

トポロジカル材料科学と革新的機能創出
2018 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書

渡邊 悠樹

東京大学 大学院工学系研究科
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

絶縁体の電気多極子と、ヒンジやコーナーに現れる分数電荷との関係について、大きな進展があった。電気多極子をバルクワニエ関数の広がりを用いて表現し、それをヒンジやコーナーの分数電荷と直接結びつける解析的な表式が得られた。また点群の対称性の下でこの公式が filling anomaly の式と関係し、各ワイコフ位置に属する電荷によって簡単に表現できることを突き止めた。この成果に基づいて、さまざまなイオン結晶が実は多極子絶縁体であり、特に身の回りにある塩の結晶ですらも、 $e/8$ という分数電荷を持つということを見出した。この論文自体はまだプレプリントにある段階だが、今後の発展余地も十分あると考えている。

金属の高次応答についても、大きな進展があった。Drude weight や sum rule と言われる線形応答の物理量が、自然に高次応答に拡張できることを突き止めた。この非線形応答がもっとも顕著に現れる系を見つけたので、現在論文にまとめている。

対称性指標を用いた物質に関しても、いくつか発展があった。qeirreps という Quantum Espresso による第一原理計算結果に基づいて物質の既約表現の指標を計算するプログラムの公開と、それに関連する論文を公開した。また、この発展形として、超伝導物質へ応用しその対称性指標を計算するプログラムやデータベースの公開をあと一步のところまで進めている。

【代表的な原著論文情報】

- 1) S. Ono, H. C. Po, H. Watanabe, “Refined symmetry indicators for topological superconductors in all space groups”, *Sci., Adv.*, 6, 18 (2020).
- 2) H. Watanabe, S. Ono, “Corner charge and bulk multipole moment in periodic systems”, *Phys. Rev. B* 102, 165120 (2020).
- 3) H. Watanabe, M. Oshikawa, “Generalized f-sum rules and Kohn formulas on nonlinear conductivities”, *Phys. Rev. B* 102, 165137 (2020).
- 4) H. Watanabe, Y. Liu, M. Oshikawa, “On the General Properties of Nonlinear Optical Conductivities”, *J. Stat. Phys.* 181, 2050 (2020).
- 5) A. Matsugatani, S. Ono, Y. Nomura, H. Watanabe, “qeirreps: an open-source program for Quantum ESPRESSO to compute irreducible representations of Bloch wavefunctions”, *Computer Physics Communications* 264, 107948 (2021).