

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 5 月 29 日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540338

研究課題名(和文)トポロジカル絶縁体の不純物及び電子相関効果の理論的研究

研究課題名(英文)Theoretical study of impurity and correlation effects on topological insulators

研究代表者

古崎 昭 (Furusaki, Akira)

独立行政法人理化学研究所・古崎物性理論研究室・主任研究員

研究者番号：10238678

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,000,000円

研究成果の概要(和文)：トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類をディラック質量項の分類問題として定式化した。ディラック・ハミルトニアンと対称変換演算子から生成されるクリフォード代数の拡大問題を考え、その解として得られる分類空間のトポロジーからトポロジカル相を分類する理論の枠組みを整理した。この理論を応用して、弱いZ2トポロジカル絶縁体・超伝導体の表面状態の乱れに対する安定性を示し、トポロジカル絶縁体・超伝導体のアンダーソン局在問題における一般的な相構造を明らかにし、Z2トポロジカル荷をもつワイル半金属・ディラック半金属の分類を行った。さらに、強相関のトポロジカル相の例としてSU(3)スピン模型を構築した。

研究成果の概要(英文)：The classification of topological insulators and superconductors is reformulated as classification of Dirac mass terms, and a theoretical framework is developed for finding the classification from the topology of classifying spaces obtained from the extension problem of Clifford algebras which are generated from Dirac Hamiltonians and symmetry transformation operators. Applying this theoretical framework led to the following results: it was shown that surface states of weak Z2 topological insulators/superconductors are stable against disorder; phase diagrams for the Anderson localization problem of disordered topological insulators/superconductors are obtained; the classification of Weyl/Dirac semimetals with Z2 topological charge is achieved. Furthermore, a model of SU(3) spins is constructed which has a symmetry protected topological ground state.

研究分野：物性理論

キーワード：トポロジカル絶縁体 トポロジカル超伝導 ディラック電子 アンダーソン局在

1. 研究開始当初の背景

トポロジカル絶縁体は、バルク中のエネルギー・バンド構造にはギャップが開いているバンド絶縁体であるが、価電子帯と伝導帯をつなぐエネルギー分散をもった表面状態が必ず存在する物質である。トポロジカル超伝導体は準粒子励起にギャップが開いたBCS超伝導体で、表面にギャップレスのアンダーエフ束縛状態が存在する物質である。トポロジカル絶縁体とトポロジカル超伝導体は、ともに整数(Z)もしくは二値(Z_2)のトポロジカル数で特徴づけられ、表面状態の数はトポロジカル数に対応している。また、3次元の弱いトポロジカル絶縁体は、2次元のトポロジカル絶縁体を積層して得られる絶縁体で、積層方向に平行な表面にはディラック・コーンが2つ(あるいは偶数個)存在する。

2012年に欧米の2つの研究グループにより、弱いトポロジカル絶縁体の表面状態は不純物散乱によってアンダーソン局在を起ささないという報告がなされた。この研究以前には、強いトポロジカル絶縁体の表面状態がアンダーソン局在しないことのみが知られていて、弱いトポロジカル絶縁体の表面状態に対するアンダーソン非局在のより深い理解が望まれていた。

相互作用が無視できる自由フェルミ粒子に対して、一般的な対称性にもとづく(強い)トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類理論は2008年頃に完成した。引き続いて、電子間相互作用によって、この分類がどのような変更を受けかが重要な研究課題となってきた。1次元系に対しては、FidkowskiとKitaevによる先駆的な研究によって Z の分類が Z_8 になる例が知られており、さらに行列積表現の波動関数にもとづいた群コホモロジーによる分類が1次元系については確立した。2次元系についてはチャーン・サイモンズ理論に基づいた分類がなされている。

2. 研究の目的

本研究の目的は、トポロジカル絶縁体における不純物効果の理解を深めること、および電子相関が強い絶縁体における新しいトポロジカル相の探索である。3次元の弱いトポロジカル絶縁体の2次元表面における不純物散乱によるアンダーソン局在問題を数値的および解析的に研究し、さらに一般的にトポロジカル絶縁体における不純物散乱効果・アンダーソン局在について研究する。電子相関が重要となるトポロジカル相の具体例を、例えば量子スピン系などで構成し、その物性を調べる。また、トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類理論が、電子間相互作用によってどのように変更されるかを知るため、表面ディラック電子に対する電子相関効果を調べる。

3. 研究の方法

(1) 鏡映対称性によって守られたトポロジカル絶縁体・超伝導体を分類するために、

Kitaevが導入したK理論を用いる方法を拡張した。具体的には、対称変換の演算子及びディラック・ハミルトニアン D の行列を生成子とするクリフォード代数を構成する。まず、ディラック・ハミルトニアン D の質量項(生成子の一つ)を除いたクリフォード代数の行列表現を考え、それに質量項を加えてクリフォード代数を拡大する問題を考える。このとき、質量項の行列表現として可能なものの集合は分類空間をなし、その連結成分の個数を数えることでトポロジカル相の分類を行った。

(2) 3次元の弱いトポロジカル絶縁体の表面状態のアンダーソン局在を数値シミュレーションにより研究した。弱いトポロジカル絶縁体が2次元量子スピンホール絶縁体を積層したものであると考えて、量子スピンホール絶縁体の端状態がトンネル結合したネットワークモデルを構築した。転送行列法によって準1次元系の局在長を計算し、有限サイズスケール解析を行った。

(3) 一般の対称クラスに属す、 $d+1$ 次元の弱い Z_2 トポロジカル絶縁体の表面状態の不純物に対する安定性を研究するため、 d 次元の Z_2 トポロジカル絶縁体をディラック・ハミルトニアンで表し、その表面状態を結合させることによって、弱い Z_2 トポロジカル絶縁体の表面状態に対する d 次元ディラック・ハミルトニアンを構成した。この有効ディラック・ハミルトニアンが持ち得る質量項の分類をクリフォード代数の表現論を用いて行った。

(4) 3次元の半金属のワイル点もしくはディラック点の安定性は、ワイル・ハミルトニアンあるいはディラック・ハミルトニアンが質量項を持ち得るか否かで決まる。その判定をクリフォード代数の拡大問題を考えることによって行った。

(5) 対称性によって守られた1次元トポロジカル相の基底状態波動関数を、行列積状態として書き下した。さらに、密度行列繰り込み群法を用いて数値計算を行い、エンタングルメント・スペクトルや秩序パラメータを求めた。

(6) トポロジカル絶縁体薄膜の表面状態に対する2次元有効ディラック・ハミルトニアンを書き下し、磁場中のハミルトニアンを数値対角化した。

(7) トポロジカル絶縁体における不純物散乱効果(アンダーソン局在)をディラック・ハミルトニアンの質量項がランダムになっているモデルを用いて、一般的に考察した。クリフォード代数の拡大問題から得られる質量項の分類空間を考え、そのホモトピー群を考えることによって、アンダーソン局在の相図を得た。

4. 研究成果

(1) 鏡映対称性によって守られたトポロジカル絶縁体・超伝導体の一般的な分類理論を構築した。ディラック・ハミルトニアンの質量項の分類問題を、クリフォード代数の拡大

問題に帰着させる一般論を整理し、鏡映変換の演算子と時間反転・粒子正孔・カイラル変換との(反)交換関係に応じてクリフォード代数を構成することによって、鏡映対称性をもつトポロジカル結晶絶縁体・超伝導体の分類を行った。

(2) 時間反転対称性によって守られた3次元の弱いトポロジカル絶縁体の2次元表面状態のアンダーソン局在の問題の解明のため、表面伝導を表す異方的な有効ネットワーク模型について数値シミュレーションを行った。2次元層間の結合が平均として一様である場合には局在は起こらず、常に金属的な伝導が得られた。層間トンネル結合の大きさの強弱が交替しているときにはアンダーソン局在・非局在転移が起こり、転移点で発散する局在長の臨界指数が2次元シンプレクティック・クラスのユニバーサリティーで期待される値と一致することを確認した。

(3) d 次元の強い Z_2 トポロジカル絶縁体・超伝導体を積層して得られる $d+1$ 次元の弱い Z_2 トポロジカル絶縁体・超伝導体の表面状態の(不純物散乱などの)摂動に対する安定性をディラック・ハミルトニアンとクリフォード代数を用いて議論した。ギャップレスの表面ディラック状態に対するディラック質量項はただ一つ存在し、それは層間の二量体化に対応すること、そして、このディラック質量の符号の異なる表面絶縁体は Z_2 トポロジカル数で区別されるトポロジカルに異なる絶縁体であることを示した。このことから、ディラック質量が平均として0であれば、常に金属的であることが結論され、数値シミュレーションの結果を説明する。

(4) 3次元のワイル半金属あるいはディラック半金属のトポロジカルな安定性を説明する一般論を、クリフォード代数を用いて展開し、時間反転対称性と鏡映対称性(あるいは反転対称性)をもつ系で Z_2 トポロジカル荷をもつワイル半金属・ディラック半金属の模型を構成した。

(5) $Z_3 \times Z_3$ 対称性で守られたトポロジカルに非自明な基底状態をもつ1次元の $SU(3)$ スピン模型を構成した。これは、 $SU(2)$ の $S=1$ スピンに対する有名なAKLT模型の自然な拡張である。基底状態波動関数は行列積状態として書かれる。我々の構成したハミルトニアンは $SU(3)$ の8表現の演算子で書かれており、結合定数の比を変えるとトポロジカル相とダイマー相が出現することをiDMRG計算によって確認した。2つの相の間の相転移点でのエンタングルメント・エントロピーの計算から、相転移は $SU(3)_2$ のユニバーサリティー・クラスにあることを示した。

(6) 磁場中のトポロジカル絶縁体薄膜で上側の薄膜表面と下側の表面の間にポテンシャル差があるときに生じる $\nu=0$ の量子ホール状態に対して、薄膜の横表面の電子状態を表面ディラック電子に対する有効模型を解いて求め、電荷・スピン伝導特性を計算した。

(7) トポロジカル絶縁体・超伝導体の有効模型としてディラック・ハミルトニアンをとり、不純物効果を符号がランダムなディラック質量項として考慮することにより、アンダーソン局在の相図の一般的な構造を、10種の対称クラスと空間次元 $d=1,2,3$ に対して決定した。ディラック質量項の集合のなす多様体のトポロジーによって、相構造や状態密度の特異性が決まることを明らかにした。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 7 件)

- (1) T. Morimoto, A. Furusaki, and C. Mudry, Anderson localization and the topology of classifying spaces, *Physical Review B*, 査読有, Vol. 91, 2015, 印刷中
- (2) T. Morimoto, A. Furusaki, and N. Nagaosa, Charge and spin transport in edge channels of a $\nu=0$ quantum Hall system on the surface of topological insulators, *Physical Review Letters*, 査読有, Vol. 114, 2015, 146803 (5pp.) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.146803>
- (3) T. Morimoto, H. Ueda, T. Momoi, and A. Furusaki, Z_3 symmetry-protected topological phases in the $SU(3)$ AKLT model, *Physical Review B*, 査読有, Vol. 90, 2014, 235111 (21pp.) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.90.235111>
- (4) T. Morimoto and A. Furusaki, Weyl and Dirac semimetals with Z_2 topological charge, *Physical Review B*, 査読有, Vol. 89, 2014, 235127 (13pp.) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.235127>
- (5) H. Obuse, S. Ryu, A. Furusaki, and C. Mudry, Spin-directed network model for the surface states of weak three-dimensional Z_2 topological insulators, *Physical Review B*, 査読有, Vol. 89, 2014, 155315 (28pp.) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.155315>
- (6) T. Morimoto and A. Furusaki, Stability of surface states of weak Z_2 topological insulators and superconductors, *Physical Review B*, 査読有, Vol. 89, 2014, 035117 (7pp.) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.035117>
- (7) T. Morimoto and A. Furusaki, Topological classification with additional symmetries from Clifford algebras, *Physical Review B*, 査読有, Vol. 88, 2013, 125129 (16pp.) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.88.125129>

〔学会発表〕(計 12 件)

- (1) T. Morimoto, H. Ueda, T. Momoi, and A. Furusaki, Z_3 symmetry-protected topological phases in SU(3) AKLT model, APS March Meeting 2015, 2015年3月3日, San Antonio (USA)
- (2) A. Furusaki, Classification of topological phases and its applications, YITP Long-Term Workshop “Novel Quantum States in Condensed Matter 2014”, 2014年11月11日, 京都大学基礎物理学研究所(京都府京都市)
- (3) 森本高裕、古崎昭、 Z_2 ワイル・ディラック半金属、日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014年9月9日, 中部大学(愛知県春日井市)
- (4) 小布施秀明、笠真生、古崎昭、C. Mudry, 弱い3次元トポロジカル絶縁体の表面状態：奇数チャネル及び trimerization の寄与, 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014年9月8日, 中部大学(愛知県春日井市)
- (5) 森本高裕、古崎昭, 弱いトポロジカル絶縁体・超伝導体の表面状態の安定性, 日本物理学会第 69 回年次大会, 2014年3月29日, 東海大学(神奈川県平塚市)
- (6) 小布施秀明、笠真生、古崎昭、C. Mudry, 弱い3次元トポロジカル絶縁体の表面状態における局在非局在転移, 日本物理学会第69回年次大会, 2014年3月27日, 東海大学(神奈川県平塚市)
- (7) A. Furusaki, Stability of surface states of (weak or crystalline) topological insulators, FIRST-QS2C Workshop on “Emergent Phenomena of Correlated Materials”, 2013年11月14日, 品川インターシティ(東京都港区)
- (8) A. Furusaki, Classification of topological insulators and superconductors, APCTP-TRP Mini Workshop “Holography and strongly-correlated systems”, 2013年11月8日, Seoul (Korea)
- (9) A. Furusaki, Classification of topological insulators and superconductors, 7th ISSP International Workshop and Symposium “Emergent Quantum Phenomena in Condensed Matter”, 2013年6月10日, 東京大学物性研究所(千葉県柏市)
- (10) A. Furusaki, Kondo effect in helical edge states, APCTP-ICTP Joint Conference “Quantum Transport through Nanostructures”, 2012年8月30日, Pohang (Korea)
- (11) A. Furusaki, Topological insulators and superconductors, The AIMR International Symposium 2013, 2013年2月20日, 仙台国際センター(宮

城県仙台市)

- (12) A. Furusaki, Classification of topological insulators and superconductors: some applications, International Conference on Topological Quantum Phenomena, 2012年5月18日, 名古屋大学(愛知県名古屋市)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

古崎 昭 (FURUSAKI, Akira)

独立行政法人理化学研究所・古崎物性理論研究室・主任研究員

研究者番号：10238678

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし