

対称性の表現に基づくトポロジカル材料の探索 Topological Material Search based on Symmetry Indicators

東大物工¹

Applied Physics, Univ of Tokyo¹,

E-mail: hwatanabe@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

結晶は格子並進の対称性や空間反転対称性、回転対称性といったさまざまな対称性を持つ。本研究課題では、物質の持つ対称性やその表現に基づいて、トポロジカル超伝導体や高次トポロジカル絶縁体など各種のトポロジカル相を実現する具体的な物質を探索・提案することを目標に研究を行ってきた。

トポロジカル超伝導物質探索に関しては、これまでトポロジカル絶縁体の探索に使われてきた「対称性指標の方法」をトポロジカル超伝導体の探索へと使えるように拡張する研究をおこなった[1-i,ii]。さらに、この方法を第一原理計算と組み合わせるためのパッケージを公開し[1-iii]、実際にデータベース上のさまざまな物質に対してトポロジーを判定し、検索のしやすい形にまとめあげた[1-iv]。高次物質相の探索では、結晶の角に現れる「分数コーナー電荷」とバルクの電気多極子の関係に着目した。バルクの電気分極は1990年代にVanderbiltとKing-Smithらによってベリー位相公式が提案されたが、電気多極子に関してはその定式化から見直す必要があった[2-i,ii]。この一般論に基づき、「塩」として日常利用しているNaClの結晶の角に電荷が局在すること、さらにその大きさが素電荷 e の $1/8$ の大きさに量子化されることを発見した[2-iii]。

この他にも、物質の磁気多極子についての考察から派生して、平衡状態に流れる永久電流に関する一連の研究をおこなった。本講演ではこれらの研究成果を、それぞれより詳細に紹介する。

[1-] S. Ono, Y. Yanase, and H. Watanabe, *Symmetry indicators for topological superconductor*, *Physical Review Research* **1**, 013012 (2019).

[1-ii] S. Ono, H. C. Po, and H. Watanabe, *Refined symmetry indicators for topological superconductors in all space groups*, *Science Advances* **6**, eaaz8367 (2020).

[1-iii] A. Matsugatani, S. Ono, Y. Nomura, and H. Watanabe, *qeirreps: an open-source program for Quantum ESPRESSO to compute irreducible representations of Bloch wavefunctions*. *Computer Physics Communications* **264**, 107948 (2021).

[1-iv] F. Tang, S. Ono, X.-G. Wan, H. Watanabe, *High-throughput Investigations of Topological and Nodal Superconductors*, arXiv:2106.11985.

[2-i] S. Ono, L. Trifunovic, and H. Watanabe, *Difficulties in operator-based formulation of the bulk quadrupole moment*, *Physical Review B* **100**, 245133 (2019).

[2-ii] H. Watanabe and S. Ono, *Corner charge and bulk multipole moment in periodic systems*, *Physical Review B* **102**, 165120 (2020).

[2-iii] H. Watanabe and H. C. Po, *Fractional Corner Charge of Sodium Chloride*, *Physical Review X* **11**, 041064 (2021).