

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

|                   |                                                                                                                                                                                            |
|-------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 題目(和文)            | トポロジカル結晶絶縁体における、2次のバルク・境界対応                                                                                                                                                                |
| Title(English)    | Second-order bulk-boundary correspondence in topological crystalline insulators                                                                                                            |
| 著者(和文)            | 高橋亮                                                                                                                                                                                        |
| Author(English)   | Ryo Takahashi                                                                                                                                                                              |
| 出典(和文)            | 学位:博士(理学),<br>学位授与機関:東京工業大学,<br>報告番号:甲第11876号,<br>授与年月日:2021年3月26日,<br>学位の種別:課程博士,<br>審査員:村上 修一,齋藤 晋,西田 祐介,石塚 大晃,打田 正輝                                                                     |
| Citation(English) | Degree:Doctor (Science),<br>Conferring organization: Tokyo Institute of Technology,<br>Report number:甲第11876号,<br>Conferred date:2021/3/26,<br>Degree Type:Course doctor,<br>Examiner:,,,, |
| 学位種別(和文)          | 博士論文                                                                                                                                                                                       |
| Category(English) | Doctoral Thesis                                                                                                                                                                            |
| 種別(和文)            | 論文要旨                                                                                                                                                                                       |
| Type(English)     | Summary                                                                                                                                                                                    |

# 論文要旨

## THESIS SUMMARY

|                                            |            |          |                                                        |        |
|--------------------------------------------|------------|----------|--------------------------------------------------------|--------|
| 系・コース：<br>Department of, Graduate major in | 物理学<br>物理学 | 系<br>コース | 申請学位 (専攻分野)： 博士<br>Academic Degree Requested Doctor of | ( 理学 ) |
| 学生氏名：<br>Student's Name                    | 高橋 亮       |          | 指導教員 (主)：<br>Academic Supervisor(main)                 | 村上 修一  |
|                                            |            |          | 指導教員 (副)：<br>Academic Supervisor(sub)                  |        |

### 要旨 (和文 2000 字程度)

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters )

トポロジカル絶縁体は、内部は絶縁体であるが、物質表面に特異な伝導状態を有する。この伝導状態の主な性質は表面の詳細によらず、バルク・境界対応により物質内部 (バルク) の電子波動関数のトポロジによって決まる。従来のトポロジカル絶縁体では、 $d$  次元物質の表面に  $(d-1)$  次元の伝導状態が出現していた。近年、結晶対称性に保護されたトポロジカル絶縁体 (トポロジカル結晶絶縁体) の一部で、表面に  $(d-2)$  次元の伝導状態が出現する事が発見された。この関係は一般化され、 $d$  次元のバルクの波動関数のトポロジと  $(d-n)$  次元の伝導状態の対応は、 $n$  次のバルク・境界対応と呼ばれるようになった。 $n$  が 2 以上の高次のバルク・境界対応を持つトポロジカル絶縁体は、高次トポロジカル絶縁体 (HOTI) と呼ばれる。

3 次元の 2 次トポロジカル絶縁体は、内部と表面は絶縁体であるが、2 つの表面の交わりであるヒンジ部分に局在したギャップレスヒンジ状態を持つ。2 次元の 2 次トポロジカル絶縁体は、内部と端は電荷中性な絶縁体であるが、角に局所的な過剰分数電荷があり、多くの場合角に局在したコーナー状態を伴う。先行研究により、これらの局在状態は 2 次のバルク・境界対応によって、バルクのトポロジと結び付けられる事が明らかとなった。しかしながら、その証明は性質の良いハミルトニアンに限られており、一般の系に適用可能な証明は与えられていなかった。本博士論文では、2 つの重要な種類の高次トポロジカル絶縁体である、空間反転対称性に保護された 3 次元高次トポロジカル絶縁体と回転対称性に保護された 2 次元高次トポロジカル絶縁体について、現実的な系も含めた一般の系に適用可能な 2 次のバルク境界対応を研究した。

最初に、時間反転対称性を持たない空間反転対称な 3 次元高次トポロジカル絶縁体について、その 2 次元スラブ系がチェーン絶縁体であることを示した。証明には、切断手法と呼ばれる、開境界条件と周期境界条件を連続的に結び付ける手法を用いた。連続的に切断面が導入される際のエネルギースペクトルの変化 (スペクトラルフロー) を調べ、高次トポロジカル絶縁体のフローが、従来のトポロジカル絶縁体や自明な絶縁体とは明らかに異なるふるまいを示すことを明らかにした。フローの概形は 3 次元バルクのトポロジカル数で決まり、フローに伴う反転固有値の変化から 2 次元スラブ系のチェーン数の偶奇が決まる。特に、3 次元の高次トポロジカル絶縁体では、スラブ系のチェーン数が奇数になる、即ち非ゼロになる事を示した。ヒンジ状態の存在は、2 次元スラブ系のチェーン数と従来のバルク・境界対応から理解できる。また、スペクトラルフローを用いた解析は、1 次元や 2 次元の空間反転対称な絶縁体にも有効であることを見出し、従来のバルク・境界対応に新たな視点からの証明を与えた。これらの証明は、時間反転対称性を持つ系にも拡張可能である事も示した。特に、時間反転対称性がある場合には、3 次元高次トポロジカル絶縁体の 2 次元スラブ系が、時間反転対称な  $Z_2$  トポロジカル絶縁体になる事を示した。本論文の結果により、空間反転対称な物質に現れるヒンジ状態とトポロジカル数の関係がより明確になった。

次に、回転対称な 2 次元高次トポロジカル絶縁体について、量子化された分数コーナー電荷が出現する事の証明を、従来よりも明確な形で議論した。証明には、1 次元系で電気分極と表面電荷の対応を示す際に用いられていた領域分割を、2 次元系に拡張して用いた。領域分割を用いることで、電子状態が表面で大きく変調されている場合にも、分数コーナー電荷が出現し得ることが明確化された。また、時間反転対称性が無い場合と、時間反転対称性  $\Theta$  がある場合 ( $\Theta^2 = +1$  or  $-1$ ) の 3 つの場合について、一般的なコーナー電荷公式を導出した。導出の際、エッジが電荷中性であることは仮定しているが、先行研究とは異なり、バルクの電気分極の消失は仮定していない。バルクが電気分極を持つ場合、表面の出し方によってはエッジが電荷中性でなくなるため、従来の理論では分極の消失が仮定されていた。しかし、

ミラー指数の高い表面や表面再構成のある表面など、より一般的な表面の出し方を考慮すると、バルクの分極が 0 で無い場合でもエッジが電荷中性となりうる。我々は、そのような場合にも従来と同様のコーナー電荷公式が成立する事を、より明確に議論し、コーナー電荷公式の適用範囲を拡大した。また、バルクの分極が 0 で無い場合、バルクが同じ結晶であつても、結晶中心のワイコフ位置の違いによって、コーナー電荷の値が変化することを見出した。コーナー電荷の結晶中心依存性は、別の見方をすると、コーナー電荷が角の出し方にも依存する場合がある事を示しているとも言える。本論文の結果は、従来はバルク電気分極が 0 で無いために見落とされてきた、コーナー電荷を持つ新しい候補物質を見つけるのに役立つと期待される。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).

# 論文要旨

## THESIS SUMMARY

|                                            |            |          |                                           |                 |      |
|--------------------------------------------|------------|----------|-------------------------------------------|-----------------|------|
| 系・コース：<br>Department of, Graduate major in | 物理学<br>物理学 | 系<br>コース | 申請学位 (専攻分野)：<br>Academic Degree Requested | 博士<br>Doctor of | (理学) |
| 学生氏名：<br>Student's Name                    | 高橋 亮       |          | 指導教員 (主)：<br>Academic Supervisor(main)    | 村上 修一           |      |
|                                            |            |          | 指導教員 (副)：<br>Academic Supervisor(sub)     |                 |      |

### 要旨 (英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words )

Conventional topological insulators have anomalous surface states due to the bulk-edge correspondence. In recent years, new kind of topological insulators with unconventional bulk-boundary correspondence are found. They are called second-order topological insulators (SOTIs). Three-dimensional SOTIs are insulating in bulk and surfaces, but they have anomalous gapless hinge states at the hinges, which are intersections of two surfaces. Two-dimensional SOTIs are insulating in bulk and edges, but they have excess fractional charges on the corners and often corner states as well. In this thesis, we study the second-order bulk-boundary correspondence from a general standpoint for two important types of SOTIs: three-dimensional SOTIs protected by inversion symmetry and two-dimensional SOTIs protected by rotational symmetry.

Firstly, we show that a slab of a 3D inversion-symmetric SOTI in class A is a 2D Chern insulator. We prove it by considering a process of cutting the 3D inversion-symmetric SOTI along a plane, and study the spectral flow in the cutting process. We show that the indicators, which characterize 3D inversion-symmetric SOTIs in class A is directly related to the indicators for the corresponding two-dimensional slabs with inversion symmetry, i. e. the Chern number parity. The existence of the gapless hinge states is understood from the conventional bulk-edge correspondence between the slab system and the hinge states. We have also obtained similar results for 3D inversion-symmetric SOTIs with time-reversal symmetry (class AII).

Secondly, we derive a general formula for the quantized fractional corner charge in 2D  $C_n$ -symmetric SOTIs. We assume that the edges are charge-neutral, but we do not assume vanishing bulk electric polarization. We expand the scope of the corner charge formula by considering more general surface conditions, such as surfaces with higher Miller index and surfaces with surface reconstruction. Our theory applies to insulators with non-vanishing bulk polarization, and we find that in such cases the value of the corner charge depends on the surface termination even for the same bulk crystal, via a difference in the Wyckoff position of the center of the  $C_n$ -symmetric crystal. Our results can be helpful in finding new candidate materials with corner charges.

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note：Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).