

量子多体系における電気多極子と高次トポロジカル絶縁体



多田 靖啓

広島大学/東京大学物性研究所
ytada@hiroshima-u.ac.jp



押川 正毅

東京大学物性研究所
oshikawa@issp.u-tokyo.ac.jp

孤立原子の電子波動関数が s 波, p 波, d 波... という角運動量の異なる成分に分解することができるように, 系の電荷分布は単極子, 双極子, 四重極子... などの多極子の重ね合わせとして記述できる. しかし, 結晶中の電子系に対して多極子を計算することは本質的に難しく, その一般論は未だに確立していない. その一つの理由が, 多極子には単位胞内における局所的な電荷分布だけでなく, 表面電荷を含む物質全体にわたる大域的な電荷分布も寄与するからである. 表面電荷は, 一般に表面の詳細などの外因的な要因に依存するため, 普遍性をもたないように思われる. すると, 多極子も同様に普遍性をもたないことになり, 系の性質を特徴づけるものではなくなってしまふ. しかし, 表面電荷の中には表面の詳細などに依存する外因的なものだけでなく, 系に固有の表面電荷という内因的な寄与が存在している. 表面における内因性の発現という現象は, **バルク境界対応**としてトポロジカル物性の文脈では主要なテーマの一つとして広く議論されている. 実際, 内因性の電気双極子は**トポロジカル絶縁体**の研究において重要な役割を演じてきた. 同様に, 内因的な表面電荷のみによって定義される多極子を考えると, これは系の普遍的な性質を特徴づけるはずである. このような意味で, 多極子はトポロジカル物性の基礎となる, バルク境界対応を示す基本的物理量であると期待できる.

実際, 2017年頃に電気双極子をもつ絶縁体を高次電気多極子をもつ絶縁体(高次トポロジカル絶縁体と呼ばれる)に拡張しようという提案がなされた. 例えば電気四重極子の場合には, 開放境界条件の下で系の

角にプラス・マイナスの内因的な電荷が局在し, 系全体の電荷分布が d 波のような構造をもっている. この内因的な表面電荷の多極子への寄与は, バルク境界対応の観点から系の内部情報によって決定可能だと期待される. より具体的に言えば, 周期的境界条件のもとで, (内因的な) 表面電荷の寄与を含めた電気多極子を計算できるか? という問題になる. 電気双極子に関しては, 自由電子系についての**ベリー位相理論**は大きな成功を収め, 相互作用をもつ系についても**レスタ理論**が確立されている. レスタ理論により周期境界条件の下で計算可能な量は, 系の電気双極子を完全には決定しないが, ある単位の整数倍のみの不定性をもつ. 一方, 分数部分は完全に決定可能であり, これが内因的な表面電荷に起因する電気双極子に対応する. これは, トポロジカル絶縁体の一般化である**対称性に守られたトポロジカル相**の記述においても基本的なものである.

しかし, 様々な研究が行われてきたにもかかわらず, 四重極子以上の多極子については, レスタ理論に対応する一般的な方法論が確立していない. 表面電荷まで取り入れたうえで内部情報だけを用いて多極子を記述するには, どうすればよいのだろうか.

この問題に対して, 多極子は電場応答により定まるという基本的な物理に基づいて定式化を行うことで, レスタ理論を多極子に拡張できることが分かってきた. そのようにして定義される多極子指標は, バルク境界対応を示すとともに, 多極子に対応する点群対称性の下で量子化され, 自明相と非自明相を区別するトポロジカル秩序変数として振る舞う.

用語解説

バルク境界対応:

系の内部(バルク)の情報と表面(境界)の性質が結びつく対応の総称. しばしば, 周期境界条件の下で定義されるトポロジカル数によって, 開放境界条件の下での表面状態の存在が特徴づけられる.

トポロジカル絶縁体:

適当な対称性の下で, 内部はエネルギーギャップのある絶縁体的状態であるが, 表面はギャップのない金属的状态である系のこと.

ベリー位相理論:

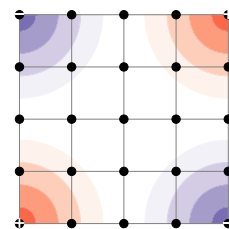
系のパラメータ変化に付随して波動関数から定まるベリー位相を用いて, 電気双極子を記述する理論.

レスタ理論:

適切な演算子の基底状態での期待値として電気双極子を記述する理論. 1次元系ではベリー位相理論と等価である.

対称性に守られたトポロジカル相:

トポロジカル絶縁体を一般化した状態であり, 適当な対称性の下で基底状態は縮退しておらずエネルギーギャップをもつ.



電気四重極子の模式図.