

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 磯部 大樹

固体電子にトポロジーという概念・方法が導入された契機は量子ホール効果の発見である。対称性の破れを伴わないが、通常のバンド絶縁体とは質的に異なる絶縁体の存在は、新しい物質の分類学を予見させるものであったが、一方で量子ホール系は2次元、低温、強磁場下という極限状況でのみ実現することからその広がりには限られてきた。この状況が変わったのは、内因性異常ホール効果、内因性スピンホール効果の研究によって、ブロッホ波動関数のトポロジカル構造が広く一般に存在することが認識され、それがトポロジカル絶縁体の発見につながったことによる。ギャップを持つ電子状態を分類する数学的理論が発展し、さらにワイルフェルミオンなどのギャップレスの状態までもトポロジーから理解されるようになってきた。これらの背景の下、磯部氏は、このようなトポロジカルな性質と、電子相関効果が織りなす協奏を理論的に明らかにすることを目的として、

1. ワイルフェルミオンにおける電子間クーロン相互作用の繰り込み群による解析およびその有機物質 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ への応用、
 2. 2原子模型におけるスピン軌道相互作用と電子相関、
 3. 結晶性トポロジカル絶縁体における電子相関効果と分類学の変化、
- に関する研究を行った。

1. については、結合定数や電子と光の速度が相互作用によってどのように繰り込まれるかを明らかにし、それが α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ におけるNMRの帯磁率の温度依存性を良く説明することを見出した。2. では、1原子のフント則を、電子移動のある2原子模型へと拡張し、特に相互作用によって実効的なスピン軌道相互作用が増大する条件を明らかにした。3. では、エッジモードの相互作用に対する安定性解析から、ミラー対称性による結晶性トポロジカル絶縁体の分類が2次元ではZからZ $_4$ へ、3次元ではZからZ $_8$ へと変化することを見出した。

第1章は、イントロダクションとして、まず本論文の目的とスコープが述べられ、その後トポロジカル絶縁体、ワイル半金属、 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の物性、相互作用によるトポロジカルモット絶縁体、トポロジカル周期律表、など分野の基礎事項をまとめてある。

第2章は、トポロジカル量子相転移点で現れるマスレスディラックフェルミオン・ワイルフェルミオンが電磁場と結合した模型の、繰り込み群による解析を記述している。この模型は量子電磁気学(QED)と深く関連するが、電子のフェルミ速度と光速が異なることが、固体電子の特徴である。縦・横双方の電磁場との結合を考え、1ループの繰り込み群の計算を行うと、結合定数はmarginally irrelevantとなり、電子のフェルミ速度と光速もそれぞれ繰り込みを受けるが、低エネルギー極限で両者が同じ値に収束することを見出した。

また、繰り込み群方程式の数値解に対して、きわめて正確な近似解を求めることにも成功した。

第3章は、第2章の結果を受けて、具体的な物質 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ を調べた。この層状有機物質では、ワイルフェルミオンがバンド構造に現れることが知られており、また電荷秩序が相図において近傍に存在することからも電子相関が強いことが予想される。また、ワイルフェルミオンの分散が傾いていることも特徴として挙げられる。この傾いたワイルフェルミオンに対して、電子間クーロン相互作用を摂動論により1ループの範囲で扱い、繰り込み群の方程式を導いた。これにより帯磁率の温度変化を計算し、鹿野田グループのNMRの実験結果と比較することにより、後者の結果を低温ではほぼ再現することを見出した。

第4章は、2原子模型におけるスピン軌道相互作用と電子相関効果の厳密対角化による研究について述べられている。フント則は、1原子に対して電子相関が電子系の基底状態をどのように決定するかを定める規則である。このフント則を、2原子間に電子移動を入れた模型に対して拡張するとともに、スピン軌道相互作用と電子相関効果の協奏を調べることを目的とした。 t_{2g} の3重縮退した軌道を考え、軌道内クーロン反発 U 、軌道間クーロン反発 U' 、交換相互作用 J を取り入れて基底状態を数値的に求めた。その結果は、電子数に強く依存し、特に電子数が4、5の場合に、中間的な全スピン数の状態が出現し、そこでスピン軌道相互作用の電子相関による増強が見られることが分かった。この知見は、スピン軌道相互作用の物質設計に寄与することが期待される。

第5章は、結晶性トポロジカル絶縁体の電子間相互作用に対する安定性解析について議論している。トポロジカル絶縁体ではギャップレスのエッジ状態や表面状態が現れるが、(摂動のエネルギー分母を考えれば)そこでは電子間相互作用が最も有効に働くと考えられる。そこで、まず2次元結晶性トポロジカル絶縁体の試料端に現れる相互作用する多チャンネルのヘリカルエッジモードを考え、相互作用によってギャップが発生する条件を考えた。その結果、4チャンネルの場合にはすべてのモードにギャップが開く可能性があること、したがってトポロジー的分類が、相互作用がないときの Z から Z_4 へと変化することを見出した。この議論を3次元に拡張することで、その場合には Z から Z_8 になることを結論した。

第6章は、全体のまとめと今後の研究の方向について述べられている。

以上本論文は、トポロジーと電子相関の関わりに関する上記3つのテーマについて、理論の立場から実験を意識した最前線の研究を行い、新たな側面を見いだしたものであり、本研究の成果は今後の理工学の発展に大きく寄与することが期待される。

よって、本論文は博士(工学)の学位論文として合格と認める。