社会的課題の解決に向けた数学と諸分野の協働
H28 年度採択研究者

2018 年度
実績報告書

寺本　央

北海道大学電子科学研究所
准教授

特異点論の物質科学への応用

§1. 研究成果の概要

・結晶の対称性、各バンドの属する既約（複）表現の情報からハミルトニアンの一般形(例は、Bi2Se3 のフェルミ面近傍の 4 状態に Hamiltonian を射影したもの)

$$
\begin{aligned}
H(k) \;=\;& f_1(u,v,w)\left(i(k_+ - k_-)\Gamma_1 + (k_+ + k_-)\Gamma_2\right) \\
+\;& f_2(u,v,w)\left(k_+^4 - k_+^3 k_- - k_+ k_-^3 + k_-^4\right) k_3\Gamma_1 - i\left(k_+^4 + k_+^3 k_- - k_+ k_-^3 - k_-^4\right) k_3\Gamma_2 \\
+\;& f_3(u,v,w)\, k_3\left(\left(k_+^2 + k_-^2\right)\Gamma_1 + i\left(k_+^2 - k_-^2\right)\Gamma_2\right) \\
+\;& f_4(u,v,w)\left(i\left(k_1^5 - k_2^5\right)\Gamma_1 - \left(k_1^5 + k_2^5\right)\Gamma_2\right) \\
+\;& f_5(u,v,w)\left(k_+^3 + k_-^3\right)\Gamma_3 \\
+\;& i f_6(u,v,w)\left(k_+^6 - k_-^6\right) k_3\Gamma_3 \\
+\;& f_7(u,v,w)\, k_3\Gamma_4 \\
+\;& i f_8(u,v,w)\left(k_+^3 - k_-^3\right)\Gamma_4 \\
+\;& f_9(u,v,w)\,\Gamma_5 \\
+\;& i f_{10}(u,v,w)\left(k_+^3 - k_-^3\right) k_3\Gamma_5
\end{aligned}
$$

where $k_\pm = k_1 \pm i k_2$, $u = k_+ k_-$, $v = k_+^6 + k_-^6$, $w = k_3^2$, $f_j ; \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ are C^∞-map germs at the origin.

を不変式論を用いてシステマティックに導出するアルゴリズムを作成。先行研究 PHYSICAL REVIEW B 82, 045122 (2010)では 4 ページぐらいをかけて導出されているが先行研究では見落とされている項があることが分かった。このようなシステマティックなアルゴリズムの開発により導出の手間を削減し、手計算によるエラーを排除可能となった。

・上記の Hamiltonian は複雑な構造をしており、その Hamiltonian がどのようなバンドの幾何構造を持っているのかは直ちに明らかではない。一般的には、Hamiltonian を k に関してテーラー展開をし、leading order だけを取り出して議論することが行われているが、我々はいくつかの例でそれが誤ったバンドの幾何構造を与えてしまう例を見出した。その場合には leading order だけではなく、特異点論でいうところの有限確定性のオーダーを見積もり、そのオーダーまでテーラー展開をする

必要がある。このような視点は従来の物性物理には欠けていたが、我々の特異点論のフレームワークを用いることで、そのような問題を回避することができるようになった。
・包括的グレブナー基底系を用いることで上述のような Hamiltonian にとどまらず一般の写像の特異点分類も自動的に行うことができるようになった。従来、特異点分類が複雑なモジュライパラメータを含むような場合の分類は技術的に困難であったが、このアルゴリズムの開発によりそのような場合にも機動的に分類を進めることが可能となり、特異点論に新たな発展をもたらすものと期待される。

§2. 研究実施体制

①研究者：寺本　央（北海道大学電子科学研究所　准教授）
②研究項目
- 包括的グレブナー基底系を用いた特異点分類の自動アルゴリズム
- 固体のバンド交差の幾何構造の分類、分岐と不変量の解析、それと大域的なトポロジカルな性質との関連を解析
- 断熱ポテンシャルの交差の幾何構造の解析とその近傍で起こる非断熱遷移ダイナミクスの漸近解析