

関西学院大学大学院 修士論文審査会

2019年2月13日

---

# A<sub>3</sub>B二次元蜂の巣格子におけるザック位相と トポロジカルエッジ状態に関する理論的研究

---

関西学院大学大学院 理工学研究科 物理学専攻

若林物質設計理論研究室

亀田 智明

# 目次

## 序論

トポロジーとは

量子ホール系

トポロジカル絶縁体

ベリ一位相

ザック位相

## 研究 概要

目的

着眼点

$h\text{-}A_3B$  モデル

強束縛近似模型

密度汎関数理論

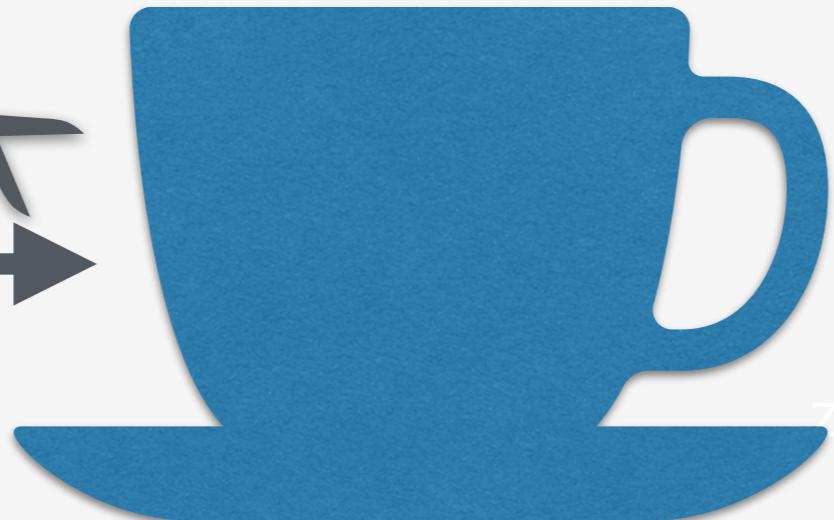
まとめ

ものの「形」を分類する数学



ボール

穴の数 = 0

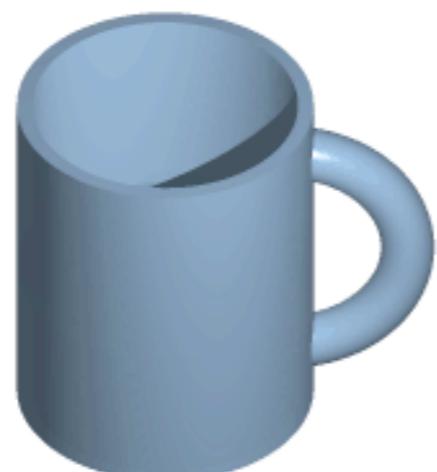


カップ



ドーナツ

穴の数 = 1



カップ～ドーナツ



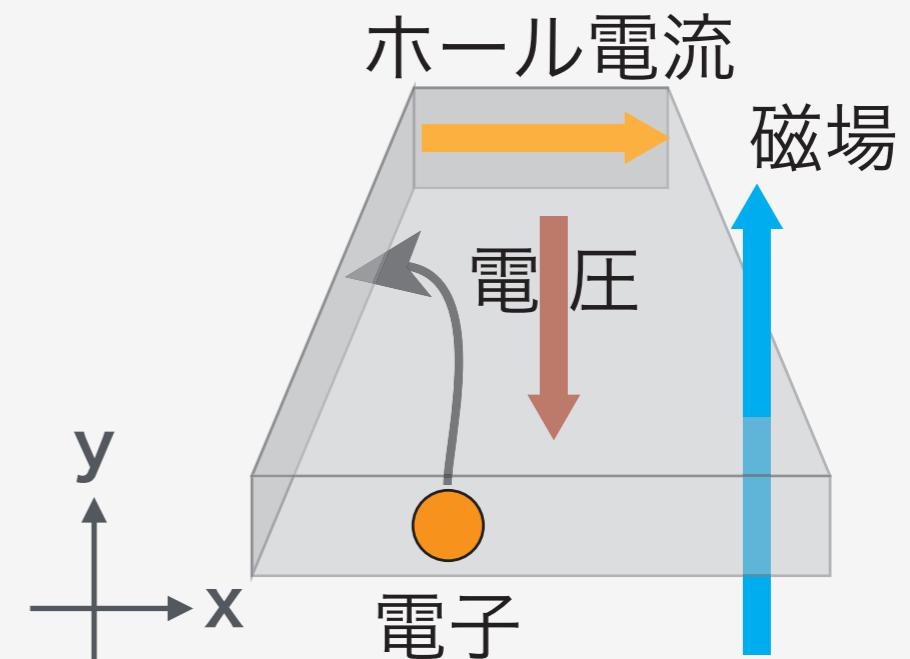
連續変形で互いに入れ替わる

## 1 ホール伝導率の量子化

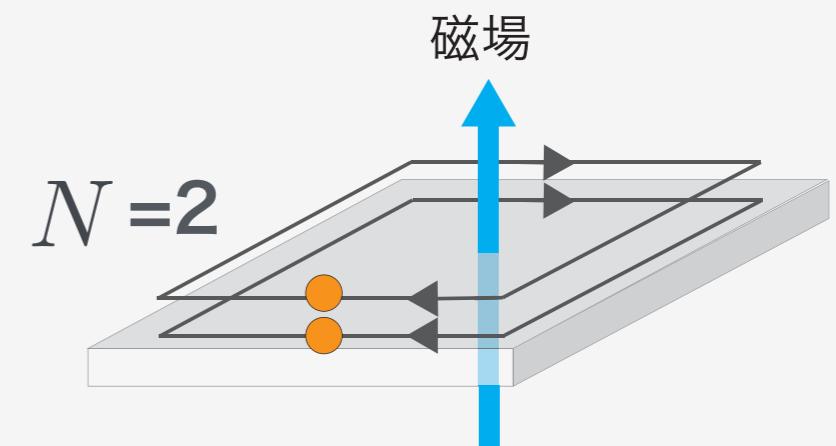
$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} N$$

$\sigma_{xy}$ : ホール伝導率  
 $e$ : 電気素量

$h$ : プランク定数  
 $N$ : 整数値



## 2 試料の端にN本のトポロジカルエッジ状態

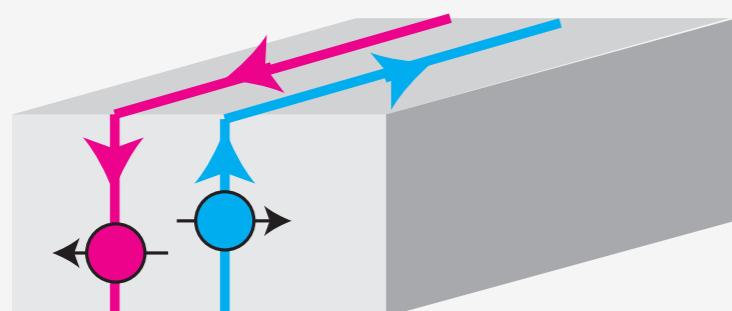


## 3 時間反転対称性の破れ



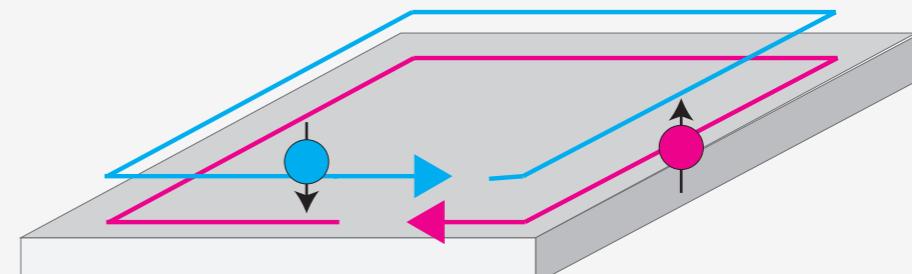
## 量子 спинホール系

三次元



アップスピン電子 ダウンスピン電子

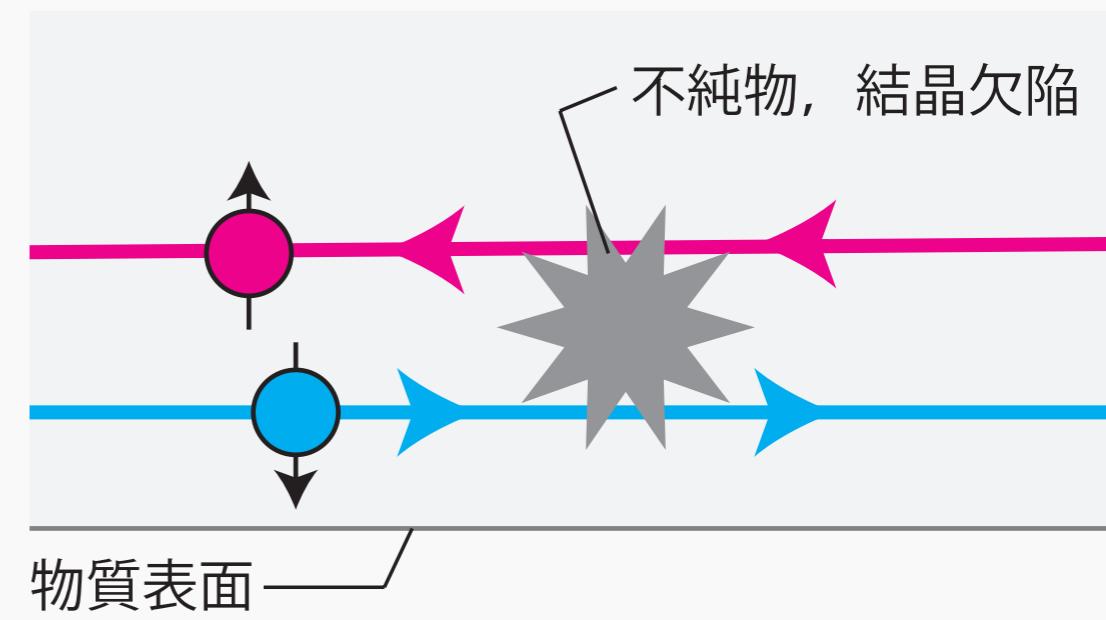
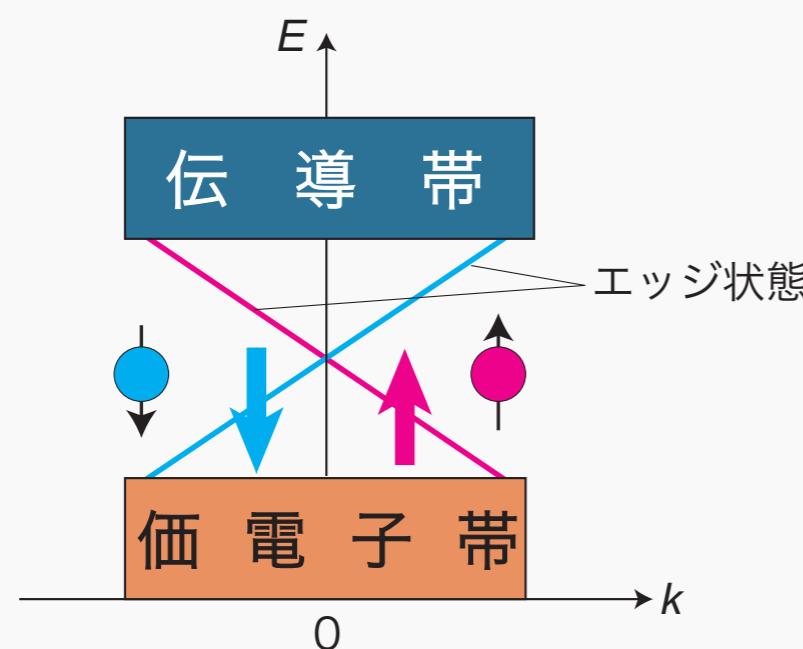
二次元



結晶内部 → 絶縁体

結晶表面 → 伝導体 (純スピン流)

ギャップレスエッジ状態



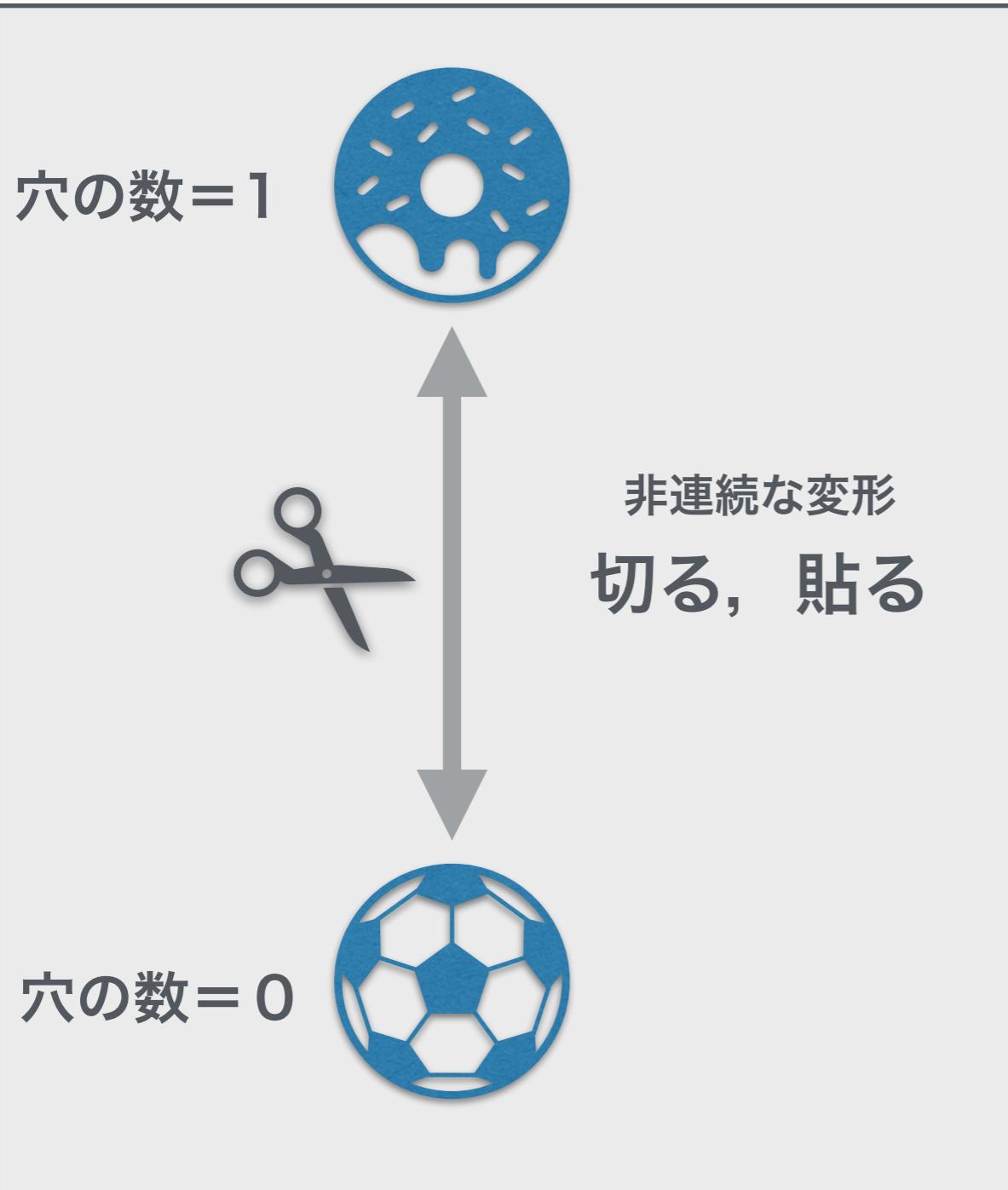
物質表面

# なぜ表面にのみ伝導状態が出現するのか？

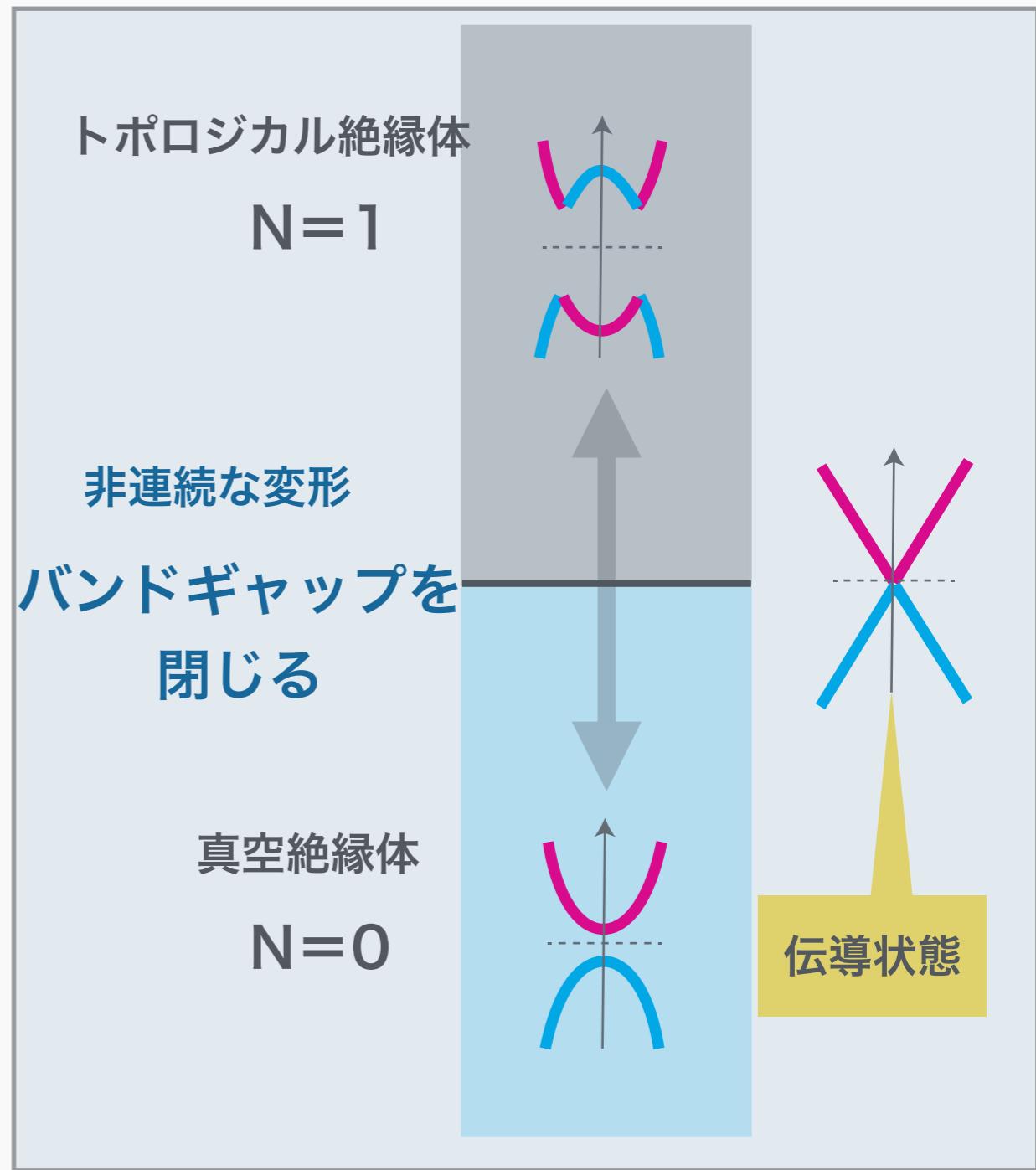
5

## トポロジーを利用した量子物性の理解

### 素朴な例



### 量子物性

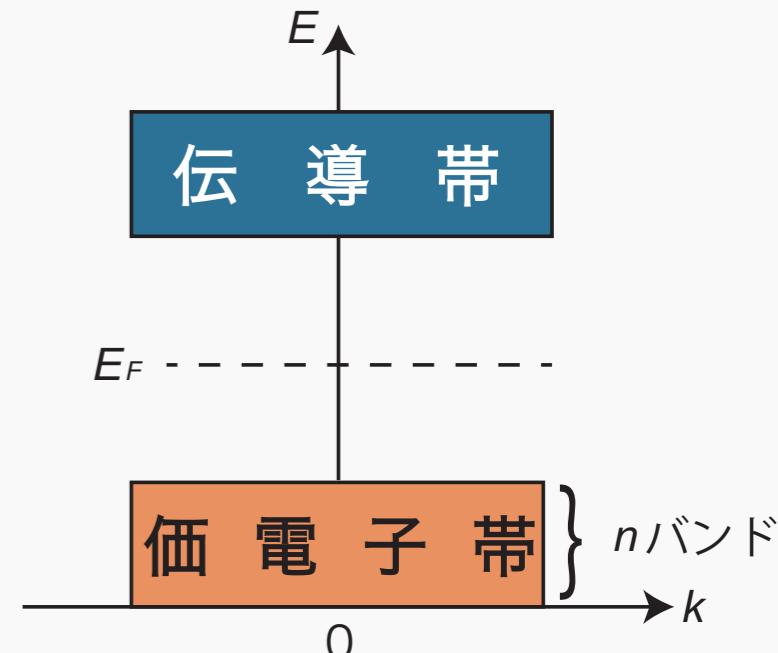


# ここまで学んだトポロジカル量 | ベリーワン相(ベリー曲率) 6

ホール伝導率

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} N$$

$$N = \frac{1}{2\pi} \sum_{n:filled} \int_{BZ} d^2k \mathcal{F}_n$$

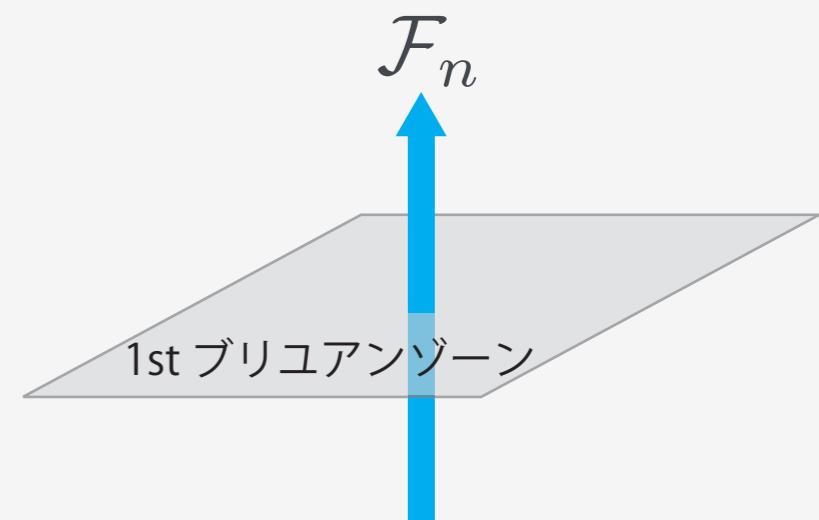


ベリーワン相

$$\int_{BZ} d^2k \mathcal{F}_n$$

$\mathcal{F}_n$  : ベリー曲率  
||

波数空間における磁場



$N$  が有限  $\leftrightarrow$  ベリー曲率  $\mathcal{F}_n$  が有限

# 疑問 | ベリー曲率がゼロであってもエッジ状態を持つ例 7



「ベリー曲率がゼロならエッジ状態は現れない？」

1 時間反転対称性

$$\mathcal{F}(k) = -\mathcal{F}(-k)$$

2 空間反転対称性

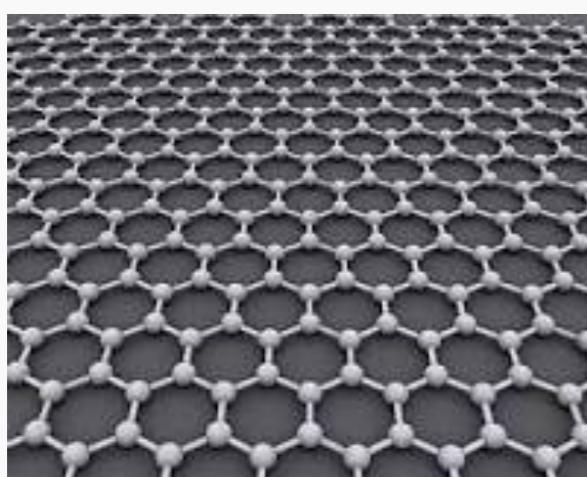
$$\mathcal{F}(k) = \mathcal{F}(-k)$$



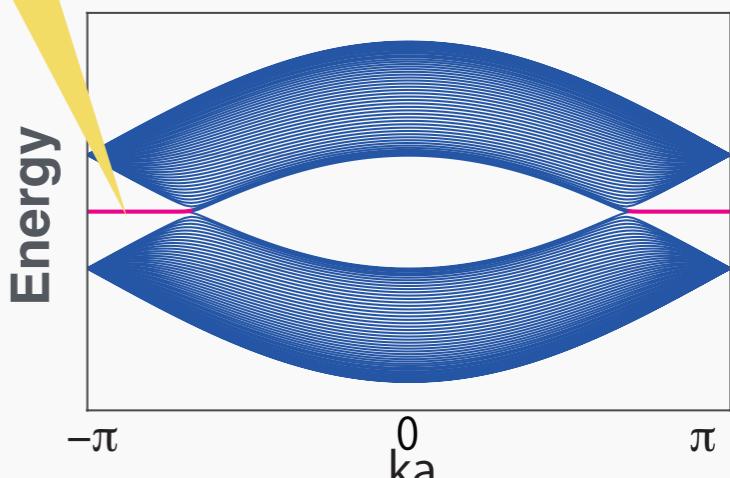
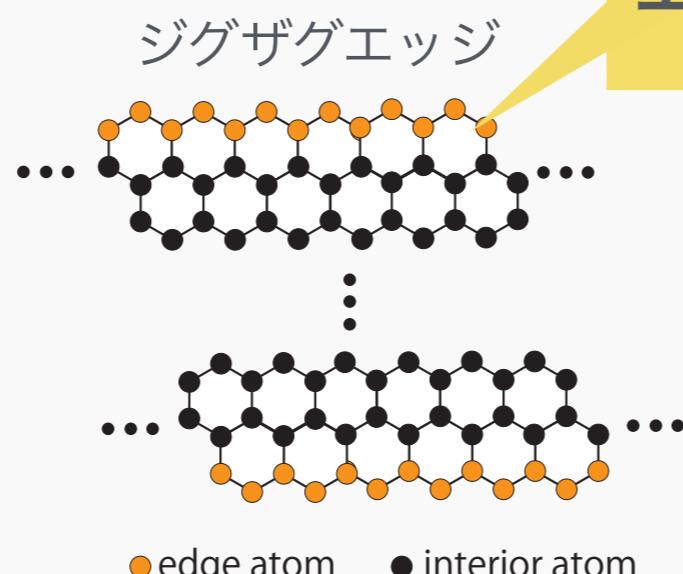
$$\mathcal{F}(k) = 0$$

グラフェンは

1 2 を満たすが…



<https://ja.wikipedia.org/wiki>



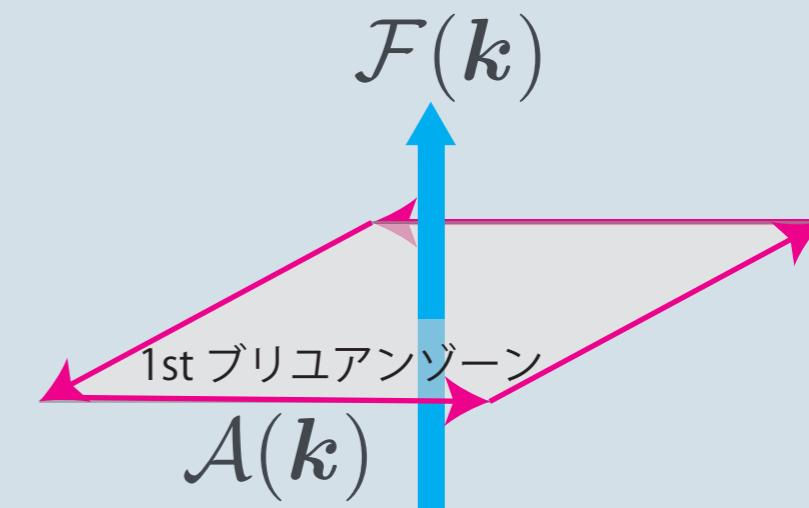
「ベリー曲率がゼロでもエッジ状態が現れる！」

## ザック位相

$$\mathcal{Z} = \int_{BZ} dk \mathcal{A}(k)$$

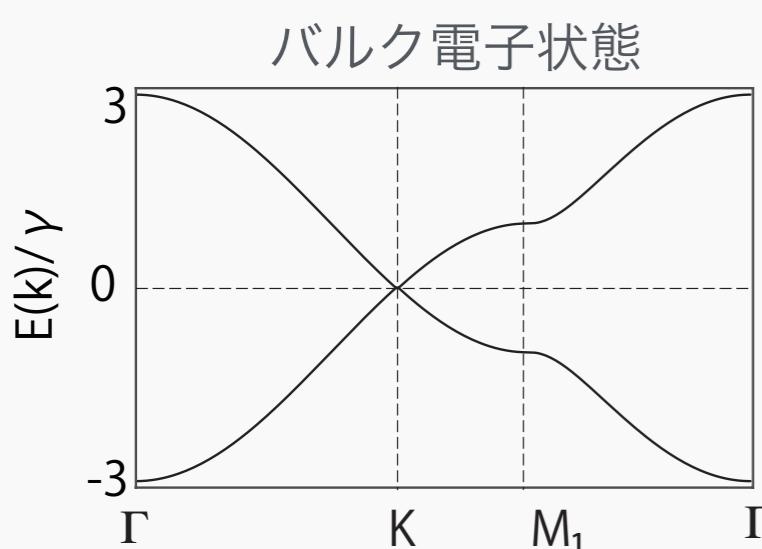
ベリー曲率  $\mathcal{F}(k) = \nabla \times \mathcal{A}(k)$

ベリー接続  $\mathcal{A}(k) = i \langle k | \nabla_k | k \rangle$



波数空間におけるベクトルポテンシャル

グラフェンの場合…



ザック位相を計算…

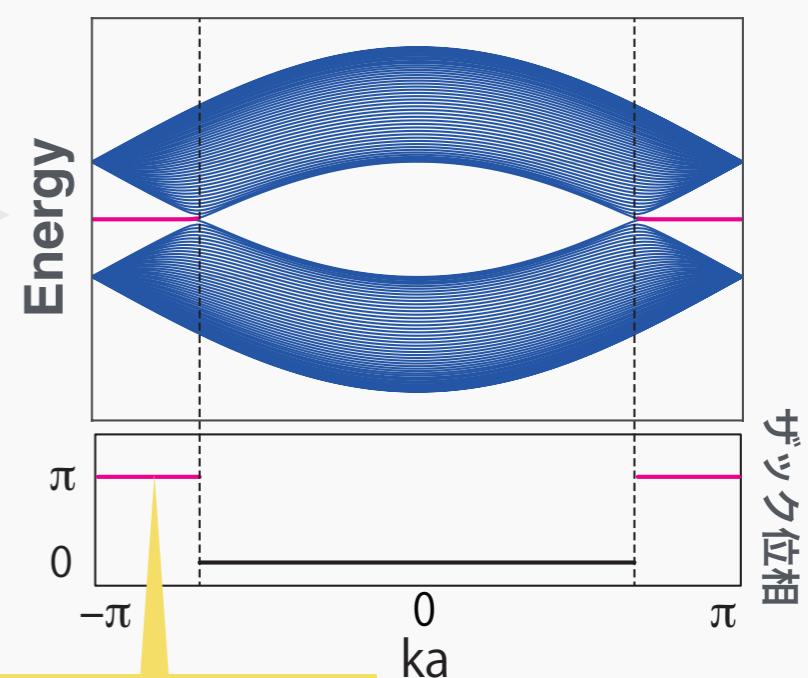
$$\mathcal{Z} = \sum_{n:filled} \mathcal{Z}^n$$

$$\mathcal{Z}^n = \pi (q^n \bmod 2)$$

$$(-1)^{q^n} = \frac{\eta^n(M)}{\eta^n(\Gamma)}$$

$\eta^n$ : 波動関数のパリティ

ジグザグナノリボン電子状態



「ザック位相でエッジ状態の有無がわかる！」

$P$  : 電気分極

$$P = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} dk \mathcal{A}(k)$$

電気分極 = ザック位相

$P = 0$  電荷の偏りなし



$P = 1/2$  電荷の偏りあり

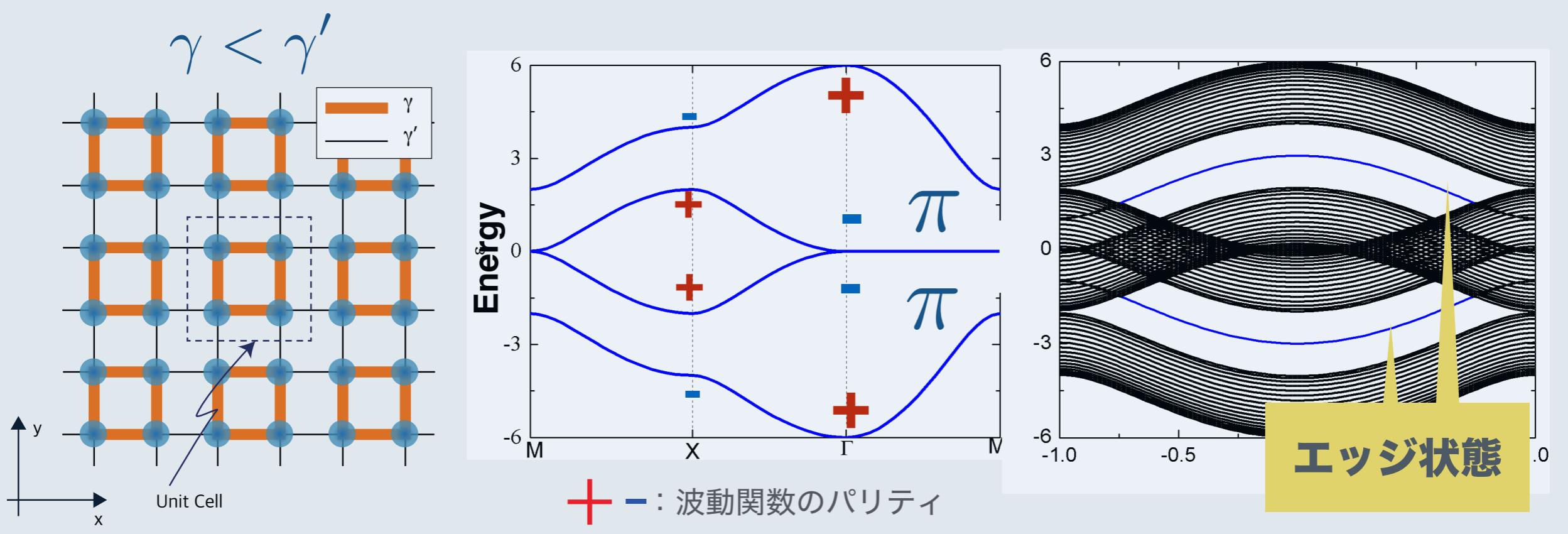
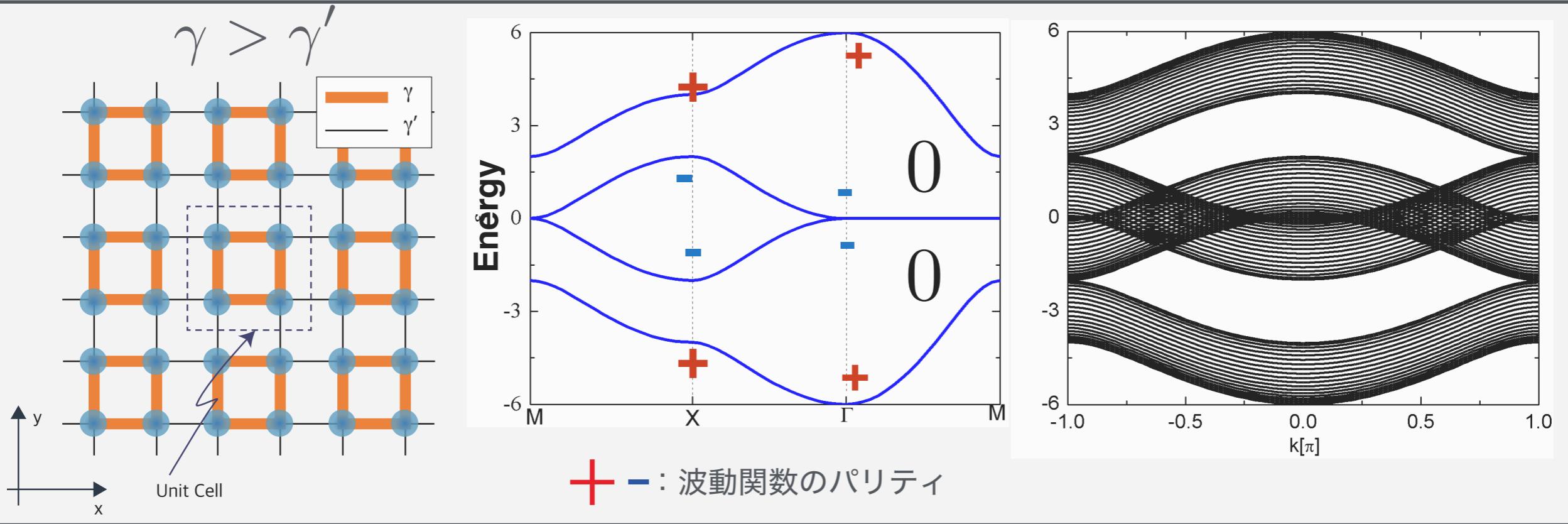


エッジ状態なし

エッジ状態あり

ザック位相(電気分極)が有限  $\leftrightarrow$  エッジ状態が現れる

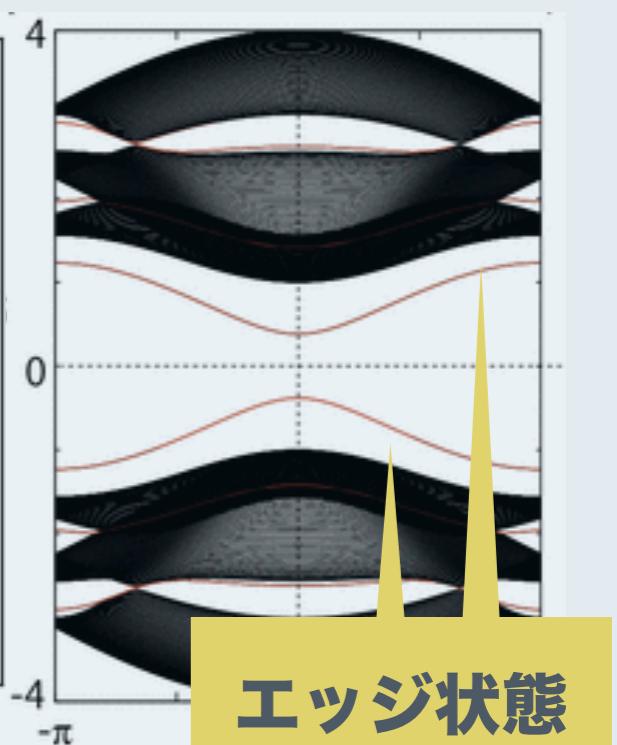
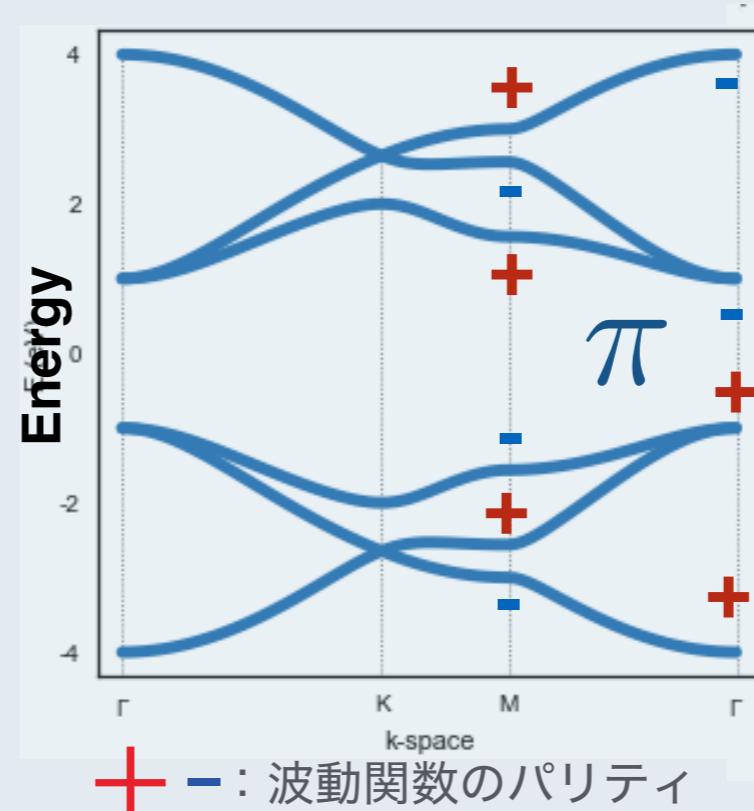
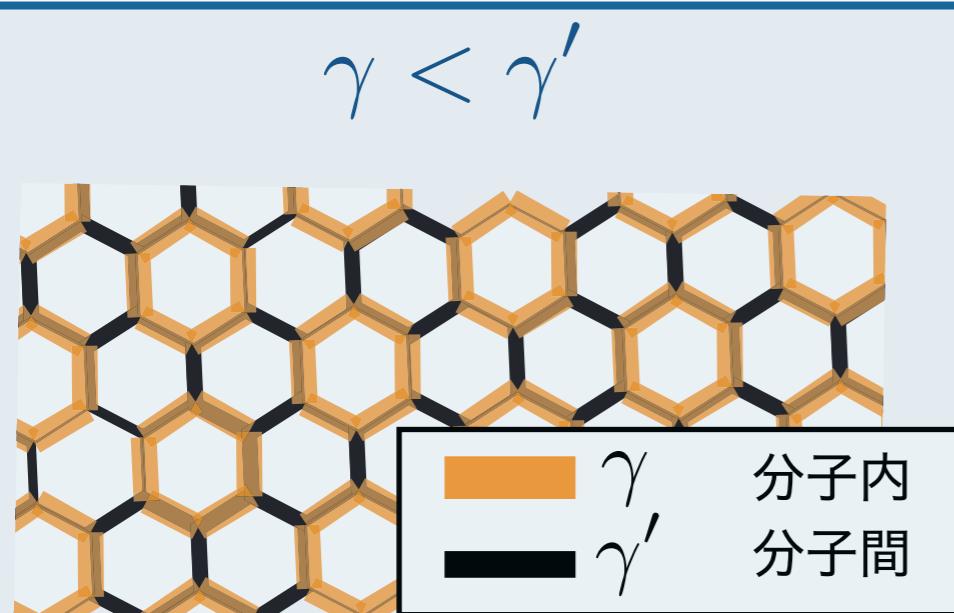
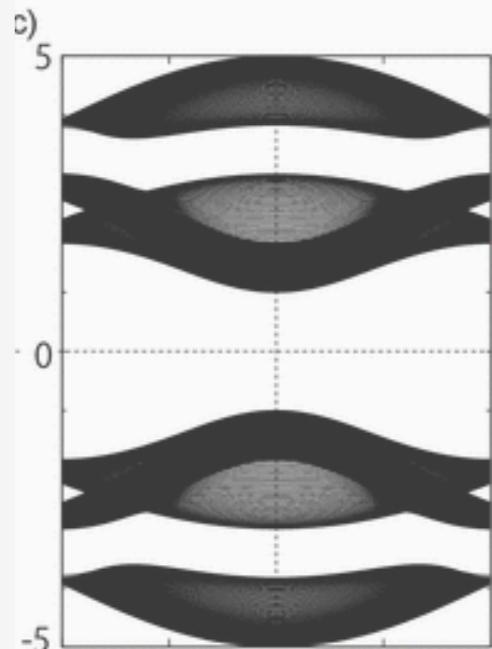
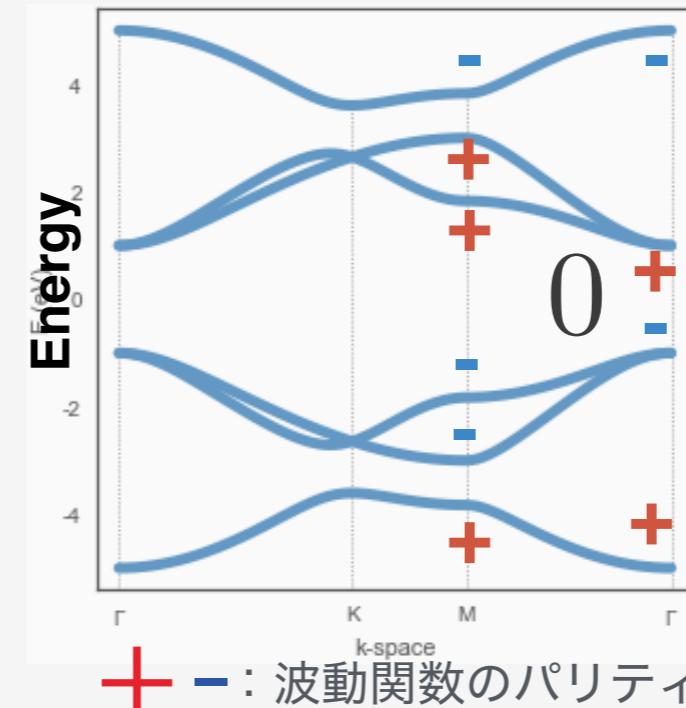
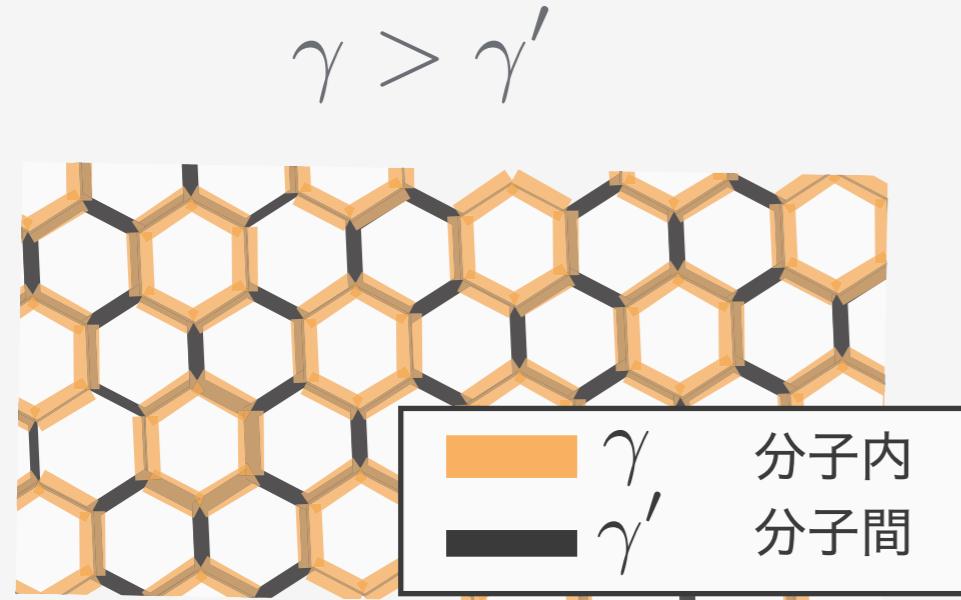
F. Liu and K. Wakabayashi Phys. Rev. Lett. (2017)



# ザック位相が有限となるモデル例

# h-2D SSH モデル 11

F. Liu, M. Yamamoto, K. Wakabayashi, JPSJ (2017)



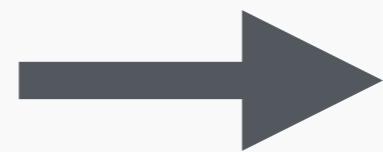
エッジ状態

1 時間反転対称性

$$\mathcal{F}(k) = -\mathcal{F}(-k)$$

2 空間反転対称性

$$\mathcal{F}(k) = \mathcal{F}(-k)$$



$$\mathcal{F}(k) = 0$$

## ベリー位相

$$\int_{BZ} d^2 k \mathcal{F}(k)$$

ベリー曲率  $\mathcal{F}(k) = \nabla \times \mathcal{A}(k)$

トポロジカル量として機能しない

## ザック位相

$$\int_{BZ} dk \mathcal{A}(k)$$

ベリー接続  $\mathcal{A}(k) = i \langle k | \nabla_k | k \rangle$

トポロジカル量として機能する

ベリー曲率ゼロの場合でもザック位相でトポロジカル相を定義できる

## 序論

トポロジーとは

量子ホール系

トポロジカル絶縁体

ベリ一位相

ザック位相

## 研究 概要

目的

着眼点

$h\text{-A}_3\text{B}$  モデル

強束縛近似模型

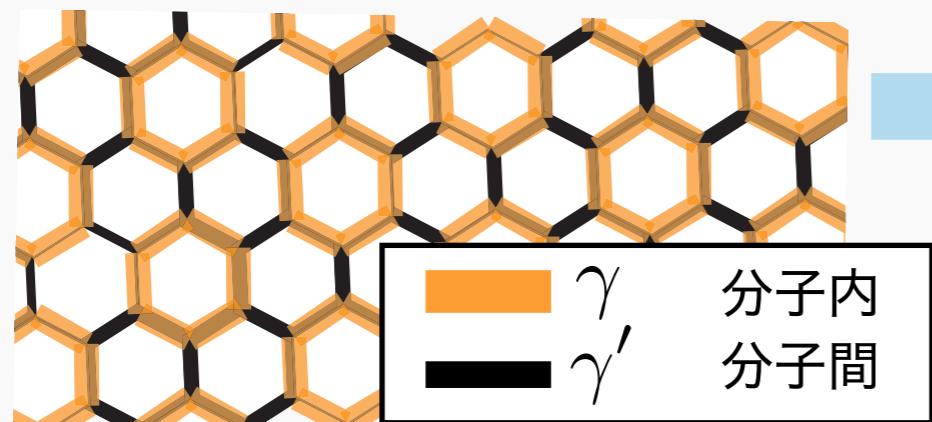
密度汎関数理論

まとめ



目的： ザック位相が有限となる具体的な物質の探索

h-2D SSH モデルは…



DFT計算で構成出来ない構造



課題： 「ホッピングの変調をどのように実現するか？」

二種類の原子を考えると…



ホッピングが変化する

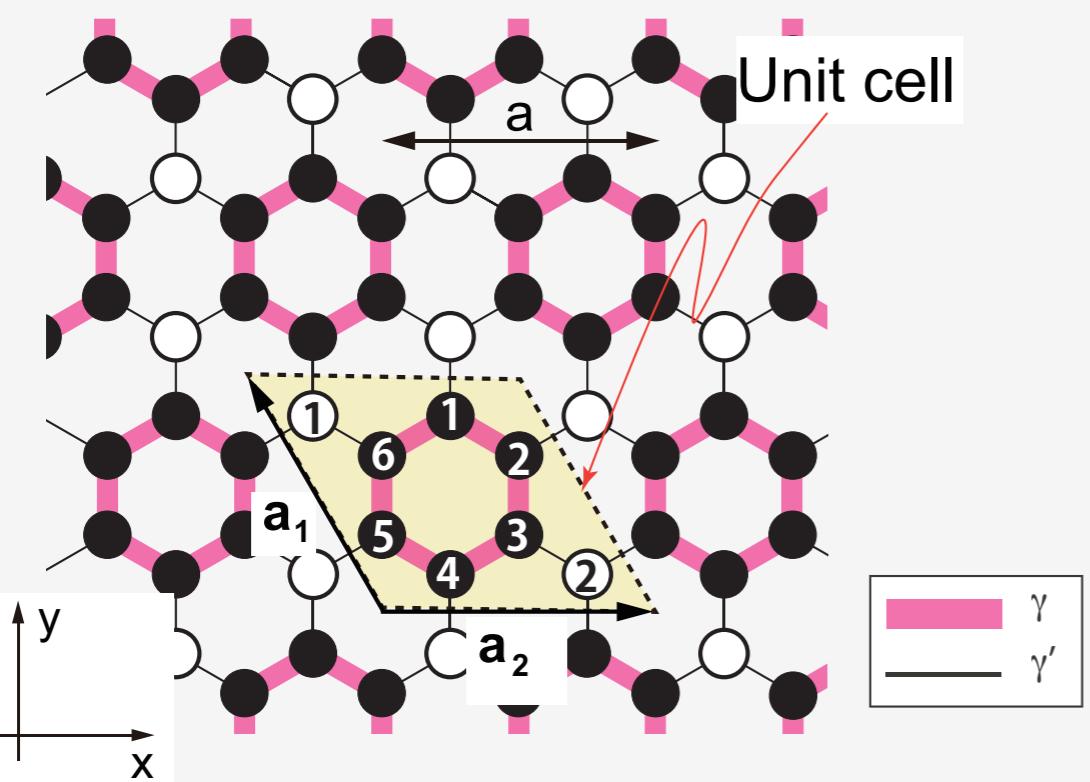


発想： 「二種類の原子で構成される結晶構造を考える」

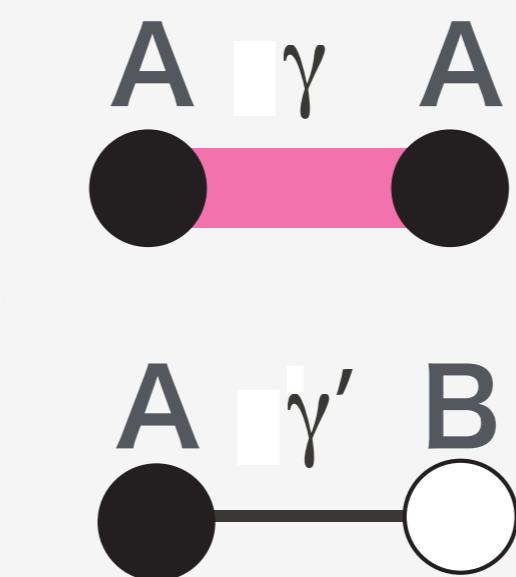
1 ハニカム格子

2 二原子種

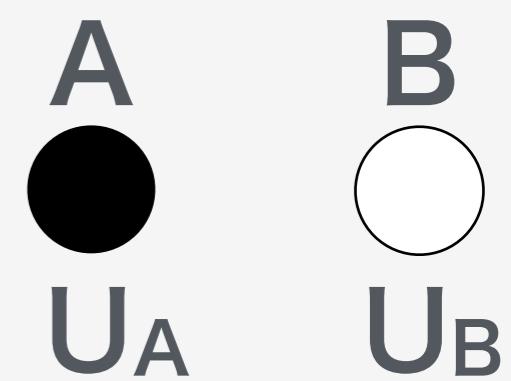
3 空間反転対称性



## A<sub>3</sub>B二次元蜂の巣格子



二種類のホッピング



二種類のオンサイト  
エネルギー

仮説：「h-C<sub>3</sub>N膜結晶はザック位相が有限となるトポロジカル物質である」

## 検証手順

STEP 1

強束縛近似模型

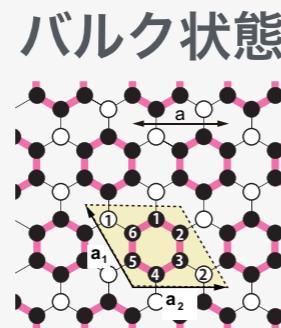
h-A<sub>3</sub>B構造においてザック位相とエッジ状態に相関があるのか

STEP 2

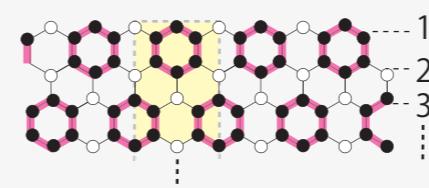
第一原理計算

h-C<sub>3</sub>N膜結晶がトポロジカルエッジ状態を持つのか

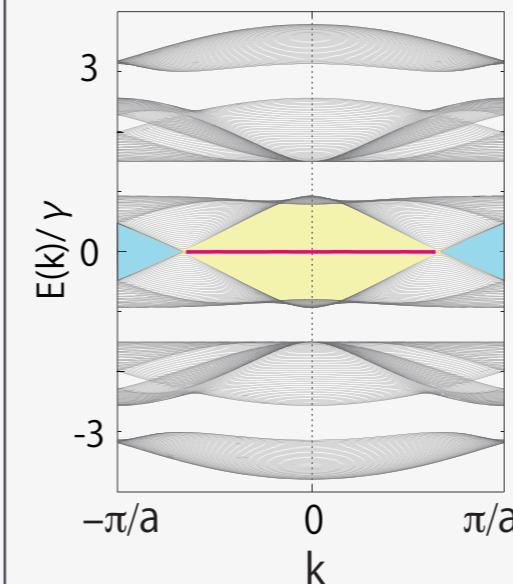
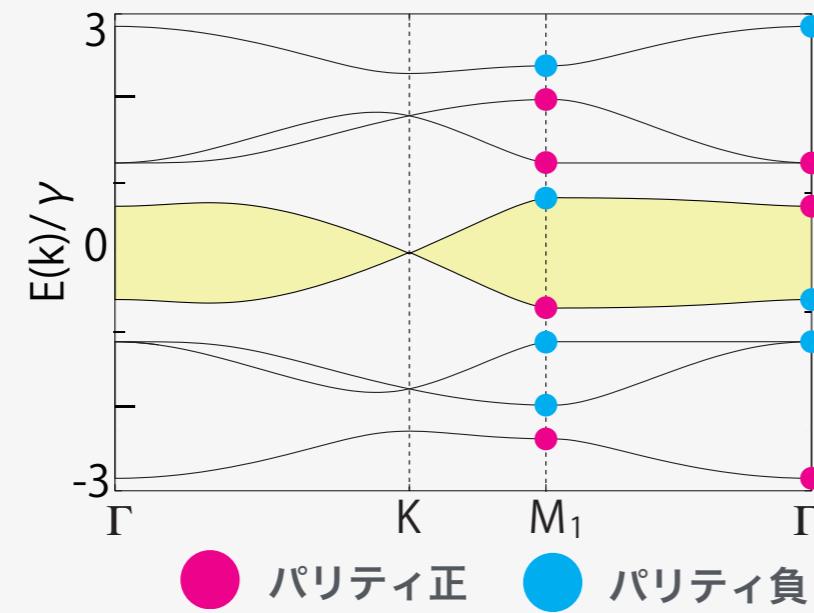
パラメータ  
A  $\gamma$  A  
A  $\gamma'$  B



ジグザグエッジ形状

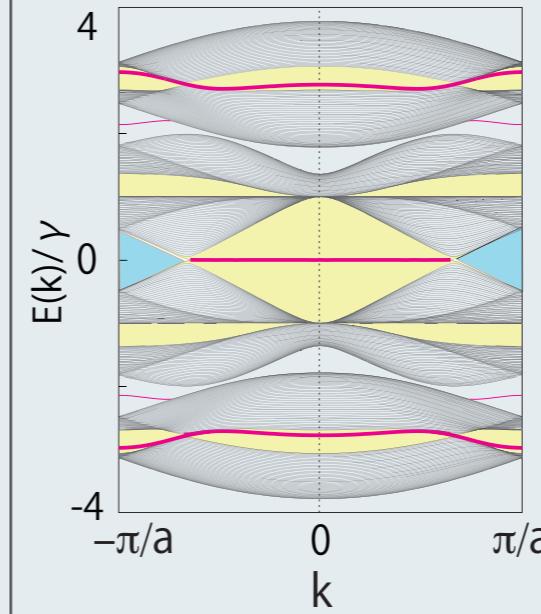
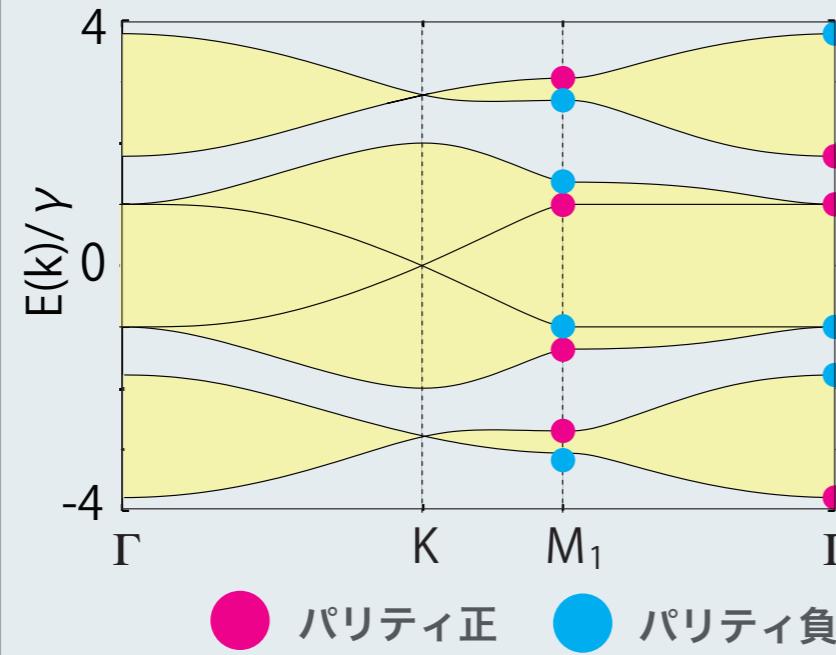


$\gamma > \gamma'$



ザック位相 = 0

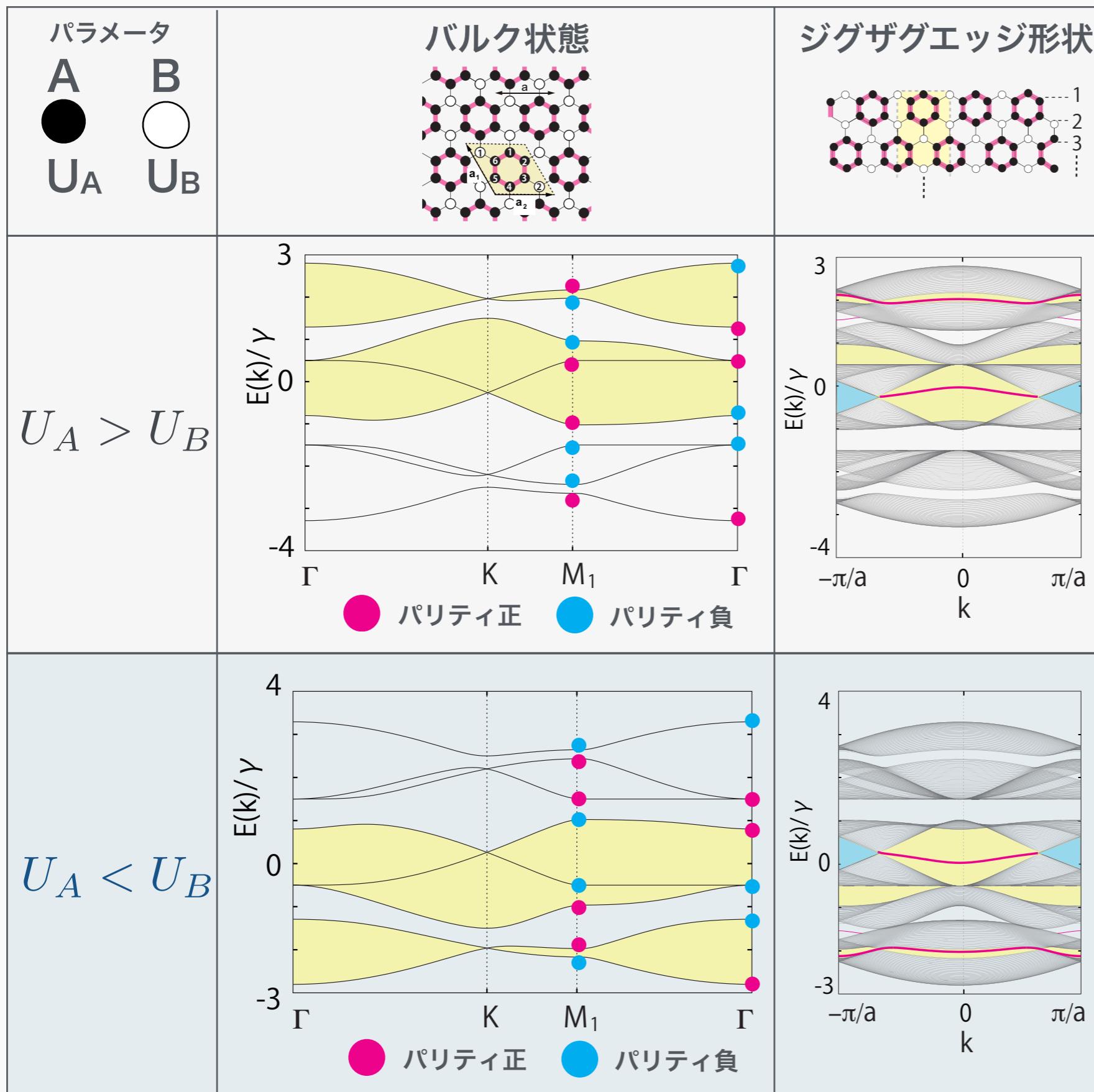
$\gamma < \gamma'$



エッジ状態は現れない

ザック位相 =  $\pi$

エッジ状態が現れる



ザック位相 = 0

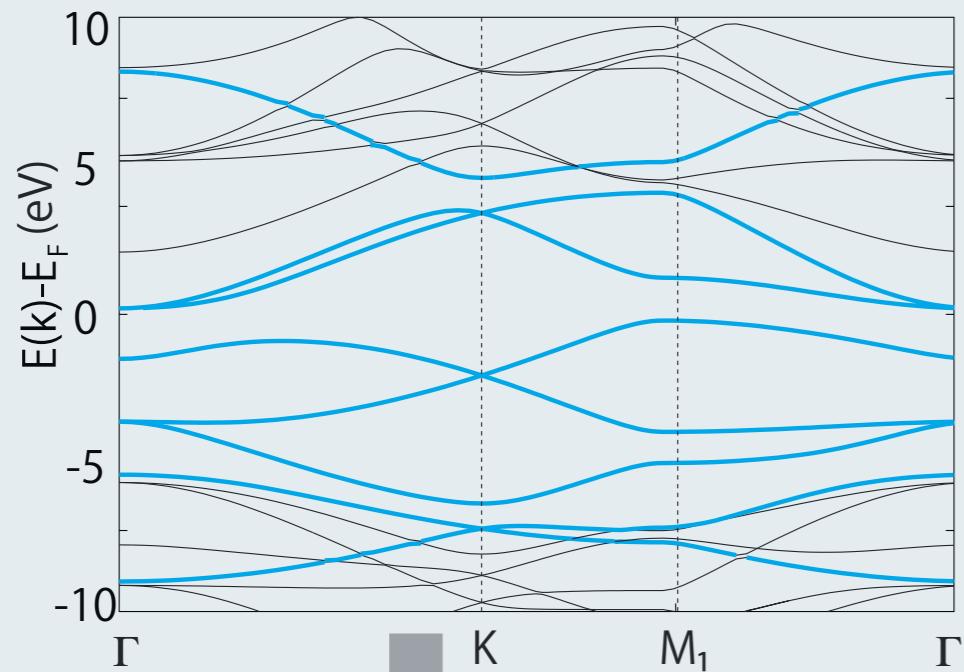
エッジ状態は現れない

ザック位相 =  $\pi$

エッジ状態が現れる

## DFT計算結果

## バルク電子状態



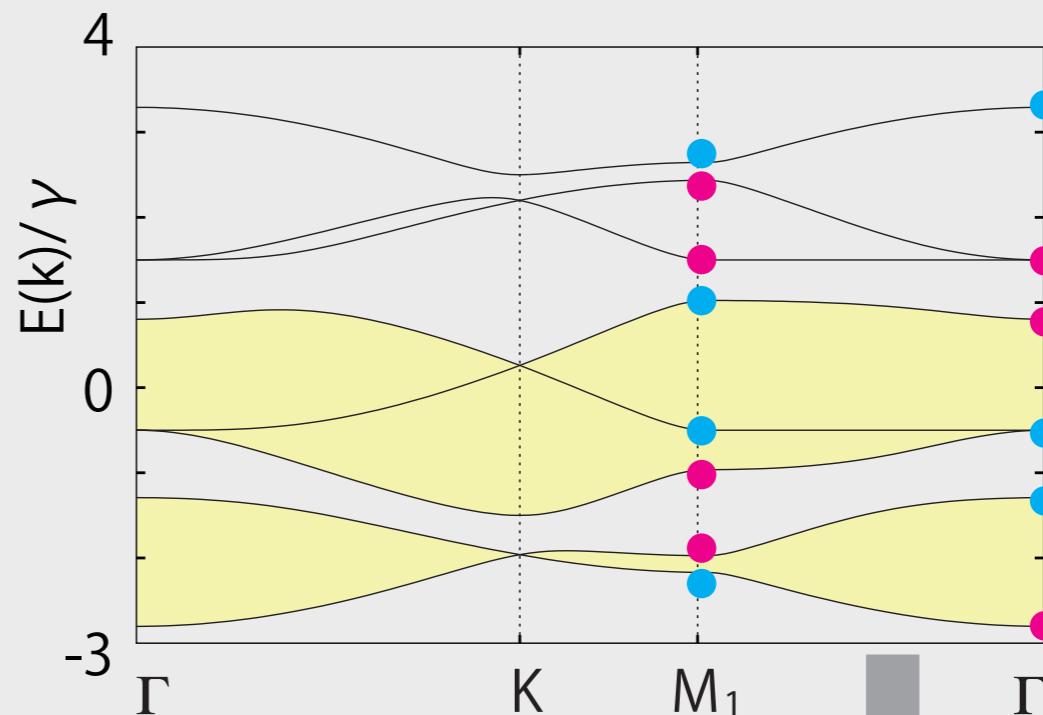
**DFT計算条件**

- SIESTA
- 擬ポテンシャル法
- 原子局在基底
- 近似: GGA
- 交換相関汎関数: PBE
- K点メッシュ: 20×20×1

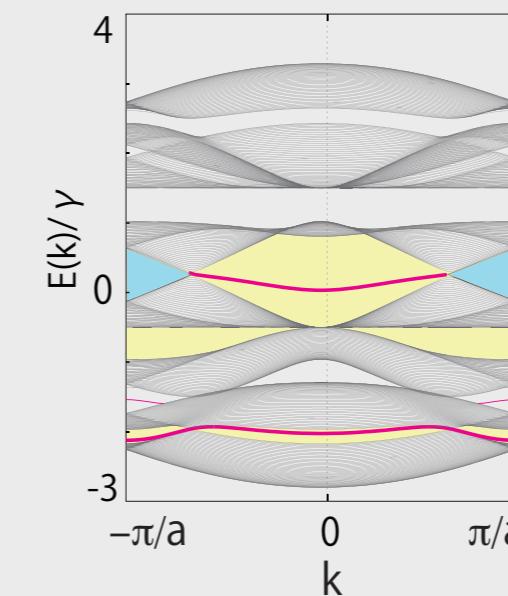
## ナノリボン電子状態



## 強束縛近似模型計算結果

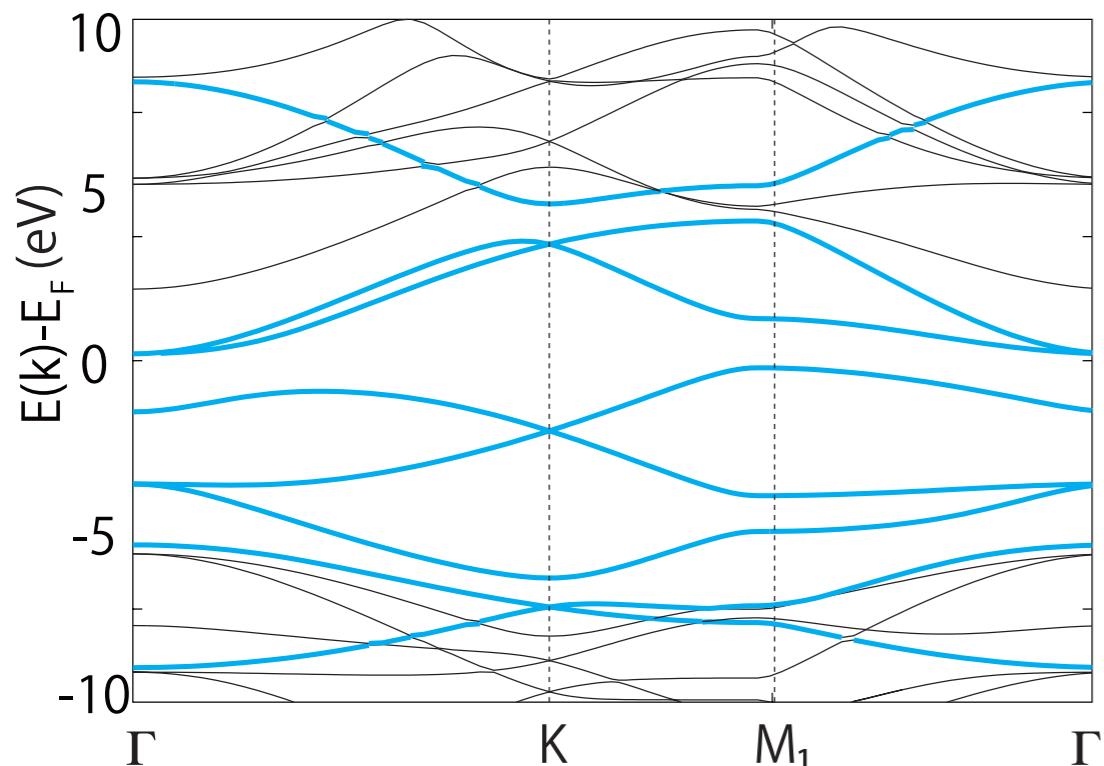
バルク電子状態  $U_A < U_B$ 

## ナノリボン電子状態

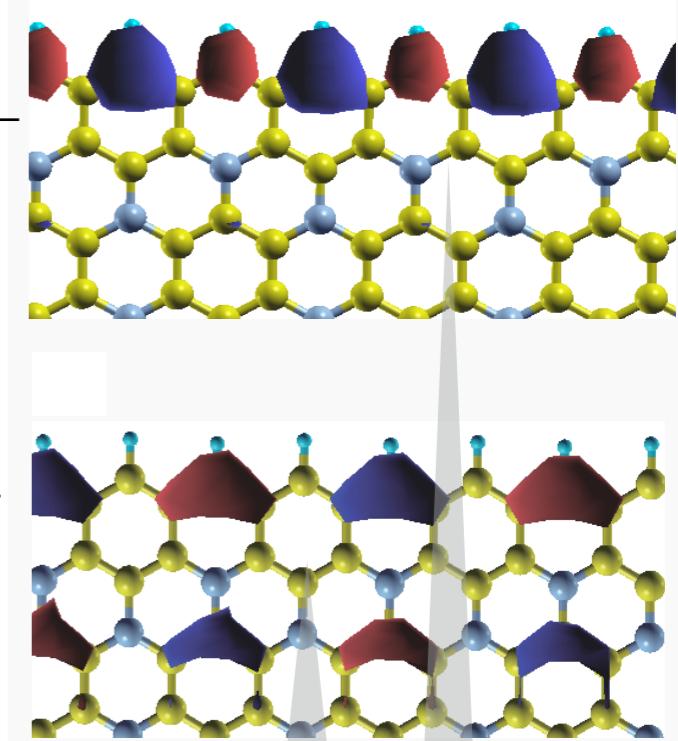
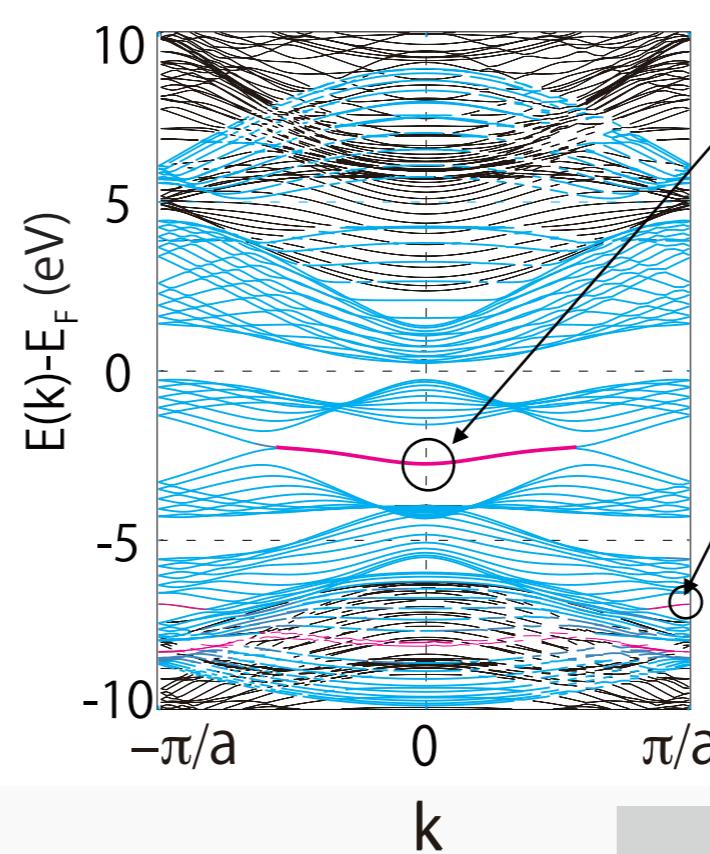


## DFT計算結果

バルク電子状態



ナノリボン電子状態



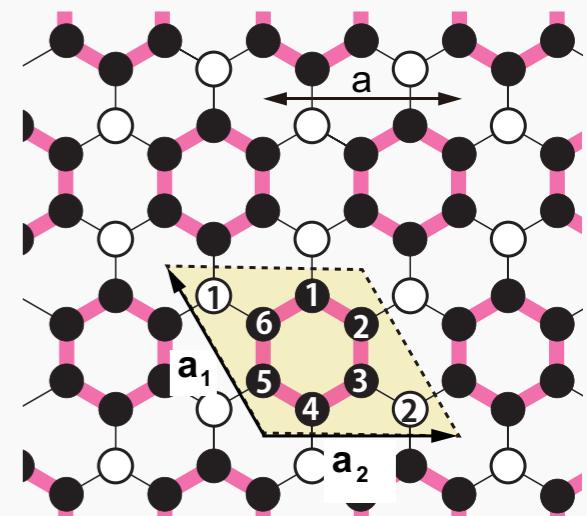
エッジに局在する波動関数



結論： ザック位相に規定されるトポロジカルエッジ状態を持つ

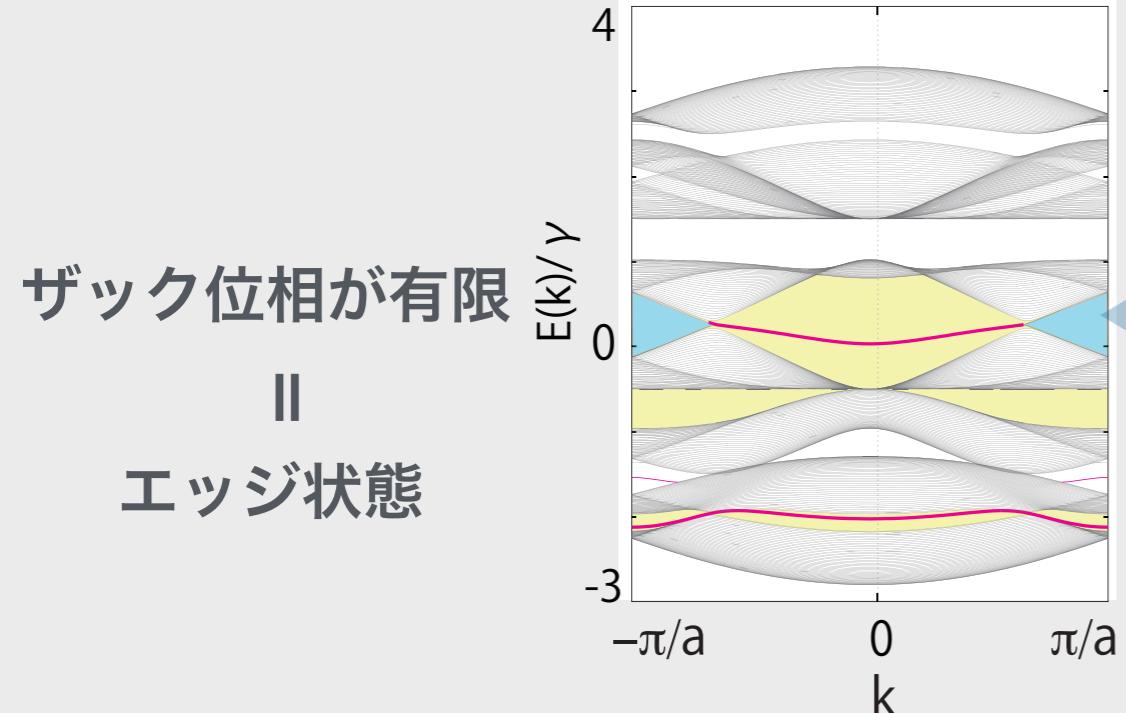
目的：ザック位相が有限となる具体的な物質の探索

ベリー曲率ゼロ + 二種原子 + ハニカム格子 =

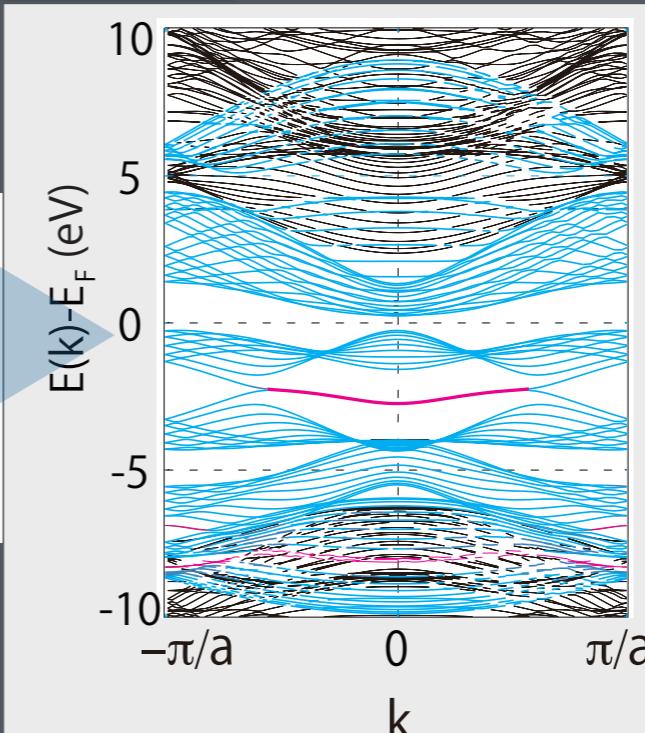


仮説：「h-C<sub>3</sub>N膜結晶はザック位相が有限となるトポロジカル物質である」

### STEP 1 強束縛近似模型



### STEP 2 第一原理計算



↓  
h-C<sub>3</sub>Nはトポロジカル物質！

## 発表論文

1. T. Kameda, F. Liu, S. Dutta and K. Wakabayashi

Topological Edge States Induced by Zak's Phase in A<sub>3</sub>B Monolayers Phys. Rev. B (2019)

## 学会発表

1. 亀田智明, Liu Feng, 若林克法

2 次元 C<sub>3</sub>N 原子膜の電子状態とトポロジカル特性に関する理論解析 日本物理学会 第 73 回年次大会  
東京理科大学 野田キャンパス 2018 年 3 月 22 日

2. Tomoaki Kameda, Feng Liu, Sudipta Dutta, Katsunori Wakabayashi

Topological Edge States Induced by Zak's phase in A<sub>3</sub>B Monolayers

31st International Microprocesses and Nanotechnology Conference Sapporo Park Hotel, Sapporo, Japan 2018/11/16

3. Tomoaki Kameda, Feng Liu, Sudipta Dutta, Katsunori Wakabayashi

Topological Edge States Induced by Zak's phase in A<sub>3</sub>B Monolayers

The 56th The Fullerenes, Nanotubes and Graphene Research Society Symposium The University of Tokyo, Japan 2019/3/4