo(2)AC (A = Al, Si, P, Ga, Ge, As or In) MAX phases into two-

dimensional Mo₂C nanosheets”, Sci. Tec. Adv. Mater., **15**, 014208 (2014), 査読有り

2. M. Khazaei, M. Arai, T. Sasaki, C.-Y. Chung, N. S. Venkataramanan, M. Estili, Y. Sakka, and Y. Kawazoe, “Novel Electronic and Magnetic Properties of Two-Dimensional Transition Metal Carbides and Nitrides,” Advanced Functional Materials, **23**, 2185-2192 (2013), 査読有り
3. M. Arai, Y. Hatsugai, Numerical study of electronic structure under uniform magnetic field and quantized Hall conductance for multi-band tight-binding models, J. Phys.: Conf. Ser. **334**, 012042 (2011), 査読有り

[学会発表](計 2 件)

1. M. Arai and Y. Hatsugai, “Electronic structure of periodic lattice under uniform magnetic field: quantized Hall conductance and orbital magnetic moment”, EQPCM2013, 2013 年 6 月 13 日, 東京大学物性研究所
2. 新井正男、初貝安弘、周期系による軌道磁化、日本物理学会 2012 年秋季分科会、2012 年 9 月 18 日、横浜国立大学

6. 研究組織

(1) 研究代表者

新井正男 (ARAI, Masao)

物質・材料研究機構理論計算科学ユニット 主幹研究員

研究者番号: 40222723

(2) 研究分担者

初貝安弘 (Hatsugai, Yasuhiro)

筑波大学 数理物質科学研究科 教授

研究者番号: 802184495