

渡邊 悠樹

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 准教授

対称性の表現に基づくトポロジカル材料の探索

§ 1. 研究成果の概要

本研究課題では、バンド構造の持つ空間群の対称性の表現に基づいて、トポロジカル物質を効率良く網羅的・系統的に探索することを最終的な目標としている。今年度はその準備として

(1) 効率的なトポロジカル超伝導体探索の手法を作る基礎的な理論研究

(2) 実際のバンド計算に際して空間群の表現を求める実用的なプログラムの開発

を並行して行なった。密度汎関数理論に基づくバンド計算では、超伝導相の擬粒子励起のバンド構造を直接計算することはできず、常伝導相のバンド構造しか得ることができない。このことを踏まえて、「常伝導相の占有バンド構造に現れる空間群の表現」だけに基づいて、効率的に「超伝導相のトポロジー」を判定する方法論を構築した。

また、当初想定したトポロジカル超伝導体や磁性体にとどまらず、近年活発に研究されている高次トポロジカル絶縁体やそれに関係するトポロジカル電気四重多極子絶縁体をもカバーするために、これらのトポロジカル絶縁体をいかに特徴付けることができるかについての基礎的な理論研究を行なった。

これらの成果は現在国際誌の査読中である。

§ 2. 研究実施体制

①研究者:渡邊 悠樹 (東京大学大学院工学系研究科 准教授)

②研究項目

- ・効率的なトポロジカル超伝導体探索の手法を作る基礎的な理論研究
- ・実際のバンド計算に際して空間群の表現を求める実用的なプログラムの開発