

令和元年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：2015～2018

課題番号：15K05218

研究課題名(和文)ディラック粒子系の量子輸送現象におけるカイラル対称性の効果

研究課題名(英文) Chiral symmetry in quantum transport phenomena of Dirac particles in two dimensions

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) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：傾いたディラック粒子系を特徴付ける対称性としての「一般化されたカイラル対称性」が、低エネルギーの有効理論のみならず、格子模型に対しても厳密に定義できることを示した。同時に、一般化されたカイラル対称性を保存する格子模型に対する一般的な理論的枠組みを構築し、その応用として、格子模型におけるフェルミオン・ダブリングや、フェルミオン・ボルテックス系のゼロモードなどの問題の、傾いたディラック粒子系一般への拡張を行うことができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

有機導体などで見られる2次元ディラック粒子系では、多くの場合傾いたディラック・コーンが観測され、通常のカイラル対称性が破れている。このため、傾いたディラック電子系一般の特徴付けは自明ではなかったが、我々は、傾いたディラック・コーンが「一般化されたカイラル対称性」によって特徴付けられること、また、こうした対称性が格子模型レベルで厳密に定義できることを示した。これにより、フェルミオン・ダブリング(フェルミオンが同じエネルギーに偶数個縮退して現れること)の問題などが議論できるようになり、傾いたディラック粒子系一般に対して、新たな概念、視点を提供することができた。

研究成果の概要(英文)：We have shown that the generalized chiral symmetry, which we propose for characterizing generic tilted Dirac particles, can be defined not only for low-energy effective hamiltonians but also for lattice models exactly. We have developed a general theoretical framework for such systems in which we show that lattice models respecting the generalized chiral symmetry can be systematically generated by an algebraic deformation of a lattice model with the conventional chiral symmetry. With this general framework for the generalized chiral symmetry, we have discussed an exact extension of the zero modes of the tilted fermion-vortex systems in two dimensions as well as the topological protection of the doubling of the tilted Dirac fermions on lattice models.

研究分野：物性理論

キーワード：カイラル対称性 ディラック粒子

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19（共通）

### 1. 研究開始当初の背景

グラフェン（単層グラファイト）の生成とその量子ホール効果の測定以来、グラフェンの基礎特性やデバイスへの応用について、世界的に精力的な研究が行われてきたが、本研究を開始する頃には、研究対象が、グラフェンや六方晶系窒化ホウ素（h-BN）などの原子膜を人工的に積層させた新しい人工原子層物質、MoS<sub>2</sub> などの小さなギャップ（質量）をもったディラック電子をもつ原子膜など、様々な原子膜へと広がりを見せていた。さらに、グラフェンの特徴である質量ゼロのディラック粒子を有する系として、グラフェンや有機導体以外にも、金属表面に作られた人工格子や光学格子上の冷却原子系など、様々な系でディラック粒子系が実現されるようになり、理論の対象となる系が多種多様な広がりを見せていた。実験の精密化が進んだ結果、基礎特性においても、Hofstadter-butterfly の実験的観測が実現する一方、電荷中性点近傍における絶縁体的振る舞いなど、まだまだ理論的に解明すべき問題も指摘されはじめた。このため、傾いたディラック電子や質量がゼロでないような場合も含む、ディラック粒子系一般において、その基礎特性を理論的に明らかにし、実験結果の解明とともに新たな応用への可能性を模索することが、重要かつ緊急の課題となっていた。

### 2. 研究の目的

グラフェンや有機導体 $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> に代表される質量ゼロのディラック電子（相対論的電子）を有する物質群に対し、基礎および応用の両面から世界的に研究が進められてきたが、電荷中性点近傍の量子輸送現象などについては、依然として未解決な問題も多く残されている。そこで本研究では、ディラック粒子系一般に対する電荷中性点近傍の量子輸送特性や電子状態に対し、乱れの効果や電子間相互作用の効果、およびカイラル対称性の役割を、精密な数値計算に基づいて定量的に調べ、実験結果を理論的に解明するとともに、基礎特性の一般性を確立し、新たな実験の提案やデバイス応用に対する新たな知見を得ることを目的とした。

### 3. 研究の方法

ディラック粒子系の量子輸送特性における乱れの効果、電子間相互作用の効果について、カイラル対称性という観点から、精密な数値計算および有効理論を用いて、定量的に研究を遂行した。モデルとしては、主に強束縛模型（格子模型）を用い、解析的手法と数値計算手法（厳密対角化法、Kernel Polynomial 法）を併用しながら研究を行った。その際、プログラムの並列化などを活用して、複数ノードの計算機で効率よく計算を実行し、できる限りの精度のよい数値計算を行った。

### 4. 研究成果

本研究課題では、一般的な質量ゼロの傾いたディラック粒子を特徴付けるものとして、通常のカイラル対称性を拡張した「一般化されたカイラル対称性」に注目し、通常（垂直な）ディラック電子系でこれまで構築されてきた概念が、どのように傾いたディラック粒子系へ一般化されるかという観点を中心に研究を行った。

#### (1) 格子模型における一般化されたカイラル対称性[論文3]

本研究課題で得られた最も大きな成果は、二次元ディラック粒子系において、これまで低エネルギーの有効理論でしか定義できていなかった「一般化されたカイラル対称性」が格子模型でも厳密に定義できることを示したことである。この「一般化されたカイラル対称性」は、傾いたディラック粒子系一般を特徴付ける対称性として、以前から我々が提案している（T. Kawarabayashi et al., Phys. Rev. B83, 153414 (2011)）ものであったが、これまでは、低エネルギーの有効理論でのみ定義されるものであった。これに対し、本研究で我々は、「一般化されたカイラル対称性」の代数的表現を一般化することにより、「一般化されたカイラル対称性」が格子模型においても厳密に定義できることを見出した。

その中で、一般化されたカイラル対称性を持つ格子模型は、通常のカイラル対称性を持つ格子模型から、代数的な連続変形によって系統的に生成できること、また、もとのカイラル対称な格子模型が垂直なディラック粒子系である場合、変形された模型においては傾いたディラック粒子系が実現されることなどを、具体例を含めて示すことができた（図1）。また、代数的な連続変形においてゼロモード（ゼロエネルギー状態）の存在が保たれることや、一

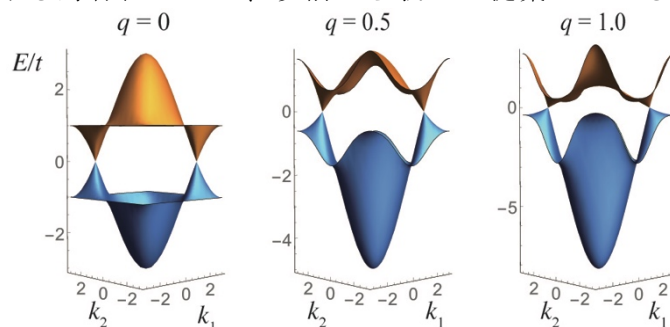


図1：二次元蜂の巣格子模型を $H(q) = T(q)^{-1} H T(q)^{-1}$ ,  $T(q) = e^{q\sigma_x/2}$  によって代数的に連続変形した例。 $\sigma_x$ はパウリ行列、 $k_1, k_2$ は波数ベクトルの2つの基本ベクトルへの射影を表す。 $q \neq 0$ ではカイラル対称性は破れているが、一般化された対称性は保存されており、変形によってディラック・コーンが傾く様子がわかる。[論文3]

般化されたカイラル対称性が質量項によって破られた場合のゼロモードのトポロジカルな性質などについても、一般的に明らかにすることができた。

我々の構築した一般論の枠組みは、空間的に非一様な系に対しても適用できることから、その応用例の1つとして、質量項に渦 (Vortex (ボルテックス)) 構造があるような系 (フェルミオン・ボルテックス系) のトポロジカルなゼロモード状態の傾いたディラック・フェルミオン系への拡張が、格子模型レベルで厳密に行えることを示すことができた。この時、ゼロモードの波動関数は、通常のカイラル対称性が破れていることから、通常のカイラル演算子の固有状態とはならないが、「一般化されたカイラル対称性」に対応する一般化されたカイラル演算子の固有状態となることも示した。

さらに、超伝導との関連で注目されているフラット・バンド模型に対しても、こうした連続変形により、傾いたディラック電子とフラット・バンドが共存する系が生成できることを示した (図2)。その際、フラットバンドを持つ3バンド模型の代数的連続変形においては、スピン演算子のスピン1表現が有用であることもわかった。[学会発表12]

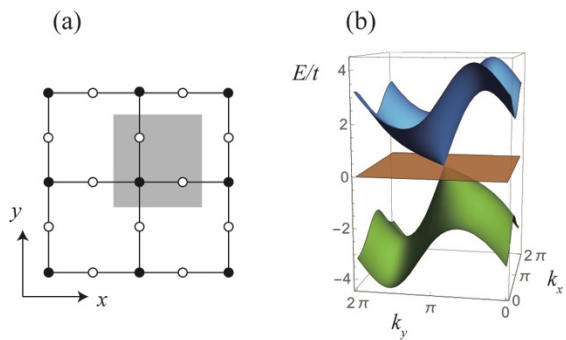


図2: (a)リープ格子と(b)リープ格子を代数的に連続変形した系のバンド構造。傾いたディラック電子とフラットバンドが共存している。[論文3]

### (2) 傾いたディラック粒子のダブリングと一般化されたカイラル対称性[論文2]

カイラル対称な格子模型においては、質量ゼロのフェルミオンが同じエネルギーに偶数個縮退していなければならないこと (フェルミオン・ダブリングと呼ばれる) が、Nielsen-Ninomiyaの定理 (H. B. Nielsen, M. Ninomiya, Nucl. Phys. B185, 20 (1981)) として知られているが、2次元のディラック電子系においても同様に、カイラル対称性によって、質量ゼロのディラック粒子のダブリングが保証されていた (Y. Hatsugai, J. Phys. Conf. Series 334, 012004 (2011))。今回、我々は、格子模型に対して厳密に定義された「一般化されたカイラル対称性」が保存していれば、ディラック電子の分散関係が傾いていて、通常のカイラル対称性が破れているような場合でも、上記のフェルミオン・ダブリングがトポロジカルに保たれることを2バンド模型に対して解析的に示すことができた。我々の証明は、2バンド模型であれば、一般化されたカイラル対称性を持つ格子模型は、代数的な連続変形により通常のカイラル対称性を持つ模型に必ず変換できること、また、その変換の際に、ゼロモードが保存されること、に立脚している。従って、(1)で述べた一般化されたカイラル対称性を持つ模型を生成する代数的変形 (図1参照) が、一般化されたカイラル対称性を持つ模型の“最も一般的な生成方法”であることも示したことになる。こうした結果は、Nielsen-Ninomiyaの定理の傾いたディラック粒子系への拡張と捉えることができる。

### (3) フェルミオン・ボルテックス系における非整数電荷

2次元ディラック粒子系において、質量項に渦 (Vortex (ボルテックス)) 構造のようなトポロジカルな構造がある場合、その巻き付き数 (winding number) に応じて、エネルギーギャップ中にゼロモードが現れ (R. Jackiw and P. Rossi, Nucl. Phys. B190[FS3], 681 (1981))、磁場中の量子輸送現象に重要な影響を与えることが指摘されているが、こうしたボルテックスのようなトポロジカルな構造に付随して、非整数電荷が現れることも知られている (C. Chamon et al., Phys. Rev. Lett. 100, 110405 (2008))。本研究では、こうしたゼロモードや非整数電荷のランダムネスに対する安定性について、Kernel Polynomial法 (A. Weiße et al., Rev. Mod. Phys. 78, 275 (2006)) を用いて精密な数値計算を行うことにより、高次の巻き付き数の場合も含め、カイラル対称性を壊さないボンド型のランダムネスに対しては、ゼロモード及び非整数電荷が、ともに安定性を示すことを確認した。また、格子欠陥がある場合、副格子の対称性が壊れるため、欠陥とボルテックス構造の位置関係に依存して、ゼロモードが消失する場合があります。[学会発表2, 10, 16, 17]

### (4) 多軌道模型一般及びフラットバンド系への発展

スピン自由度のような内部自由度を持つ2次元粒子系への、ディラック・コーンを傾けるような代数的連続変形の応用も行った。こうした系では、内部自由度に対して変換を行うことで、格子模型として通常のカイラル対称性を保存したまま、傾いたディラック粒子系を生成することができる。特に、冷却原子系において実現が議論されている非可換ゲージ場を持つような模型において、磁場中の $n=0$ ランダウ準位の安定性について数値的に調べ、 $n=0$ ランダウ準位のエネルギーがゼロエネルギーからずれた場合も含めて、詳細な解析を行い、どのような場合に $n=0$ ランダウ準位がデルタ関数型の異常性を示すのかについて明らかにした。[学会発表1]

また、フラットバンドを持つ格子模型への代数的変形の拡張を行うにあたり、多軌道、多バンド模型に対する拡張を模索したが、その過程で、当初の計画にはなかったが、フラットバンドを



持つ模型として知られるカゴメ格子上的相互作用するボゾン系と等価な磁性体模型において、異方性の強い領域で提案されていた tripartite entangled plaquette state (J. Carrasquilla et al., Phys. Rev. B96, 054405 (2017)) と呼ばれる新たな量子相が、 $Z_3$  ベリー位相 (Y. Hatsugai and I. Maruyama, Europhys. Lett. 95, 20003 (2011)) によって特徴付けられる可能性を厳密対角化の手法を用いて示すことができた (図3)。[論文1、学会発表7]

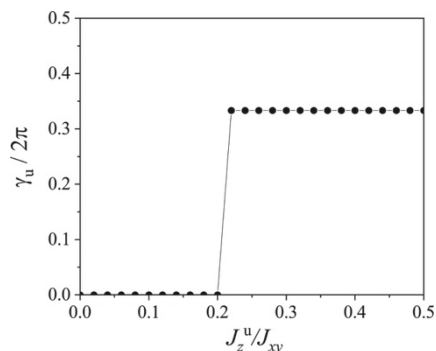


図3 : カゴメ格子上的の異方的な **XXZ** 模型における分数量子化したベリー位相 $\gamma_u$ を27サイトの有限系で数値的に求めたもの。横軸は異方性の強さを表しており、異方性が強くなると、ベリー位相の値が0から $2\pi/3$ へ変化する。 $J_{xy}$ はスピンの $xy$ 成分の強磁性相互作用、 $J_z^{u(d)}$ は上向き(下向き)三角形部分のスピンの $z$ 成分の反強磁性相互作用の大きさを表す。図は $J_z^d = 0.1J_{xy}$ の場合の結果。[学会発表7]

最後に、本研究を遂行するにあたりご協力いただいた青木秀夫教授、初貝安弘教授、石井航太氏、当時学生であった藤澤周平氏、平坂真央氏、板垣諒氏に感謝の意を表したい。

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 4 件)

- 1) Tohru Kawarabayashi, Kota Ishii, and Yasuhiro Hatsugai, “Fractionally quantized Berry’s phase in an anisotropic magnet on the Kagome lattice”, Journal of the Physical Society of Japan 88, 045001 (2019). 査読有り.  
<https://doi.org/10.7566/JPSJ.88.045001>
- 2) Tohru Kawarabayashi, Hideo Aoki, Yasuhiro Hatsugai, “Topologically Protected Doubling of Tilted Dirac Fermions in Two-Dimensions”, Physica Status Solidi B, 1800524 (2019). 査読有り.  
<https://doi.org/10.1002/pssb.201800524>
- 3) Tohru Kawarabayashi, Hideo Aoki, and Yasuhiro Hatsugai, “Lattice realization of generalized chiral symmetry in two dimensions”, Physical Review B94, 235307 (2016). 査読有り.  
DOI: 10.1103/PhysRevB.94.235307
- 4) Yasuhiro Hatsugai, Tohru Kawarabayashi, and Hideo Aoki, “Survival of sharp  $n=0$  Landau levels in massive tilted Dirac fermions: Role of the generalized chiral operator”, Physical Review B91, 085112 (2015). 査読有り.  
DOI: 10.1103/PhysRevB.91.085112

[学会発表] (計 20 件)

- 1) 藤澤周平、初貝安弘、河原林透: 「非可換ゲージ場中のディラック粒子系における  $n=0$  ランダウ準位のランダムネスに対する安定性」、日本物理学会第74回年次大会、2019年3月16日(九州大学)
- 2) Tohru Kawarabayashi: Topological zero-energy states in deformed fermion-vortex systems, Invited Talk (Dec. 13) in the international workshop “Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: from solid state physics to transdisciplinary concepts” (BEC2018X), December 9-13, University of Tsukuba (Tokyo Campus), Tokyo, Japan.
- 3) S. Fujisawa, Y. Hatsugai, T. Kawarabayashi: Robust  $n=0$  Landau levels of Dirac particles in non-abelian gauge fields”, Poster presentation (Dec. 10-12) in the international workshop “Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: from solid state physics to transdisciplinary concepts” (BEC2018X), December 9-13, University of Tsukuba (Tokyo Campus), Tokyo, Japan.
- 4) 河原林透、青木秀夫、初貝安弘: 格子上的の傾いたディラック電子のダブリングと一般化されたカイラル対称性、日本物理学会2018年秋季大会、2018年9月12日(同志社大学)
- 5) Tohru Kawarabayashi, Hideo Aoki, Yasuhiro Hatsugai: Topologically Protected Doubling of Tilted Dirac Fermions in Two Dimensions, Poster presentation (July 31) in the 34th international conference on the Physics of Semiconductors, July 29-August 3, 2018, Montpellier, France.
- 6) Tohru Kawarabayashi, Kota Ishii, Yasuhiro Hatsugai: Topological order in quantum phases in anisotropic Kagome magnets, Poster presentation (July 24) in the 23rd international conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, July 22-17, 2018, Toulouse, France.

- 7) 河原林透、石井航太、初貝安弘：カゴメ格子上の異方的XXZ スピン系における量子相とベリ一位相、日本物理学会第73回年次大会、2018年3月23日（東京理科大学）
- 8) Tohru Kawarabayashi: Tilted Dirac fermions in lattice models with generalized chiral symmetry, Invited talk (January 6) in the international workshop “Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts” (BEC2018), January 5-8, 2018, University of Tsukuba, Japan.
- 9) S. Fujisawa and T. Kawarabayashi: Topological properties of q-deformed Wilson-Dirac model, Poster presentation in the international workshop “Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts” (BEC2018), January 5-8, 2018, University of Tsukuba, Japan.
- 10) M. Hirasaka, R. Itagaki, Y. Hatsugai, H. Aoki, T. Kawarabayashi: Numerical study of irrational charges in fermion-vortex system”, Poster presentation in the international workshop “Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts (BEC2018), January 5-8, 2018, University of Tsukuba, Japan.
- 11) K. Ishii, Y. Hatsugai, T. Kawarabayashi: Topological characterization of quantum phases in an anisotropic Kagome magnet, Poster presentation in the international workshop “Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts” (BEC2018), January 5-8, 2018, University of Tsukuba, Japan.
- 12) 河原林透、青木秀夫、初貝安弘：フラットバンド格子模型におけるディラック電子系の代数的変形、日本物理学会2017年秋季大会、2017年9月24日（岩手大学）
- 13) Tohru Kawarabayashi, Hideo Aoki, Yasuhiro Hatsugai: Topological Description of Tilted Dirac Fermions with/without Mass, Poster presentation (August 3) in the 22nd international conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (EP2DS-22), July 31- August 4, 2017, Penn State University, State College, PA, USA.
- 14) 河原林透、青木秀夫、初貝安弘：格子模型の擬ゼロモードのトポロジカル安定性、日本物理学会第72回年次大会、2017年3月17日（大阪大学）
- 15) Tohru Kawarabayashi: Deformation of Dirac fermions with invariant zero modes, Invited talk (September 27) in the Yukawa Institute for Theoretical Physics (YITP) international workshop “Physics of bulk-edge correspondence and its universality: From solid state physics to cold atoms”, September 27- 30, 2016, Kyoto, Japan.
- 16) R. Itagaki, H. Aoki, Y. Hatsugai, and T. Kawarabayashi: Irrational charges of fermion-vortex systems: robustness against disorder, Poster presentation (September 27) in The Yukawa Institute for Theoretical Physics (YITP) international workshop “Physics of bulk-edge correspondence and its universality: From solid state physics to cold atoms”, September 27- 30, 2016, Kyoto, Japan.
- 17) 板垣諒、初貝安弘、青木秀夫、河原林透：二次元ディラック電子系の vortex に伴う非分数電荷のランダムネスに対する安定性、日本物理学会2016年次秋季大会、2016年9月16日（金沢大学）
- 18) 河原林透、青木秀夫、初貝安弘：傾いたディラック電子を持つ格子模型の連続変形、日本物理学会2016年次秋季大会、2016年9月14日（金沢大学）
- 19) Tohru Kawarabayashi: Zero modes of two-dimensional tilted Dirac fermions with vortices, Poster presentation (June 14) in the international conference “Graphene week 2016”, June 13-17, 2016, Warsaw, Poland.
- 20) 河原林透、初貝安弘、青木秀夫：一般化されたカイラル対称性を持つ格子模型、日本物理学会第71回年次大会、2016年3月22日（東北学院大学）

## 6. 研究組織

### (1) 研究分担者

研究分担者氏名：

ローマ字氏名：

所属研究機関名：

部局名：

職名：

研究者番号（8桁）：

※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、研究者個人に帰属されます。