

課題名 (タイトル) :

強相関係におけるトポロジカルに非自明な構造の解析

利用者氏名 : ○吉田恒也

所属 : 古崎物性理論研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

凝縮系物理のここ数年の大きな発展としてトポロジカルバンド絶縁体の発現が挙げられる。この系では自由電子系であるにも関わらず従来のバンド絶縁体とは本質的に異なった新奇な現象が数多く見出されている。その一例として電場で磁化が誘起されるトポロジカル電磁気効果や Majorana fermion といった新しい素励起の発現が挙げられる。

これまで自由電子系のトポロジカル相において上述の物性が報告されてきたが、近年、強相関電子系である Ir 化合物や重い電子系においても量子状態がトポロジカルに非自明な構造を持つ可能性が指摘され、そこでは自由電子系のトポロジカルバンド絶縁体には無かった新しい物性の発現が期待される。しかし、強相関係におけるトポロジカルに非自明な構造を持つ相の研究は始まったばかりであり抽象的な理論研究が先行している。そのため実験的な研究の重要な指針を与える現実的な系、化合物を念頭に置いた数値シミュレーションが欠如している。特に現実的には温度は重要なパラメータであるにもかかわらず、有限温度効果は解明されていない。

そこで本研究ではこの基本的かつ重要な有限温度効果に焦点を当てた研究を行った。特に強相関トポロジカル物質の有力候補である SmB<sub>6</sub> に対する詳細な解析を行った。以下に取り組んだ二つのサブテーマを挙げる。

- (a) 二次元重い電子系のトポロジカル相における有限温度効果
- (b) 有限温度領域における三次元重い電子系物質 SmB<sub>6</sub> の表面状態

2. 具体的な利用内容、計算方法

- (a), (b) 両方のサブテーマに取り組むにあたり非

常に強い Coulomb 相互作用を取り組むために動的平均場理論 (DMFT) と数値繰り込み群 (NRG) に基づく解析を行った。またサブテーマ (b) に関しては SmB<sub>6</sub> の詳細な電子構造を考慮に入れるため第一原理計算も援用した。

3. 結果

サブテーマごとに分けて述べる。

-(a) 二次元重い電子系のトポロジカル相における有限温度効果- 本サブテーマではトポロジカルに非自明な相を示す自由電子系の Kane-Mele モデルを重い電子系へと拡張した Kane-Mele-Kondo 格子モデルを解析した。解析の結果、重い電子系に普遍的に見られる近藤効果がトポロジカルに非自明な構造を破壊することを明らかにした。さらにそのような場合においても有限温度領域においては温度効果が近藤効果を抑制しトポロジカルに非自明な構造を修復することも明らかとした。

-(b) 有限温度領域における三次元重い電子系物

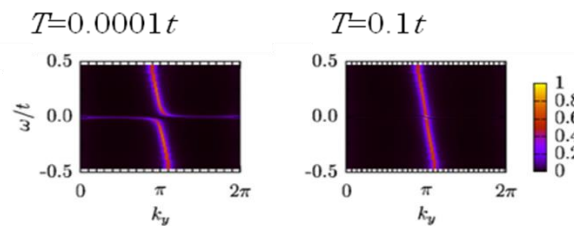


Fig.1:二次元系のトポロジカルに非自明な重い電子系を記述するKane-Mele-Kondo格子系における表面状態。(縦軸: エネルギー 横軸: 運動量。飛び移り積分をエネルギーの単位としている。)  $T=0.0001t$  の低温ではゼロエネルギー近傍に gap が形成されているが、温度の上昇によりこの gap は消え、有限温度領域のみでトポロジカルに非自明な性質がみられる。

質 SmB<sub>6</sub> の表面状態- 本サブテーマでは第一原理計算により SmB<sub>6</sub> に対し詳細な解析を行った。この物質は強相関トポロジカル物質の有力候補であり、最近集中的な実験がなされている。しかし、この物質においては電気抵抗測定、光電子分光測定における電子の有効質量の矛盾が未解決

の問題であった。第一原理計算を援用した動的平均場理論に基づく解析により、上述の電子の有効質量に関する問題は温度効果によるものであり、10K ほどの僅かな違いが  $\text{SmB}_6$  の表面状態を劇的に変化させている事を明らかとした。(Fig.2)

#### 4. まとめ

本研究では重い電子系を中心として非常に高

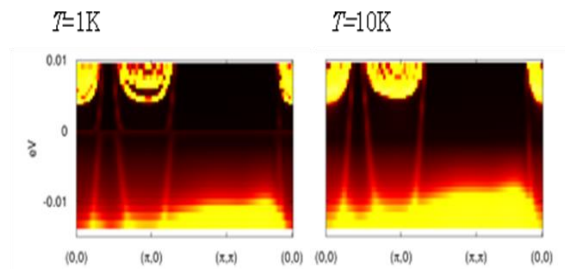


Fig. 2:  $\text{SmB}_6$  の表面における電子状態 (縦軸: エネルギー[eV] 横軸: 運動量)。 $T=1\text{K}$  で見られるゼロエネルギー付近にあった平坦な構造が温度の上昇により消失していることが見られる。

精度な解析を行った。解析の結果、僅かな温度パラメータの違いが系の物性に大きな違いをもたらすことを解明した。

#### 5. 今後の計画・展望

本研究では、強相関係の一例として重い電子系を取り上げ、強相関トポロジカル物質における温度効果を解析した。また、温度効果はどの系でもあり今後、実験的観点からその解明の必要性が増してくると考えられる。そのため、今後の展望としても一つの強相関係の代表例である遷移金属化合物を念頭に置いた解析、また、anyon といった新しい素励起を含む系の有限温度効果の解明が求められる。

#### 6. 利用がなかった場合の理由

該当しない。

平成 27 年度 利用研究成果リスト

**【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】**

著者：Robert Peters, Tsuneya Yoshida, Hirohumi Sakakibara, and Norio Kawakami

論文題名：Coexistence of light and heavy surface states

in a topological multi-band Kondo insulator

誌名：Physical review B (査読中)

**【国際会議、学会などでの口頭発表】**

発表者名：Robert Peters, Tsuneya Yoshida, Hirohumi Sakakibara, and Norio Kawakami,

講演題名："LDA/DMFT study of the topological Kondo insulator SmB<sub>6</sub>"

会議名：日本物理学会秋季大会

発表年月：2015 年 9 月

発表者名：吉田恒也、Robert Peters、川上則雄

講演題名：重い電子系のトポロジカル相における有限温度効果

会議名：日本物理学会年次大会

発表年月：2016 年 3 月

発表者名：Tsuneya Yoshida, Robert Peters, and Norio Kawakami

講演題名：Analysis of Kane-Mele-Kondo lattice at finite temperatures

会議名：APS march meeting 2016

発表年月：2016 年 3 月