

関西学院大学大学院 修士論文審査会

2019年2月13日

# $A_3B$ 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

## 序論

トポロジーとは

量子ホール系

トポロジカル絶縁体

ベリー位相

ザック位相

## 研究 概要

目的

着眼点

$h$ -A<sub>3</sub>B 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



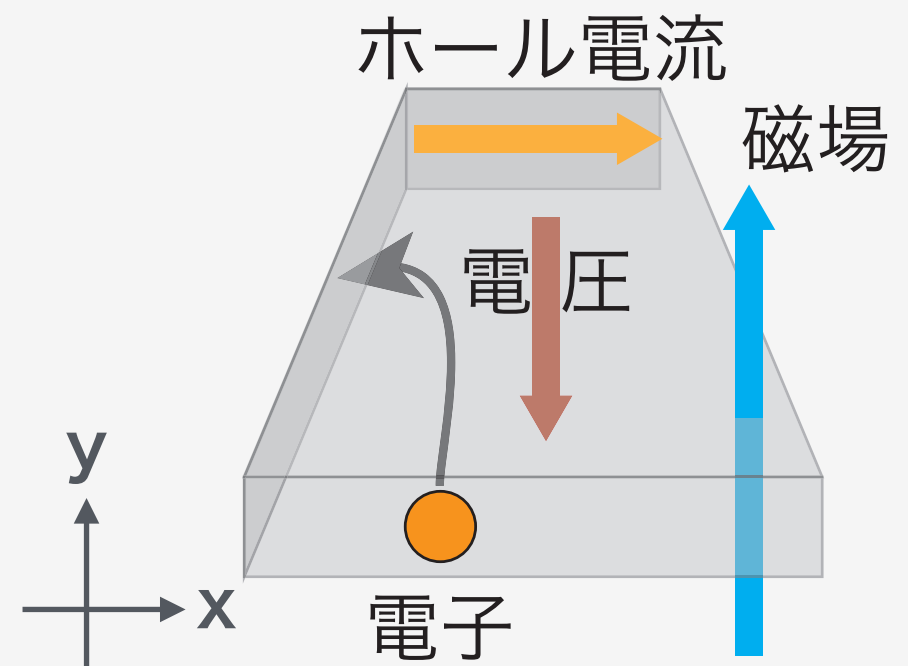
カップ～ドーナツ

連続変形で互いに入れ替わる

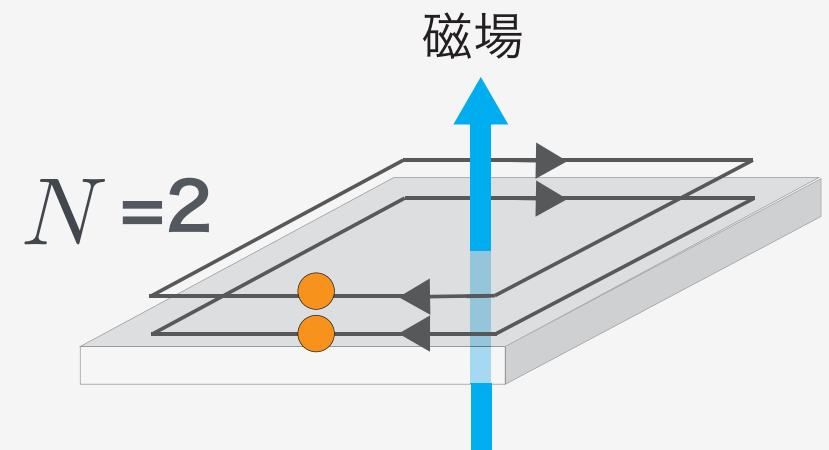
# 1 ホール伝導率の量子化

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

$\sigma_{xy}$ : 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

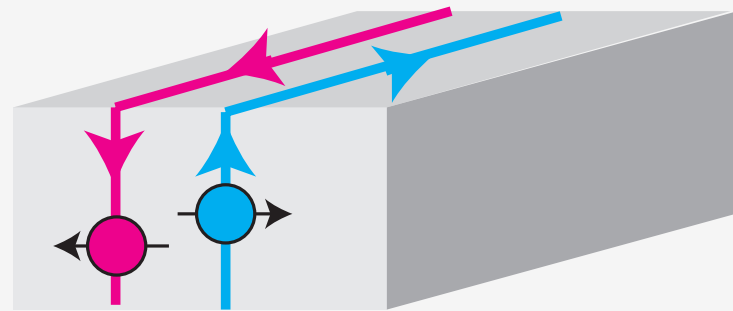


# 3 時間反転対称性の破れ



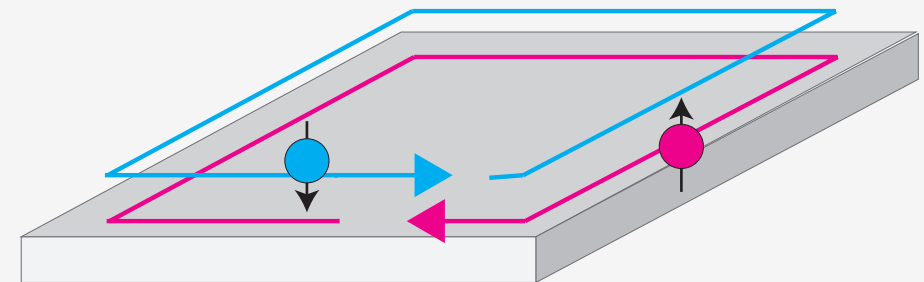
## 量子スピンホール系

三次元



アップスピン電子    ダウンスピン電子

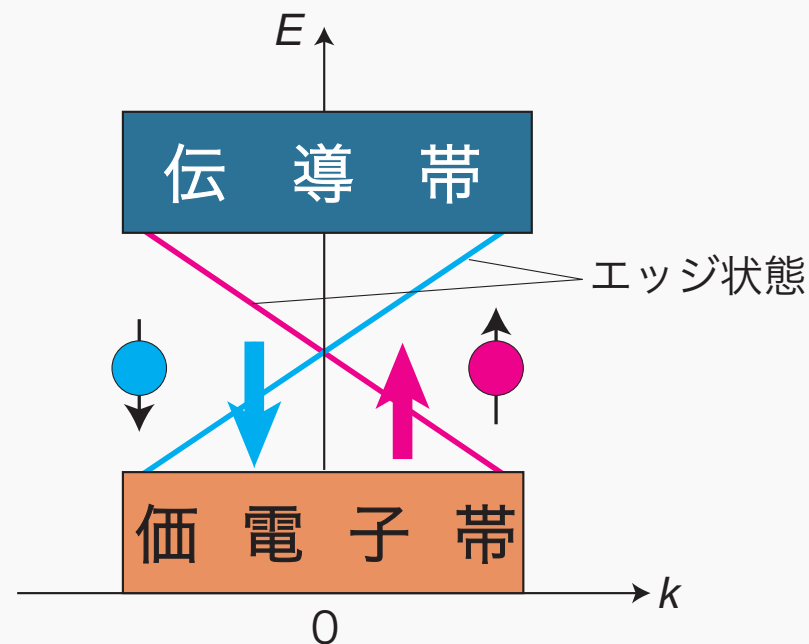
二次元



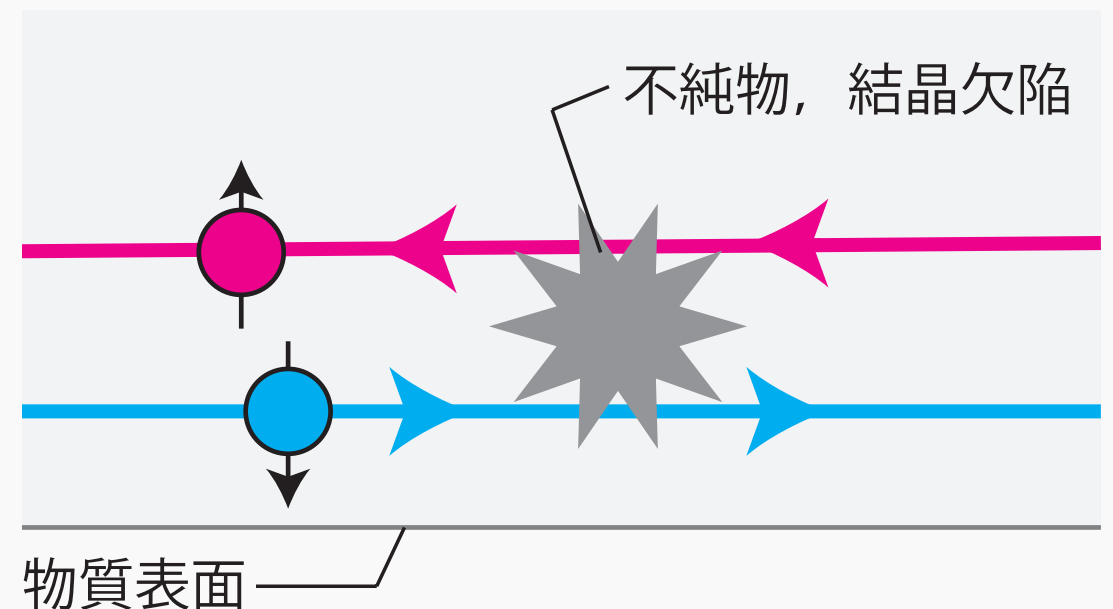
結晶内部 → 絶縁体

結晶表面 → 伝導体 (純スピン流)

ギャップレスエッジ状態

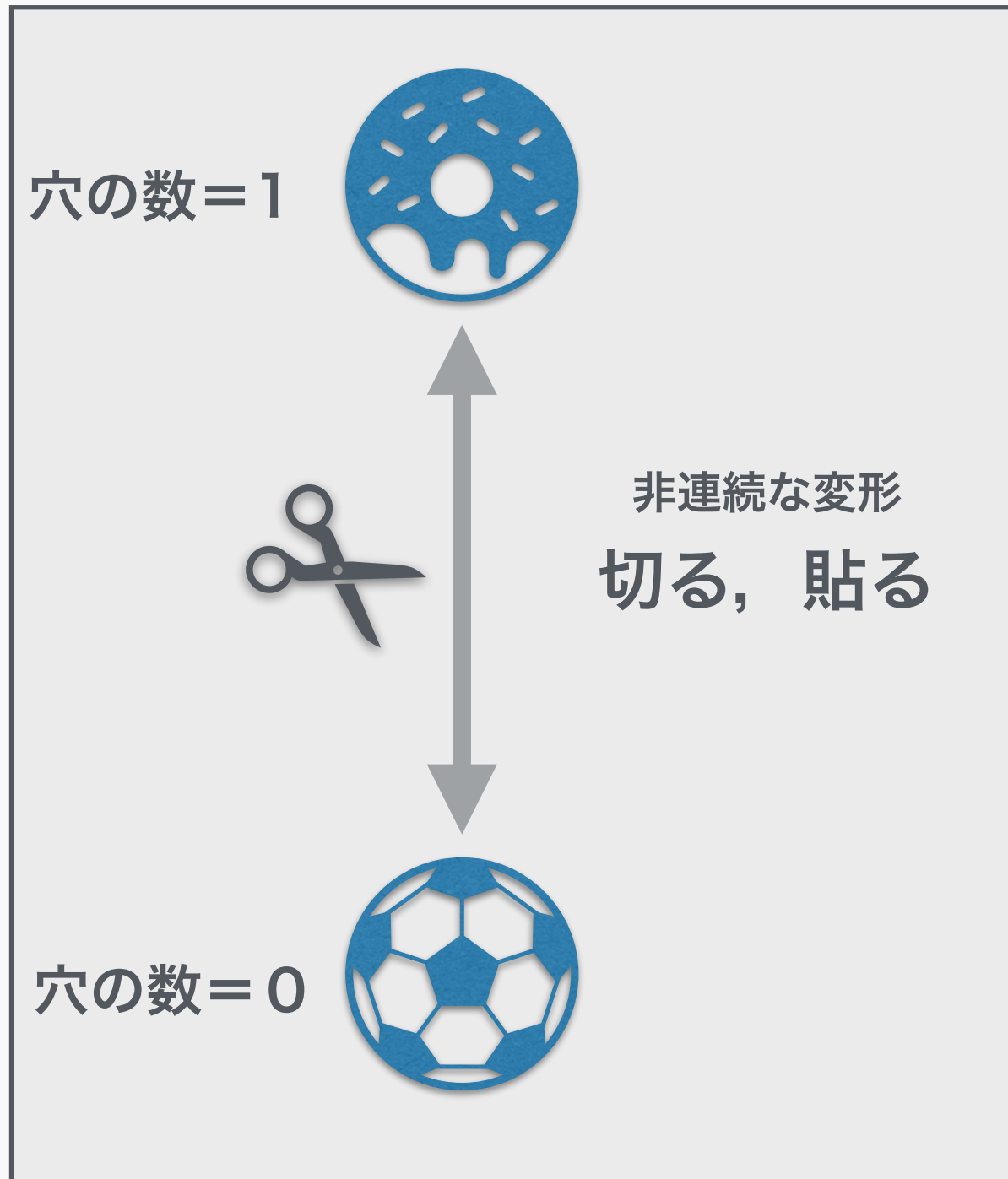


強固な伝導

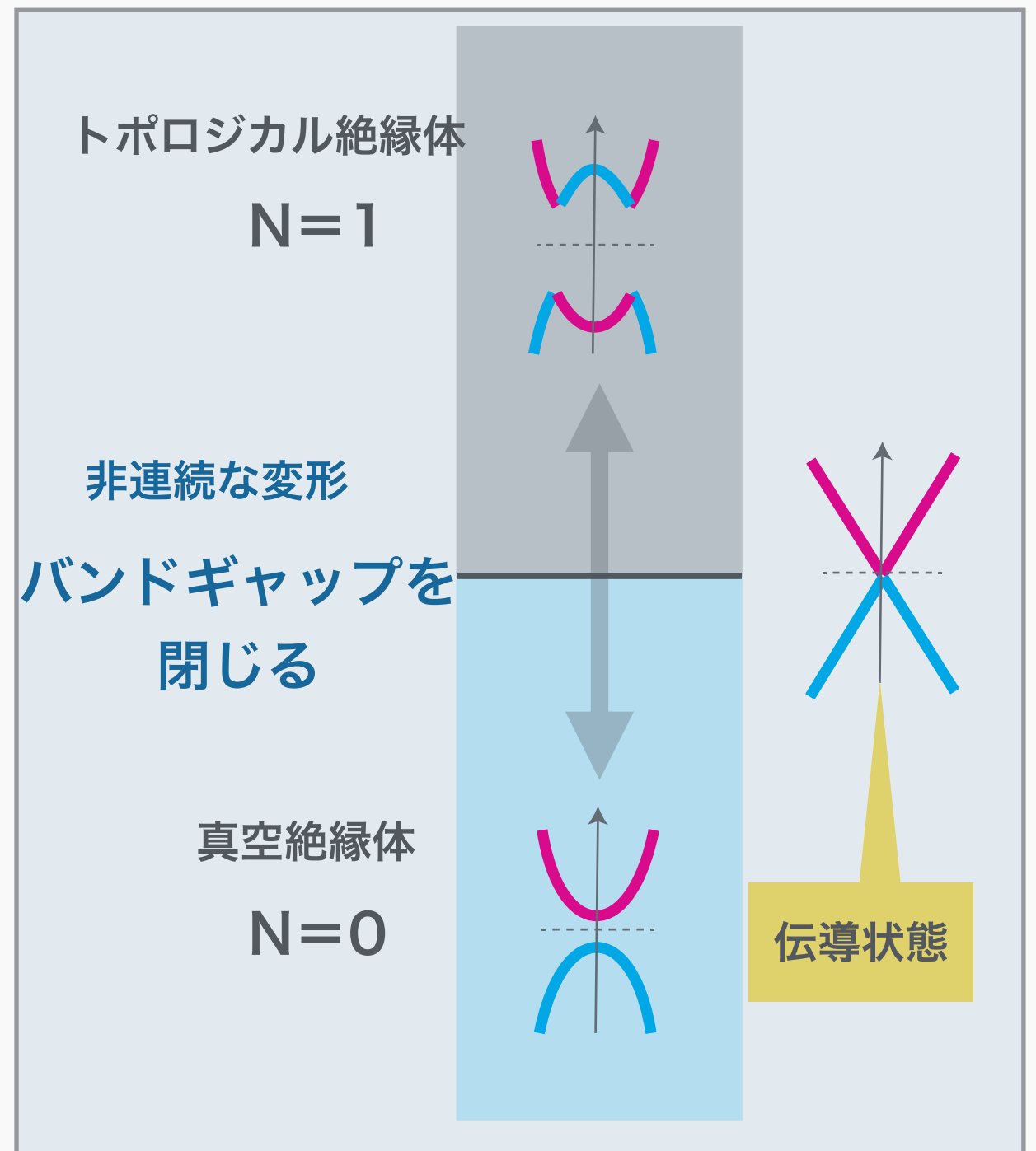


## トポロジーを利用した量子物性の理解

### 素朴な例



### 量子物性

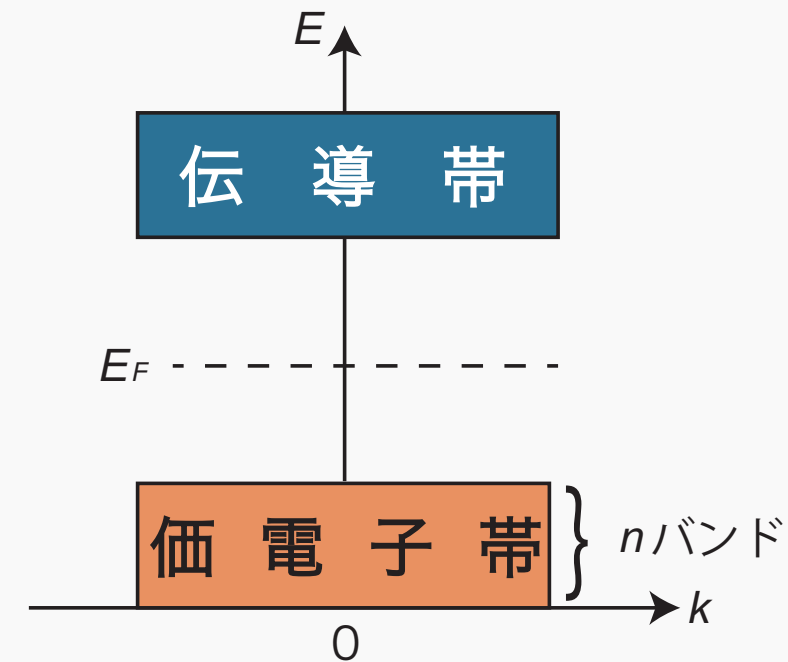


# ここまでのトポロジカル量 | ベリー位相(ベリー曲率) 6

ホール伝導率

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

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



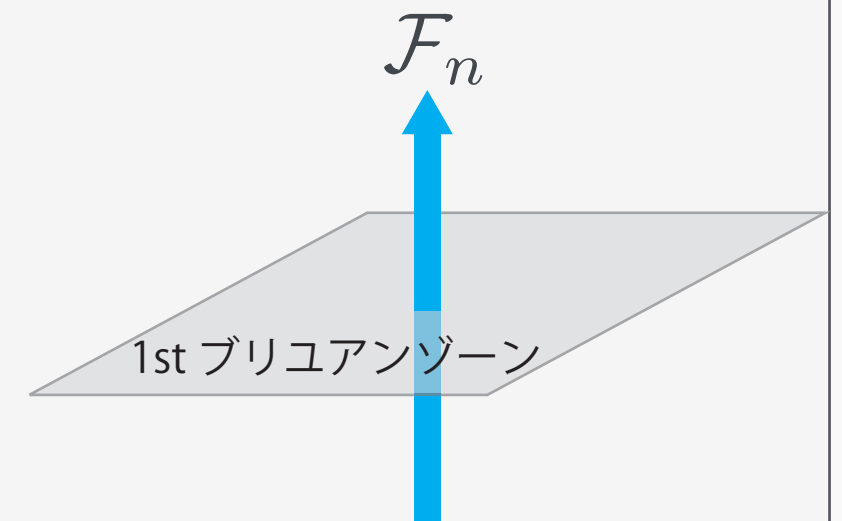
ベリー位相

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

$\mathcal{F}_n$  : ベリー曲率

||

波数空間における磁場



$N$  が有限



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

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

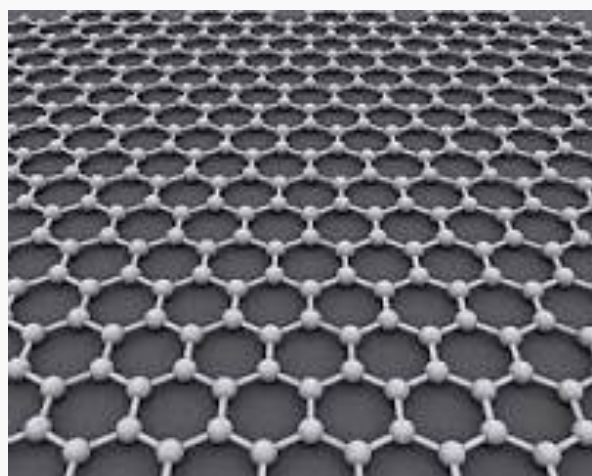
2 空間反転対称性

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

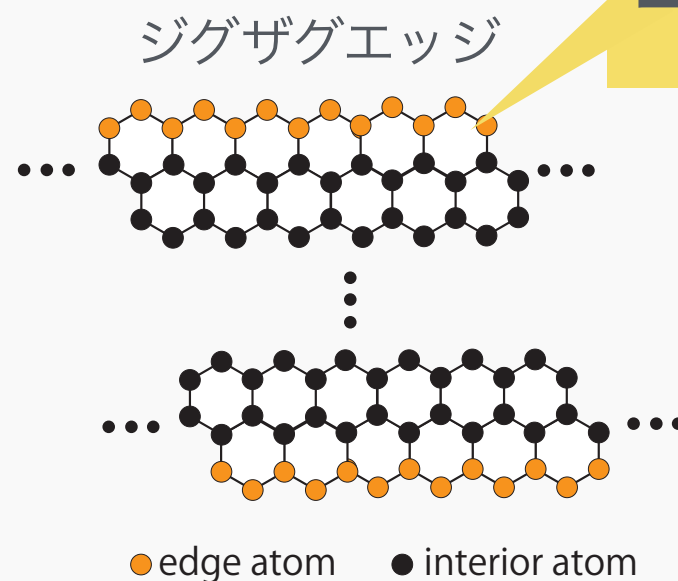
$$\mathcal{F}(k) = 0$$

グラフェンは

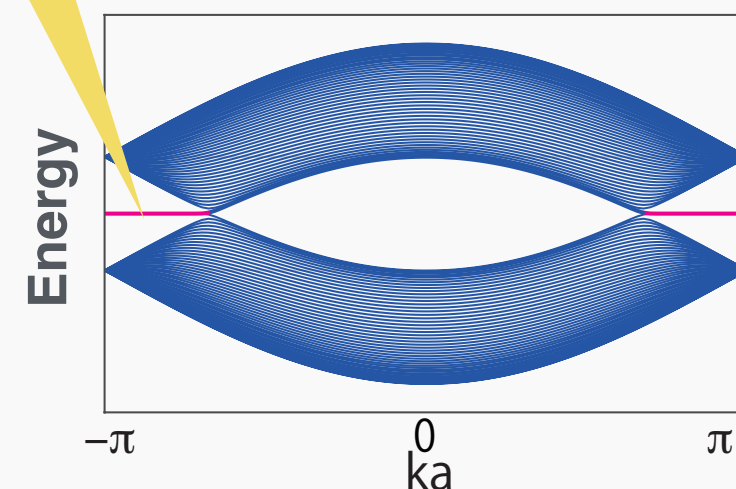
1 2 を満たすが...



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



エッジ状態が現れる



「ベリー曲率がゼロでもエッジ状態が現れる！」

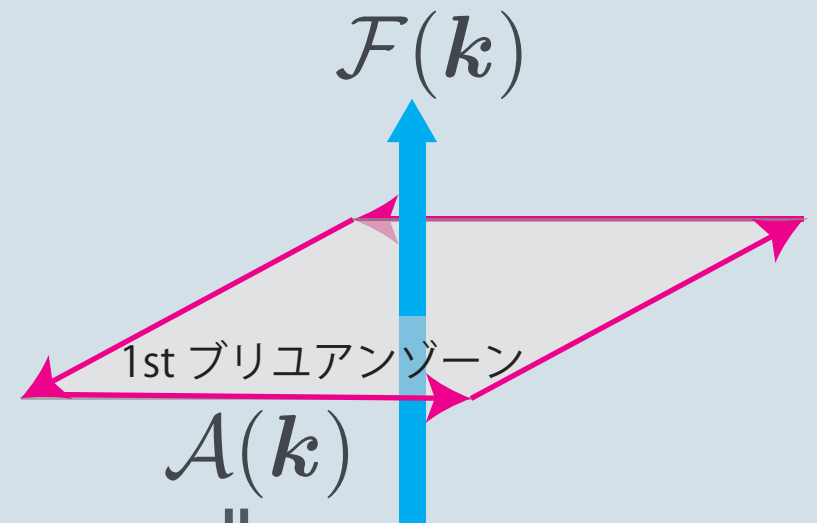


## ザック位相

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

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

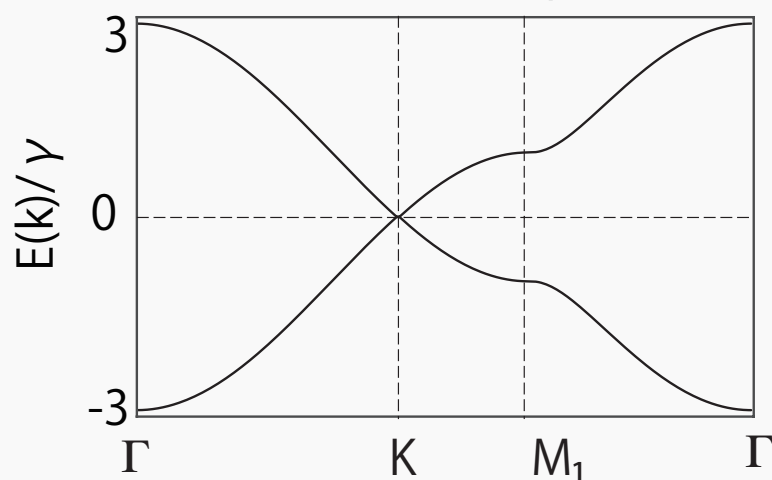
ベリー接続  $\mathcal{A}(k) = i \langle k | \nabla_k | k \rangle$



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…

バルク電子状態



## ザック位相を計算…

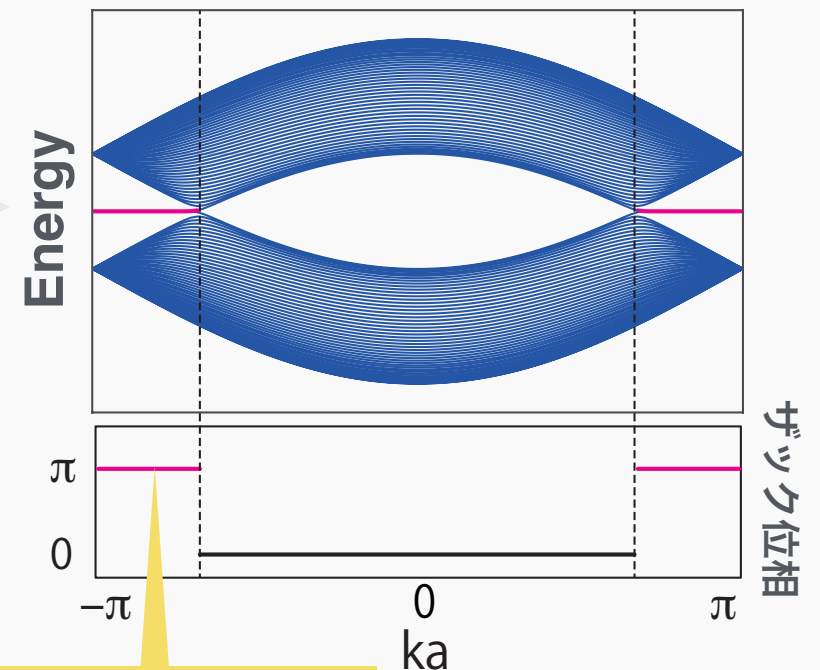
$$\mathcal{Z} = \sum_{n: \text{filled}} \mathcal{Z}^n$$

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

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

$\eta^n$ : 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

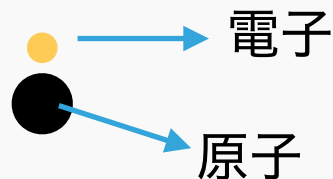
$$P = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} dk \mathcal{A}(k)$$

電気分極 = ザック位相

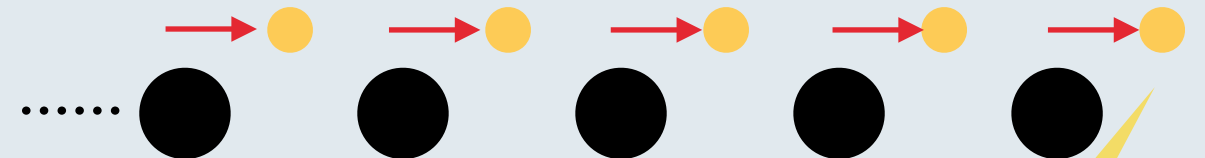
$P = 0$  電荷の偏りなし



エッジ状態なし



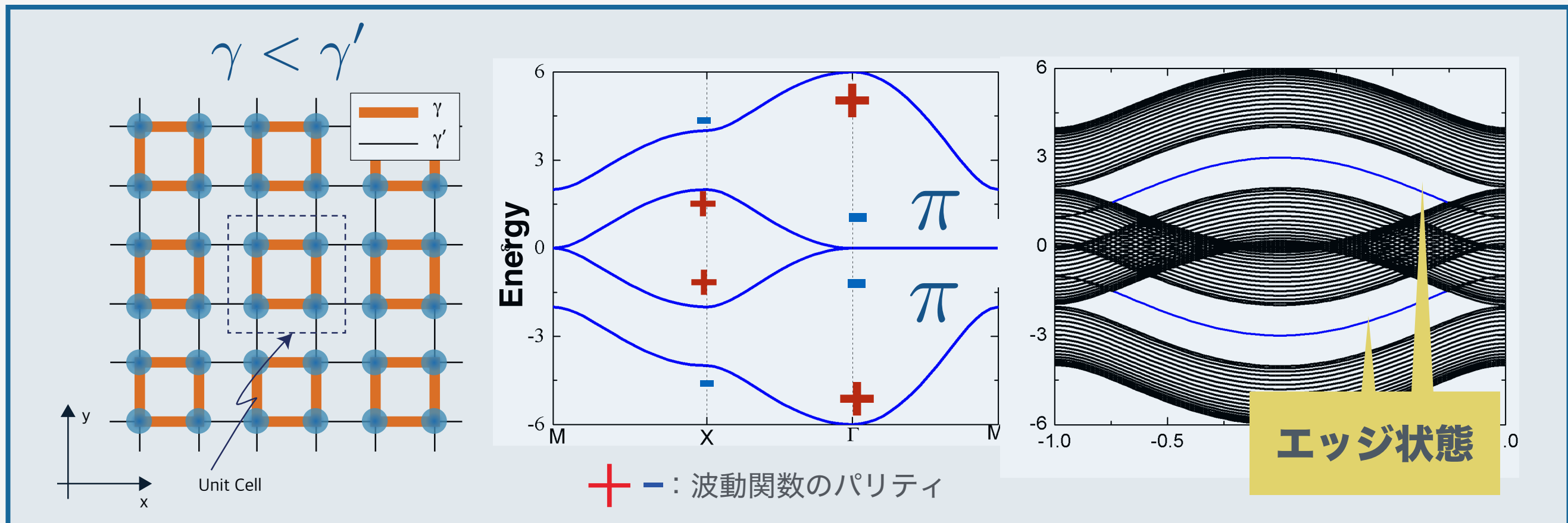
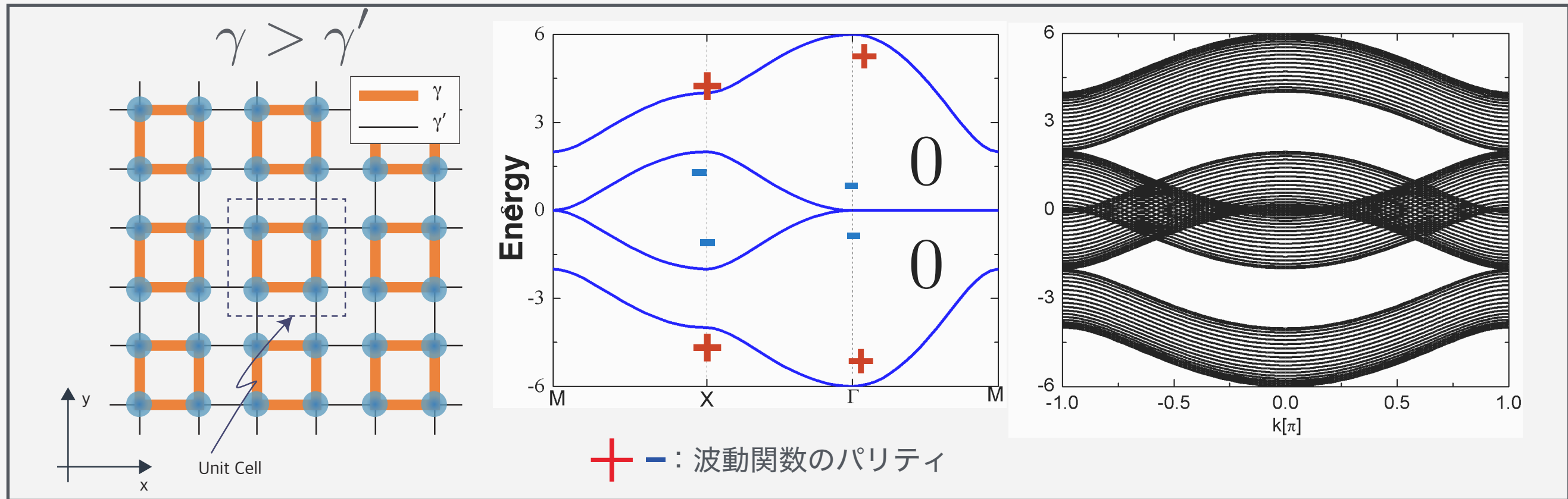
$P = 1/2$  電荷の偏りあり



エッジ状態あり

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

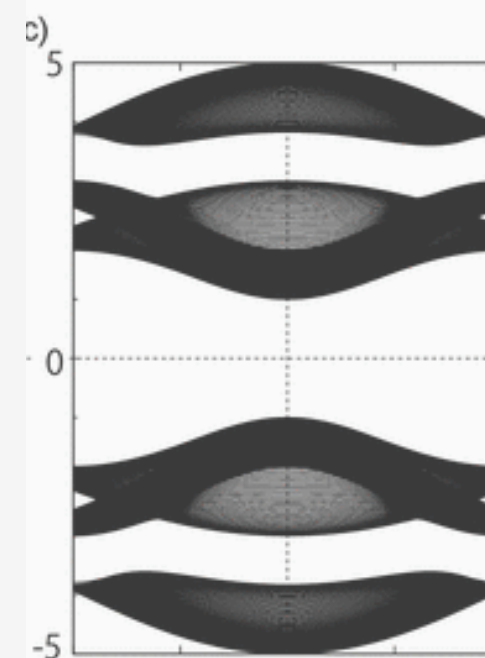
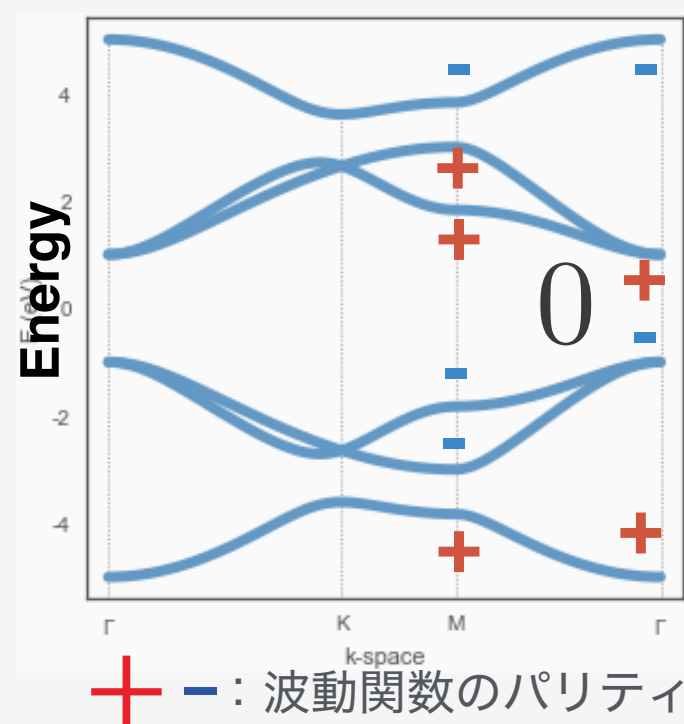
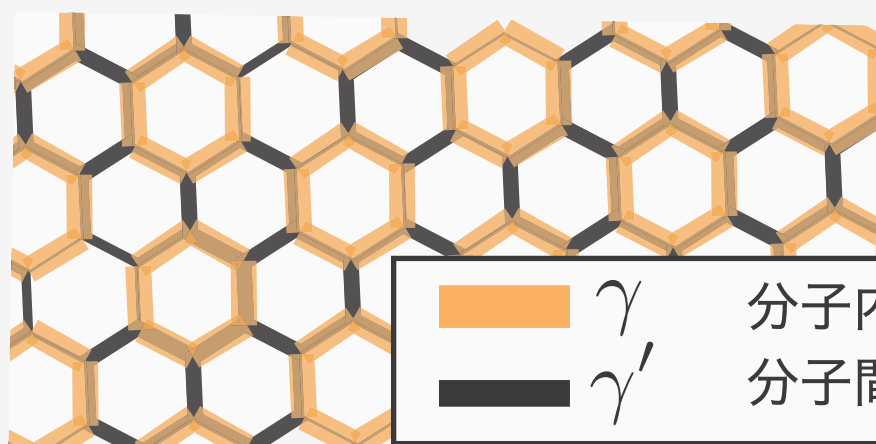
F. Liu and K. Wakabayashi Phys. Rev. Lett. (2017)



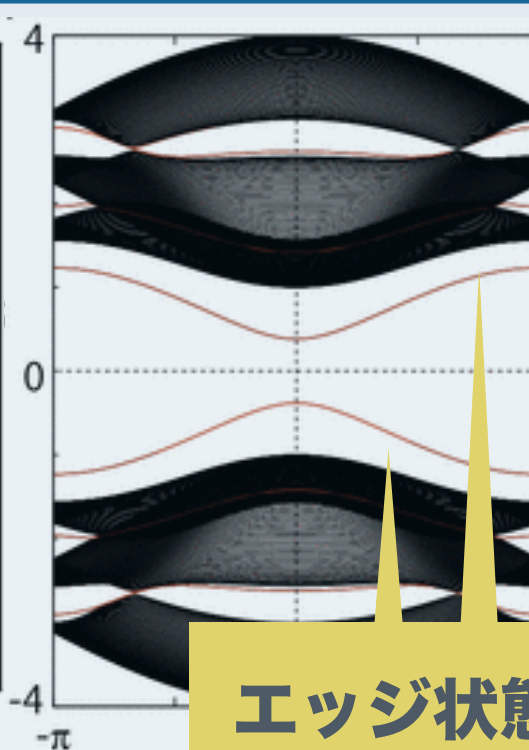
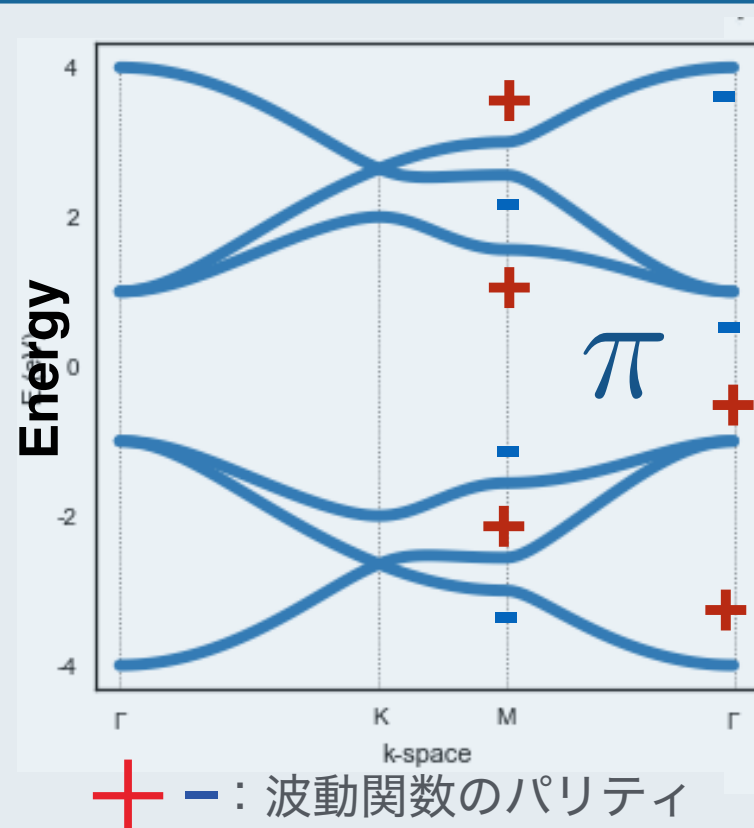
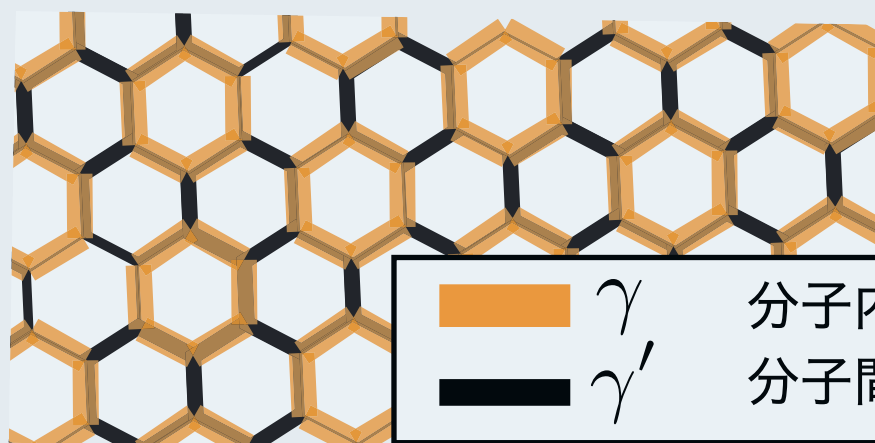
# ザック位相が有限となるモデル例 | h-2D SSH モデル 11

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

$$\gamma > \gamma'$$



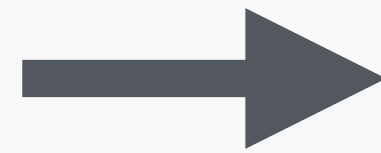
$$\gamma < \gamma'$$



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

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

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

ベリー位相

ザック位相

## 研究 概要

目的

着眼点

$h$ -A<sub>3</sub>B モデル

強束縛近似模型

密度汎関数理論

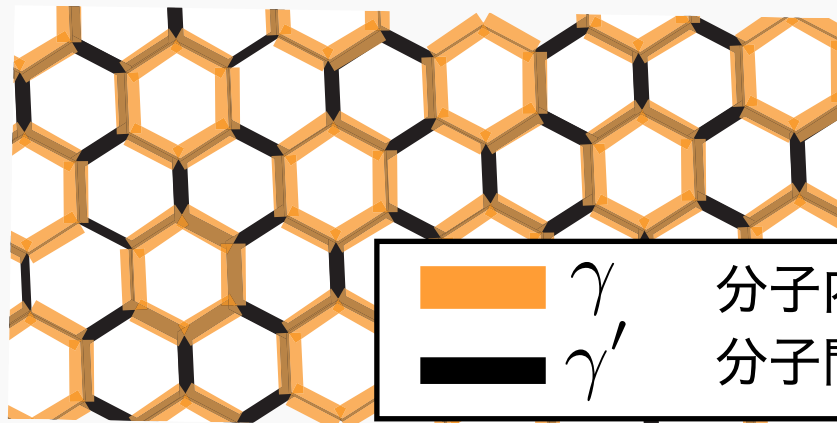
まとめ





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…

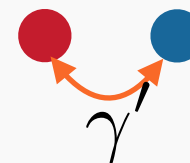


DFT計算で構成出来ない構造



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



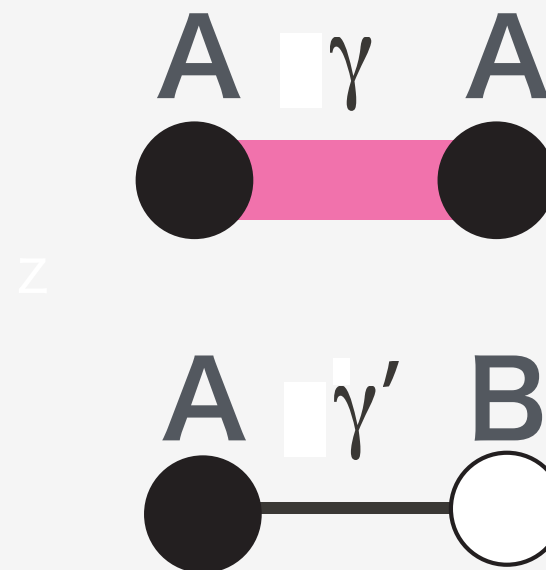
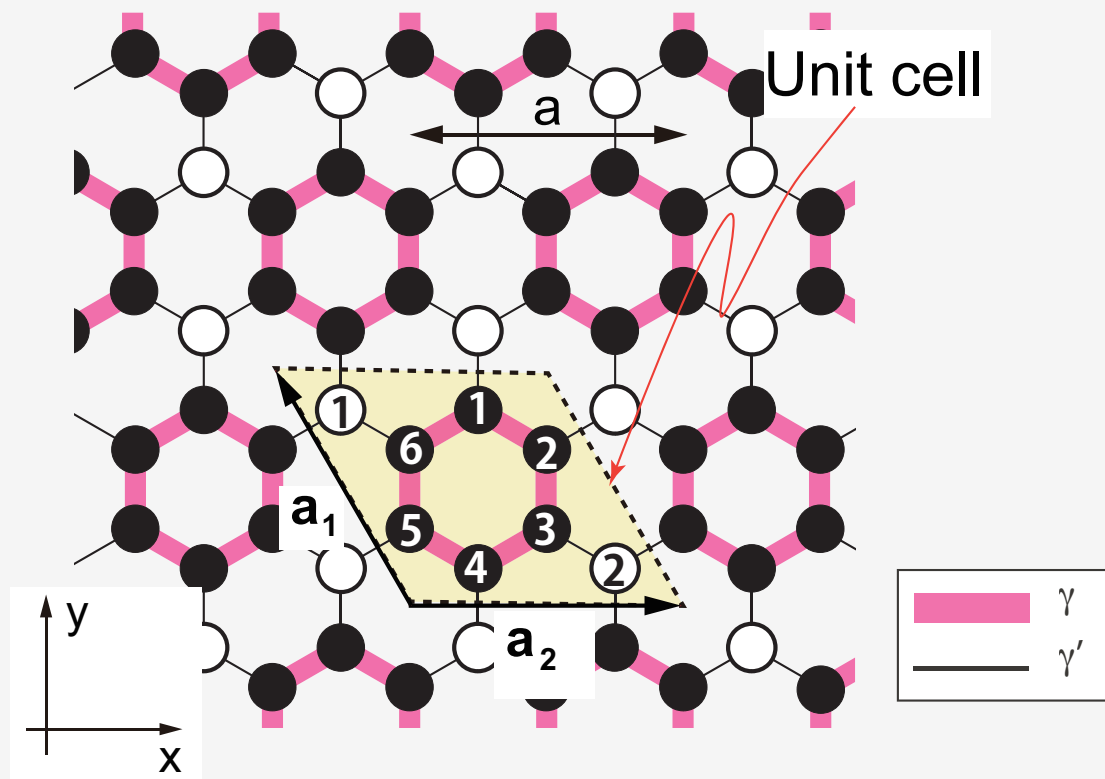
発想： 「二種類の原子で構成される結晶構造を考える」

① ハニカム格子

② 二原子種

③ 空間反転対称性

## $A_3B$ 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：「 $h$ - $C_3N$ 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」

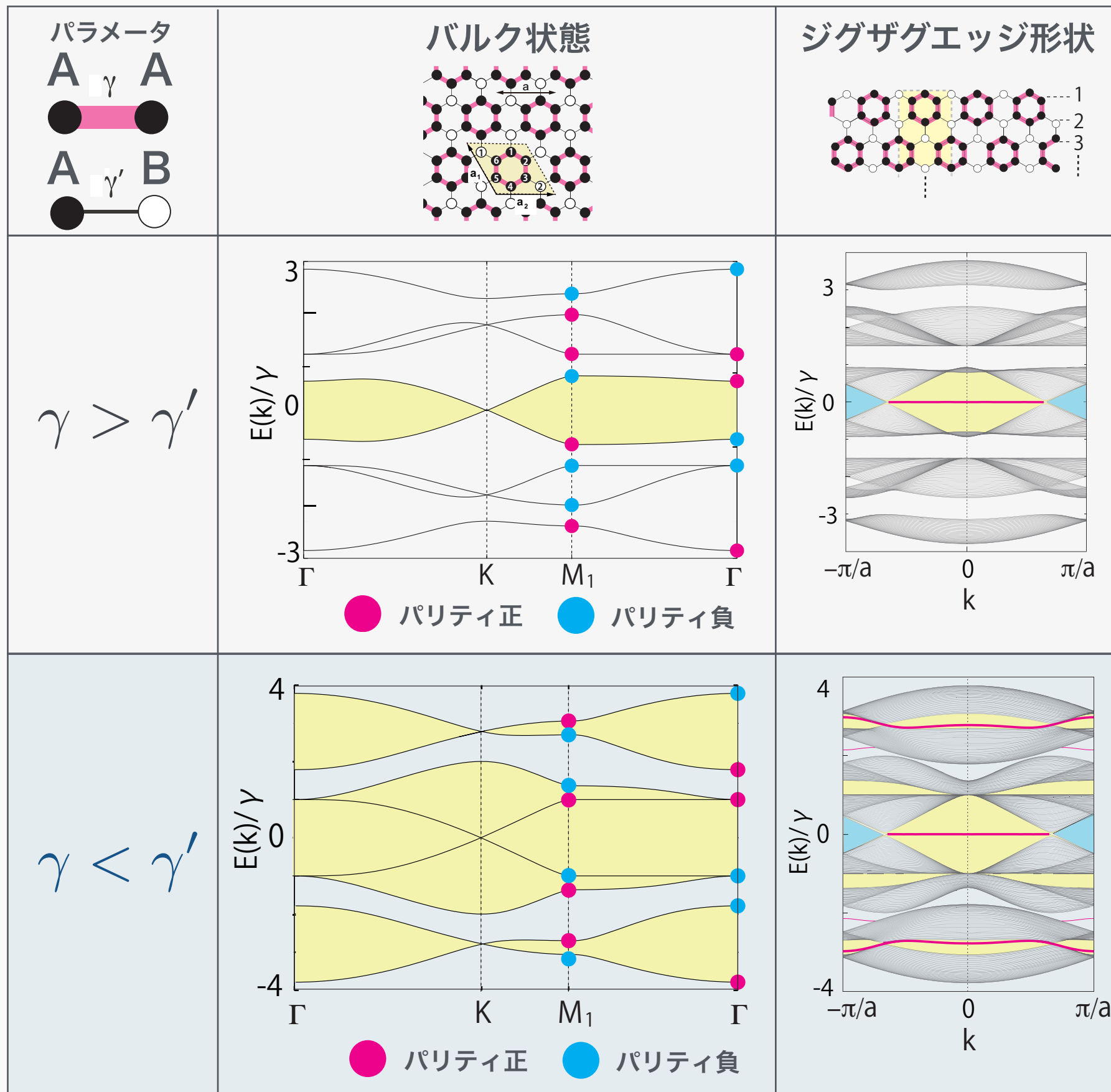
## 検証手順

### STEP 1 強束縛近似模型

$h$ - $A_3B$ 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

$h$ - $C_3N$ 膜結晶がトポロジカルエッジ状態を持つのか



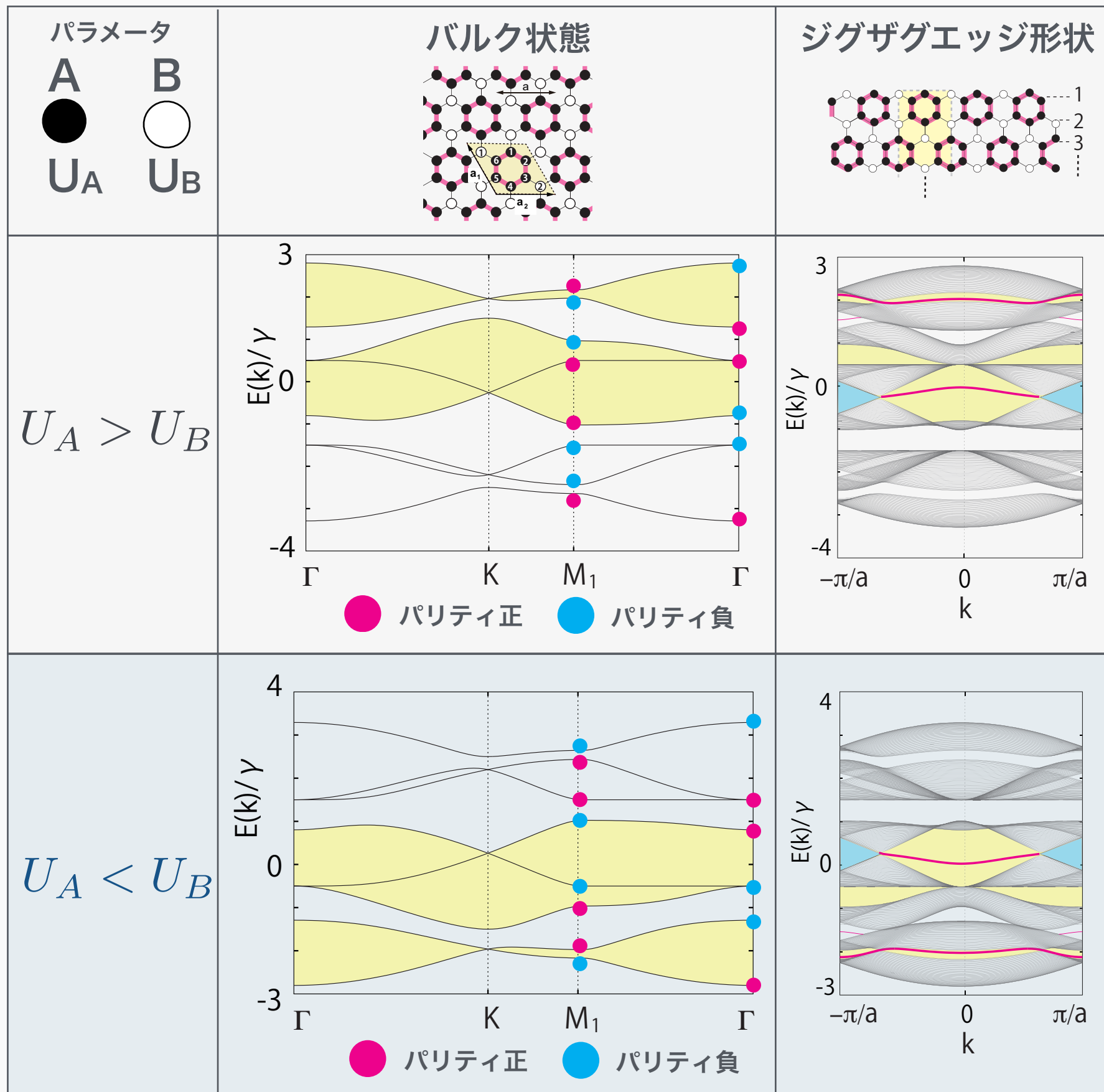
ザック位相 = 0

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

# STEP 1 $h$ - $A_3B$ のザック位相と電子状態 (オンサイト変調) 18



ザック位相 = 0

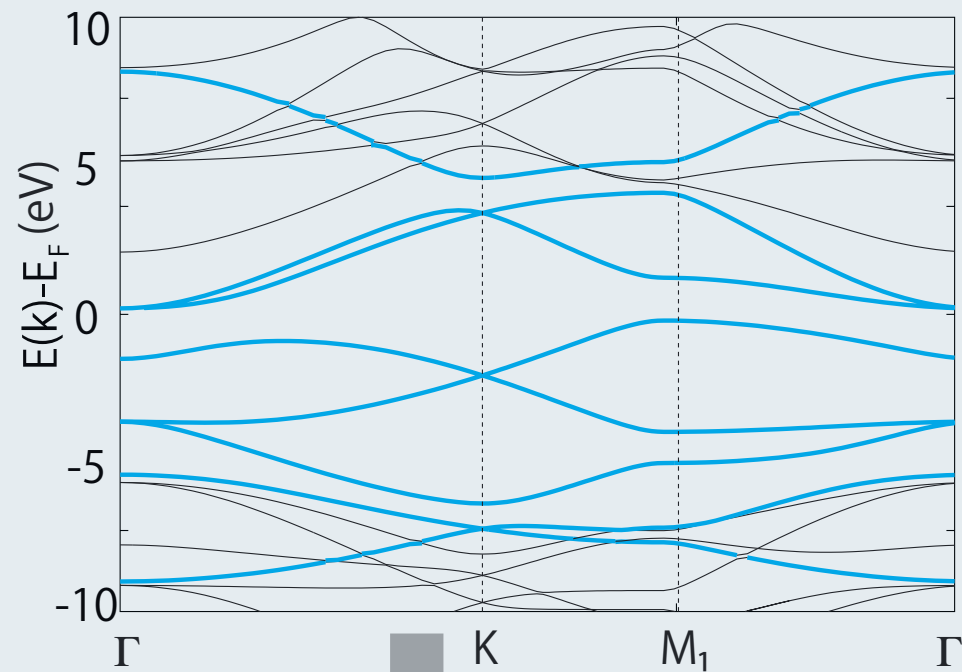
エッジ状態は現れない

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



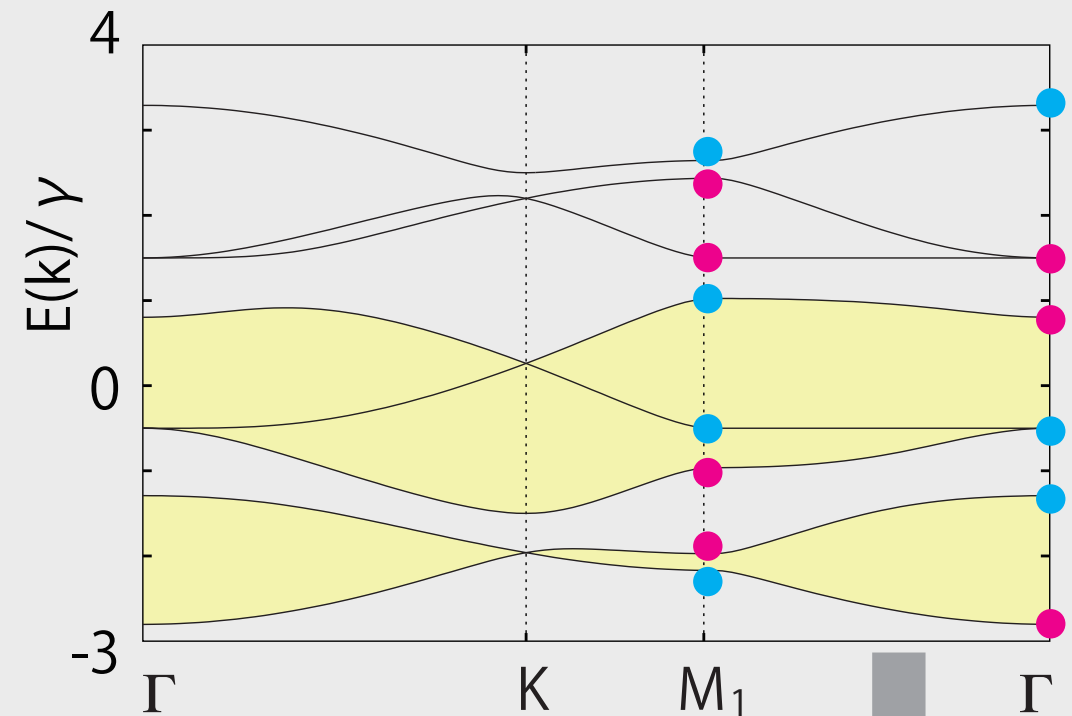
## ナノリボン電子状態



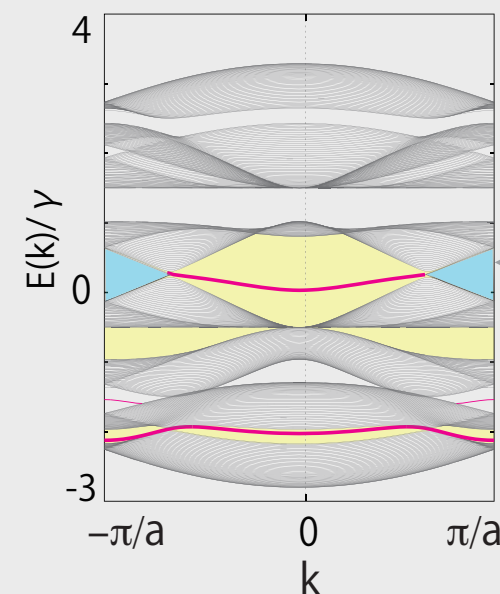
## DFT計算条件

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

## 強束縛近似模型計算結果

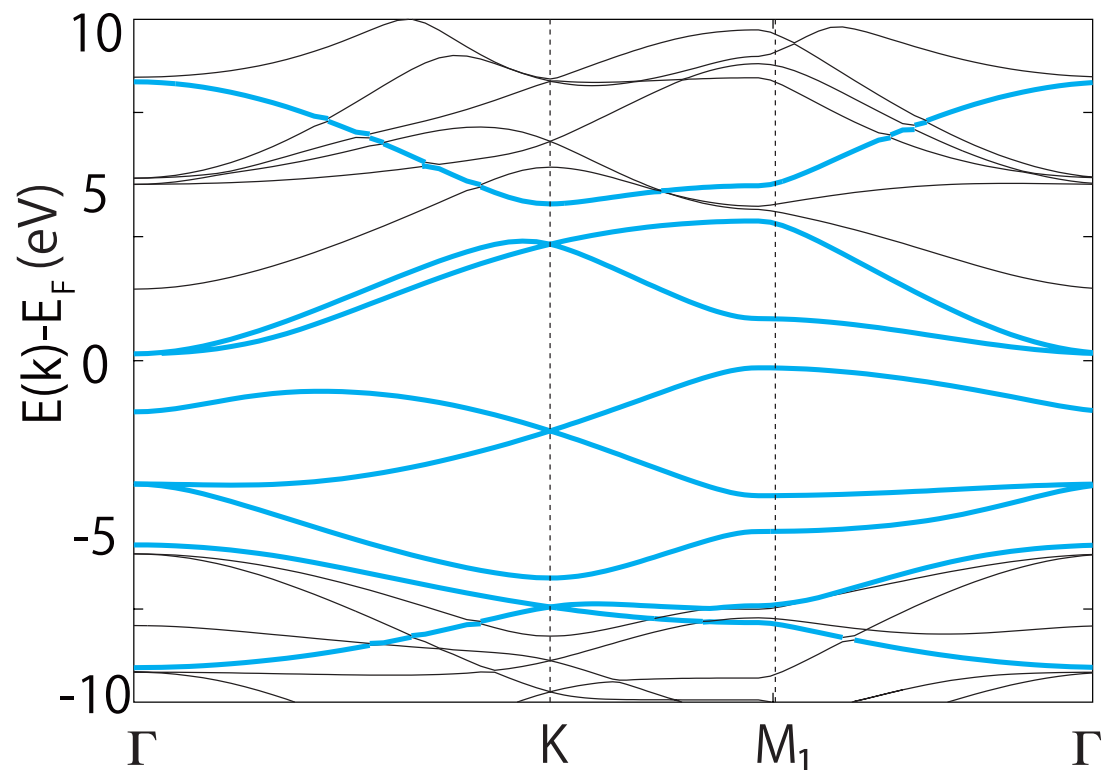
バルク電子状態  $U_A < U_B$ 

## ナノリボン電子状態

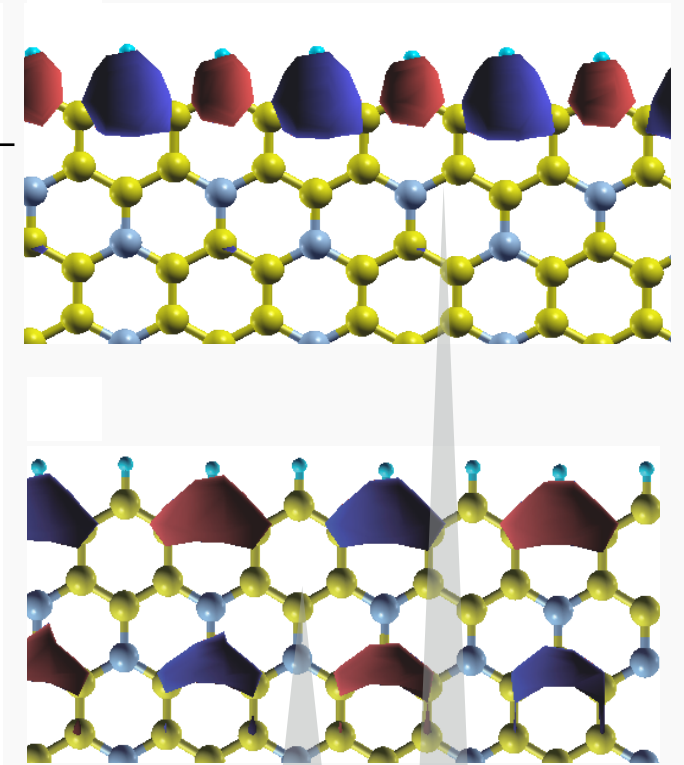
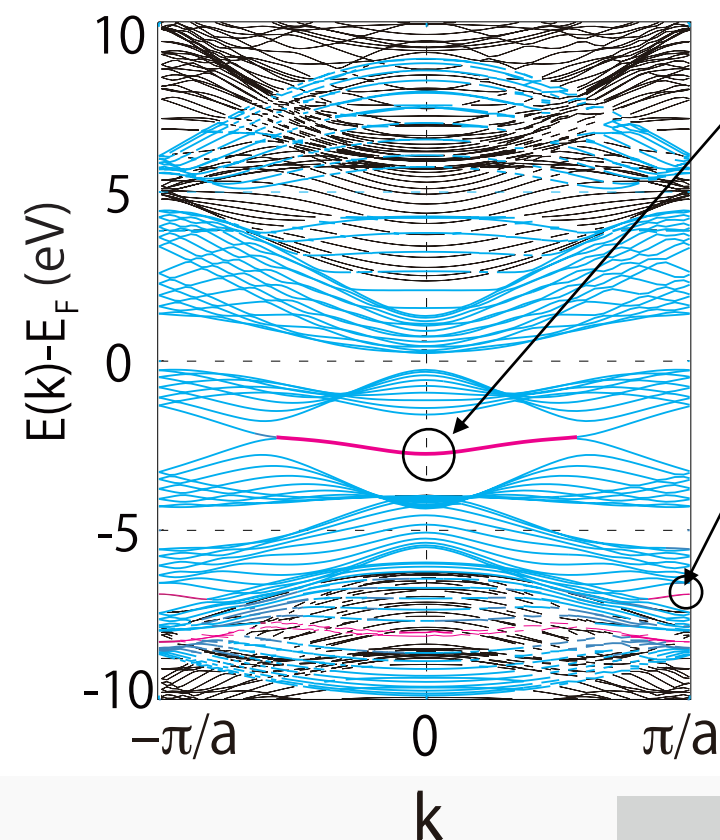


## DFT計算結果

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

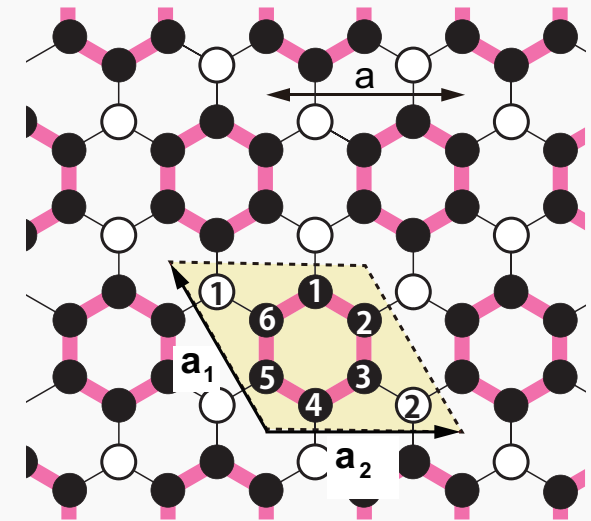
+

二種原子

+

ハニカム格子

=

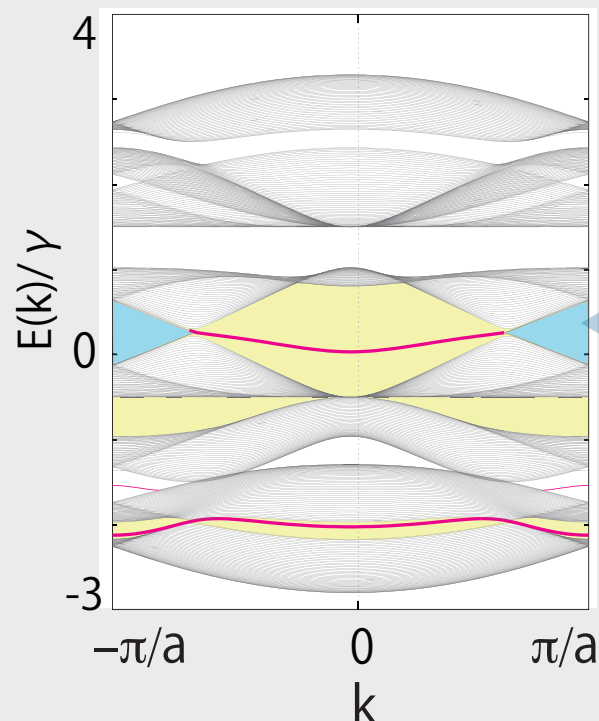


仮説：「h-C<sub>3</sub>N膜結晶はザック位相が有限となるトポロジカル物質である」

STEP 1

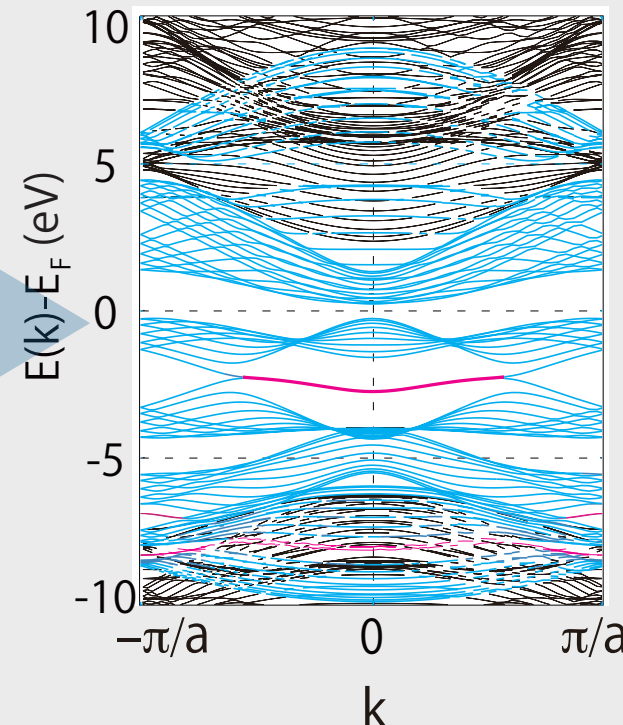
強束縛近似模型

ザック位相が有限  
||  
エッジ状態



STEP 2

第一原理計算



STEP 1

と同様なエッジ状態

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 A3B Monolayers Phys. Rev. B (2019)

## 学会発表

1. **亀田智明**, Liu Feng, 若林克法  
2次元 C3N 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 A3B 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 A3B Monolayers  
The 56th The Fullerenes, Nanotubes and Graphene Research Society Symposium The University of Tokyo, Japan 2019/3/4