

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	トポロジカル半金属におけるトポロジカル表面状態間の相互作用
Title(English)	Interplay between topological surfaces states in topological semimetals
著者(和文)	原大輔
Author(English)	Daisuke Hara
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第12313号, 授与年月日:2023年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:村上 修一,齋藤 晋,古賀 昌久,西田 祐介,打田 正輝
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第12313号, Conferred date:2023/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	要約
Type(English)	Outline

論文要約

THESIS OUTLINE

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

要旨 (和文 2000 字程度)

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters)

量子ホール効果の発見以来、トポロジカル相は凝縮系物理の中で最も研究されているテーマの1つです。これまで多くの研究で、トポロジカル相の性質や現象が理論的にも実験的にも調査されてきました。例えば、トポロジカル物質では、バルクの波動関数によって計算されるトポロジカル不変量と、表面や界面に局在するトポロジカル表面状態の間に、バルク・エッジ対応が見られます。このように、物質のトポロジーは興味深い性質を持つため、長い間研究されてきました。

当初、電子の波動関数のトポロジーはトポロジカル絶縁体相のみで定義されていましたが、様々な研究によりトポロジカル半金属相にも拡張されていきました。ディラック半金属相やワイル半金属相などのトポロジカル半金属相では、新たな粒子であるワイルフェルミオンやディラックフェルミオンが出現し、電子の波動関数のトポロジーの研究は新たな分野に進みました。また、ディラック半金属やワイル半金属やノーダルライン半金属などのトポロジカル半金属は、それらの表面に特徴的な表面状態が出現するために、多くの研究が行われてきました。近年、これらのトポロジカル半金属同士が重ね合わさった新しいトポロジカル材料が提案されました。それぞれのトポロジカル半金属の表面状態はよく知られていますが、これらの表面状態間の相互作用はよくわかっていません。

最初に、ワイル半金属とノーダルライン半金属が共存する系の表面状態を調べます。この二つトポロジカル半金属はバルク中に特徴的なギャップレス状態を持ち、ワイル半金属では0次元の縮退であるワイル点、ノーダルライン半金属では1次元の縮退であるノーダルリングがあります。また、この物質に表面が存在すると、フェルミアークやドラムヘッド表面状態が出現します。本論文では最低限の対称性のみを仮定した有効模型を用いて、ワイル点とノーダルリングの両方を持つ物質の一般的な表面状態を計算しました。驚くべきことに、このような系ではバルク状態と表面状態が混ざった状態が出現し、表面を出す方向によって表面状態が大きく変化することを見出しました。また、私たちは表面状態の波動関数の侵入長を見ることによって、表面状態の波動関数の特徴的な振る舞いを見つけました。最後に、これらの結果を共同研究者が計算した密度汎関数計算の結果と比較しました。

次に、ワイル半金属同士の表面状態間の相互作用を研究しました。通常、ベリー曲率のモノポール電荷が逆であるワイル点同士を重ね合わせると、ディラック点はギャップを開けます。しかし、時間反転対称性と映進対称性を持つ系では、ディラック点はギャップを開けずに2重のヘリコイド状態が現れ、二枚の映進不変面を持つ系では4重のヘリコイド表面状態が現れることが提案されていました。先行研究では2重および4重のヘリコイド表面状態を分類するZ2トポロジカル不変量が提案されていましたが、本論文ではこのトポロジカル不変量の問題点を発見しました。そこ

で、本論文では強束縛模型と解析計算により、多重ヘリコイド表面状態の出現する条件を示しました。その結果、時間反転対称性と映進対称性を持つトポロジカル半金属を特徴付けるトポロジカル不変量が映進対称性で保護された Z_2 トポロジカル不変量と等しいことがわかりました。また、この結果を用いて4重のヘリコイド表面状態を持つ候補物質を提案しました。

最後に、時間反転対称性と映進対称性の積のみを持つワイル半金属同士の表面状態間の相互作用を研究しました。このような系では映進対称性がないので、先ほどのようにトポロジカル普遍量を映進対称性で保護された Z_2 トポロジカル不変量に帰着させることができません。私たちは、このような系でのバルク表面对応を確立するために、時間反転対称性と映進対称性の積のみの対称性を持つ強束縛模型の計算を行いました。その結果を踏まえて、この系の Z_2 トポロジカル不変量を導入し、その定義と表面状態との対応を示しました。

トポロジカル絶縁体では、常にギャップが開いているため、トポロジカル不変量およびそれらの表面状態の特性はよく理解されています。一方、トポロジカル半金属はバルク内でバンドが閉じているので、トポロジカル不変量を定義することは一般に困難です。従って、トポロジカル半金属がトポロジカル結晶絶縁体と同じトポロジカル不変量に従うという本論文の結果はトポロジカル半金属におけるトポロジーの理解を深める新奇な発見です。本論文で議論した対称性は、基本的な結晶対称性の一つであり、別の空間群対称性を持つトポロジカル半金属のトポロジカル不変量の定義に広く適用できると考えられます。この論文の結果は、新しいタイプのトポロジカル半金属の発見や現象の探求に役立つと期待しています。

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 1 copy 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).