

( 続紙 1 )

京都大学	博士 ( 理学 )	氏名	木村 和博
論文題目	Correlation induced topological states and magnetic/electron-nematic phase transitions (電子相関が誘起するトポロジカルな電子状態及び磁性/電子ネマティック相転移の理論的研究)		
(論文内容の要旨)			
<p>2005年のトポロジカル絶縁体の理論的発見は、凝縮系物理においてトポロジーの重要性を再認識させ、その後の超伝導や半金属をはじめとした多くの物質相へ発展するきっかけとなった。さらに、トポロジカル相は半導体などの弱相関系を超えて電子相関が強い「強相関電子系」においても発見されており注目を集めている。電子相関に誘起された様々なタイプのトポロジカル相が理論的あるいは実験的に見つかっている。トポロジカル近藤絶縁体、トポロジカルモット絶縁体、トポロジカルスピン液体などがその典型例として挙げられる。このように電子相関効果によって、弱相関系には現れないような新奇なトポロジカル相が出現する可能性があり、盛んに研究が行われている。以上のことから、電子間相互作用とトポロジカルな電子状態の絡み合いが誘起する協力現象は現代の凝縮系物理において重要な研究課題の一つであると言える。</p> <p>このような背景の下、本学位論文で木村氏は、電子相関が誘起するトポロジカルな電子状態とそれに付随する磁氣的相転移や電子ネマティック相転移に関する理論的研究を行った。本論文は主に、[1]重い電子系における鏡映対称性によって守られた磁性(反強磁性・ハーフメタル強磁性)トポロジカル絶縁体の実現提案(第2章)、[2]電子相関効果に誘起された非エルミートトポロジカル半金属の出現と帯磁率へ及ぼす効果の解明(第3章)、[3]超音波吸収による3状態ポッツネマティック相転移の検出提案(第4章)、という3つの部分から構成される。以下、各項目に分けて要約する。</p> <p>[1] 磁性トポロジカル絶縁体は、系の端での無散逸電流やトポロジカル電気磁気応答等から注目を集めているが、磁気不純物ドーピングによる実現例が多く、バルクでの磁性トポロジカル絶縁体の実現例は限られている。本研究ではSmB<sub>6</sub>薄膜のモデルを念頭におき鏡映対称性を用いた実現シナリオの提案と平均場近似による数値解析を行うことで、重い電子系の磁気秩序相(反強磁性/強磁性)において反強磁性/スピン選択的トポロジカル絶縁体の実現されることを明らかにした。</p> <p>[2] 準粒子の寿命の効果によって誘起された新しいタイプのトポロジカル半金属状態として、準粒子スペクトルに現れる例外点とフェルミアーク構造に注目が集まっている。本研究では例外点と対称性による保護、それに加えて例外面に囲まれたギャップレス状態が電子系の低エネルギー励起にどのような影響を及ぼすかということ調べた。具体的には、ダイヤモンド格子上のハバードモデルを動的平均場近似によって解析し、電子相関効果によってノーダルライン半金属が例外面(トーラス)に変化すること、例外面に囲まれたフェルミ面の出現に由来する帯磁率の上昇と特異な温度依存性を明らかにした。</p> <p>[3] 電子ネマティック状態は非従来型超伝導の発見機構をはじめ物質の多様性の起源を探る上で重要な課題である。トポロジカル超伝導やネマティック超伝導の候補物質として期待されているひねり二層グラフェンやdoped-Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>では超伝導相の近傍で結晶の3重回転対称性を破る電子ネマティック秩序(3状態ポッツネマティック秩序)の出現が示唆されている。本研究では超音波吸収によって3状態ポッツネマティック揺らぎをどのように検出するかという観点から理論研究を行った。現象論的なギンツブルグ・ランダウ理論と拡張ハバードモデルに基づく平均場近似による解析から、3状態ポッツネマティック秩序の臨界的な揺らぎが超音波吸収係数の等方的な発散と弾性定数の等方的なソフト化によって観測できることを提案した。</p>			

(続紙 2 )

(論文審査の結果の要旨)

近年の実験技術の進展と理論研究の発展に支えられ、トポロジカル物質科学は物性物理学における重要なテーマの一つとなっている。特に弱相関係とは異なり、複雑な多体効果を扱う必要のある強相関電子系では、その理論的取扱いが難しく、トポロジカル近藤絶縁体など実験的なふるまいの理解には未だ不十分な点が多い。しかしその一方でひねり二層グラフェンなど新しい物質も次々見つかり、そこでの多彩な量子相の起源を解明することは物性物理学の重要な課題である。このような背景の下、本学位論文は、以下の3つの側面から強相関電子系におけるトポロジカル電子状態を調べた結果をまとめたものである：[1] 鏡映対称性によって守られた重い電子系磁性トポロジカル絶縁体の理論的提案、[2] 電子相関効果に誘起された例外面(トーラス)の出現と例外面に囲まれた低エネルギー励起状態の解析、[3] 3状態ポツツネマティック揺らぎがネマティック-弾性結合を通じて音響フォノンへもたらす効果の解明。以下、各項目に分けて結果の意義を説明する。

[1]では、鏡映対称性を用いることで2次元反強磁性トポロジカル絶縁体やスピン選択的トポロジカル絶縁体の実現されうることを明らかにした。特にスピン選択的トポロジカル絶縁体は、通常のカテゴリカル理論のみから予言することが難しいので基底状態の安定性を数値的に確かめている。重い電子系はスピン軌道相互作用や電子間相互作用が強く、磁性トポロジカル絶縁体の有用な研究舞台を提供すると考えられる。本提案は磁性トポロジカル絶縁体の新たなプラットフォームを切り拓くものとして意義あるものと言える。

[2]では、副格子に依存した相互作用をもつダイヤモンド格子上のハバード模型に動的平均場理論を適用し、ノーダルライン半金属が例外面(トーラス)に変化した際にトーラスに囲まれたゼロエネルギー状態の出現と状態密度や帯磁率への影響を系統的に明らかにしている。その結果、通常のカテゴリカルピークとは異なり、温度上昇に伴って状態密度のピークが発達する振る舞いが生じること、さらにはこの状態密度の上昇によって、副格子上のスピン帯磁率の大きさの逆転が生じることを明らかにしている。特に、帯磁率の振る舞いは、非エルミートなバンド理論に特有のギャップレス状態が物性へ与える影響を調べた研究という観点から、これまでにない示唆に富んだ結果であると言える。

[3]では、GL理論と拡張ハバード模型の計算によって、ネマティック-弾性結合が音響フォノンに与える影響として、超音波吸収係数の等方的な発散と弾性定数の等方的なソフト化を明らかにしている。現象論的な解析を行っているため、ミクロな起源に依らず幅広いクラスの3状態ポツツネマティック相転移に適用可能な点で有用な方法であると考えられる。また、モデル計算を通じて不純物効果の議論も行っており、一次転移性が弱まる振る舞いや超音波吸収係数の波数依存性の指数の変更が生じる可能性を指摘しており、実験を行う上での指針を与えるという意義もある。

重い電子系におけるトポロジカル磁性相や電子ネマティック液体相などの、電子相関によって誘起される多彩な物質相に対して、対称性の観点に加え動的平均場理論などの強力な数値計算手法を駆使してトポロジカル相の安定性や基底状態の性質の解明し検出手法の提案を行った点は新しく、トポロジカル物質科学の研究において重要な意義を持つ。さらに、近年精力的に研究されてきたひねり二層グラフェンにおけるネマティック相に関して、ネマティック-弾性結合を利用した検出手法の提案は当該分野のさらなる研究を促すものである。よって、本論文は博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。また、令和4年1月24日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。

要旨公表可能日： 年 月 日以降