

「原子・分子・光物理学におけるトポロジカル物性とその応用」

研究期間：2019年10月～2023年3月

研究者：小澤 知己

1. 研究のねらい

近年、原子・分子・光物理のプラットフォームにおいてさまざまなハミルトニアン・モデルを実現してその性質を調べる研究が活発である。代表的な系として、冷却原子系、フォトニック結晶、光共振器格子、トラップイオン、格子ポテンシャル中の励起子などがある。電気回路や超伝導量子回路も広義での原子・分子・光物理のプラットフォームと呼んでも良い。以下、これらの系をまとめて人工量子系と呼ぶ。人工量子系の特徴はレーザーやエレクトロニクス技術を用いた対象の精密な制御で、格子の形状や運動エネルギー・相互作用の大きさなどさまざまなパラメータを実験的にコントロール可能であることが多い。このフレキシビリティを用いてさまざまなトポロジカルなバンド構造を持つモデルを実現してその性質を調べることでトポロジカル物性の理解をどのように深めていけるのか、それを理論的に探究するのが目標である。

本研究には大まかに次の3つのテーマがある。

- ① 人工量子系特有の観測・シミュレーション手法によるトポロジカル現象の探求
- ② 散逸系・開放系特有のトポロジカル現象の探求
- ③ 人工量子系のトポロジカル現象のデバイスへの応用

①としてまず念頭にはあるのはまずトポロジーや幾何学的性質を人工量子系特有の観測方法を用いて直接的に観測し、その性質を調べることである。また、低次元系で高次元モデルをシミュレートする人工次元の方法の探究など、従来実現の難しかったモデルの実現を目指し、そこで生まれるトポロジカルな現象を明らかにする。

次に②だが、人工量子系はしばしば散逸など環境との相互作用を本質的に伴う。散逸系・開放系は非エルミートなハミルトニアンで有効的に記述できる場合があるが、非エルミート系のトポロジーはエルミートな場合と異なる。非エルミート系・開放系の幾何学的な性質やトポロジーを人工量子系を舞台に明らかにしていく。

最後に③では人工量子系でのトポロジカルな性質を用いた有用なデバイス作成の可能性を探る。これは、人工次元を用いた光集積回路の探究や、トポロジカル端状態からレーザー発振するトポロジカル・レーザーの性質を調べることを念頭に置いている。

まとめると、固体電子系で発展してきたトポロジカル物性の考え方を原子・分子・光物理のプラットフォームに適用することで固体電子系では見つけることの難しい原子・分子・光物理特有のトポロジカルな現象を追求することが本研究のねらいである。

2. 研究成果

(1) 概要

主な研究成果リストに記載した3つの論文を中心に研究成果の概要を示す。

まず、研究テーマ①「人工量子系特有の観測・シミュレーション手法によるトポロジカル現象の探求」に関しては一番大きな成果は量子計量とベリー曲率の間に一般に成り立つ不等号において等号が成り立つ条件を数学的・物理的に明らかにしたことである。この不等号は、物理的には、考えているモデルが一様磁場中の荷電粒子、つまりランダウ準位に近いほど等号に近づくことが分かった。ランダウ準位との類推から、等号が成立するモデルでは適切な相互作用の下で分数量子ホール状態を基底状態として持つことも期待される。トポロジカルなチャーン数はベリー曲率の積分で決まるため、等号が成立する状況では量子計量という計量の情報からバンド構造のトポロジーが完全に決定される。数学的には、この等号は運動量空間から量子状態の空間への写像が複素写像として正則になることであることも明らかにした。逆に、トーラス上の正則写像(テータ関数)を用いて等号が成立するモデルを構成することにも成功した。

次に研究テーマ②「散逸系・開放系特有のトポロジカル現象の探求」に関しては主な研究成果リスト2に載せた論文において非エルミート系におけるベリー接続・ベリー位相の効果を明らかにした。エルミート系ではパラメータに依存したハミルトニアンに従う量子系でパラメータを断熱的に変化させると、パラメータ空間上の変化が閉曲線を描く時に波動関数にはゲージ不変な位相であるベリー位相がつく。私は、非エルミート系では一般化されたベリー位相は実部と虚部を持ち、この虚部はパラメータ空間上の変化が閉じていなくてもゲージ不変になることを発見した。そして、ベリー位相の虚部は波動関数のノルムの変化として観測可能だということを論じた。この結果は同じ論文において結合振動子系を用いて実験的にも確かめられている。

最後に研究テーマ③「人工量子系のトポロジカル現象のデバイスへの応用」に関しては、主な研究成果リスト3に載せた論文においてシリコンフォトニクスプラットフォームで周波数人工次元を実現した。この実験の理論部分を私が担当している。光共振器に変調を加えることで共振器の振動モード間にホッピングを誘起し、電場や磁場の効果も取り入れた一次元格子モデルをシミュレートしてバンド構造を測定することに成功した。

このほかにも、新しい人工次元の提案、アクティブマターにおけるトポロジカルエッジ状態の研究、非エルミート量子多体系のトポロジー、励起子ポラリトンとの実験の共同研究などさまざまな研究を行ったが、詳しくは次の詳細に記す。

(2) 詳細

研究テーマ①「人工量子系特有の観測・シミュレーション手法によるトポロジカル現象の探求」

このテーマは大きく二つの方向に分けることができる。一つ目は人工量子系ならではの観測方法等を用いた幾何学的バンド構造とくに量子計量の研究で、二つ目は人工次元を用いたトポロジカルバンド構造の研究である。また、これら以外にも研究テーマ①に分類するのが適当な論文も単発的にいくつか書いており、実験家との関連した共同研究もある。以下、それぞれについて成果と達成状況を説明する。

幾何学的バンド構造とくに量子計量の研究

このテーマに関連する理論の論文として下記主な研究成果リストで挙げた論文1に加え、Mera

and Ozawa, PRB **104**, 045104 (2021)と、Mera and Ozawa, PRB **104**, 115160 (2021)がある。これらの論文では、以前から知られていた2次元系における量子計量 $g_{ij}(\mathbf{k})$ とベリー曲率 $\Omega(\mathbf{k})$ の間の不等号

$$\sqrt{\det(\mathbf{g}(\mathbf{k}))} \geq |\Omega(\mathbf{k})|/2$$

において等号が成立する条件を明らかにした。この条件は具体的にはパラメータ空間(運動量空間やひねり境界条件の空間)から量子状態の空間(単一バンドを考えているなら複素射影空間)への写像が複素写像として正則になることである。もう少しこの条件の物理的意味について説明する。一様磁場中の荷電粒子のエネルギー固有状態はランダウ準位と呼ばれる。ランダウ準位は適切なゲージのもとで座標の正則関数として書けることが知られており、これが分数量子ホール効果におけるラフリン波動関数の形を決めるのであった。実はランダウ準位を適切に書き直すと実空間だけでなく運動量空間の関数として考えた時にも正則関数(テータ関数)の形になっており、したがって上の等号成立条件を満たしている。物理的にはこの不等号が等号に近づく条件は模型が「いかにランダウ準位に似ているのか」を表している。例えば、磁場中の正方格子の模型である Hofstadter 模型は弱磁場の極限でランダウ準位に漸近することが知られているが、実際に量子計量とベリー曲率を調べてみると磁場を弱くすると不等号が等号に近づいていくことがわかる。等号が成立する模型はランダウ準位に似ていることから、そこから分数量子ホール状態を実現することができると期待されており、興味を持たれている。これらの論文で私は、正則関数を用いて等号が成立する模型を構成する方法も提案している。これらの論文の結果は人工量子系に限らず固体電子系その他の一般の系で成り立つものだが、本さきがけ研究で行なった意図としてはこの結果をいずれ人工量子系で検証することができるだろうという期待があったからである。実際、例えば Yi et al. arXiv:2301.06090 において冷却原子系で結果の一部が実験的に検証されている。

人工次元を用いたトポロジカルバンド構造の研究

人工次元とは、内部自由度など非空間的自由度を次元として用いて高次元模型を低次元系で実現する方法である。私はこのさきがけ期間中に2つの新しい人工次元の方法を提案し、そこでトポロジカルバンド構造がどのような現象をもたらすのかを調べた。

一つ目は Price, Ozawa, Schomerus, PR Reseach (2020)で、メゾスコピックなリング中を動く電子がナノ磁石と結合している系を考え、磁石のスピン自由度を人工次元として整数量子ホール効果を示す系にマッピングできることを証明した。私の知る限り、メゾスコピック系で人工次元を提案したのはこの論文が初めてである。

もう一つは Ozawa, PRA (2021)で、x 方向に一次的に伸びたチューブを y 方向に多数並べ、そこに調和振動子型ポテンシャルを中心位置が適切に y に依存するように与えると、x-py 空間において一様磁場中の荷電粒子と同じハミルトニアンが実現されることを示した。ここで py は y 方向の運動量である。この提案がユニークなのは、通常量子ホール効果のハミルトニアンを実現するには時間反転対称性を破らなければいけないのに反し、実空間・運動量空間のハイブリッド空間を用いることで物理的な時間反転対称性を破らずに量子ホール効果を実現できる点にある。これは、x-py 空間における時間反転対称性が通常の空間におけるパリティ対称性になっており、パリティをやぶることで x-py 空間の有効的な時間反転対称性を破ることができるためである。

実験家との共同研究

詳細は割愛するが、フランスの CNRS とリール大学の実験家との共同研究 Jamadi et al., *Light: Science and Applications* (2020) と Real et al., *PRL* (2020) では励起子ポラリトンで固体電子系では難しいトポロジカルあるいは幾何学的バンド構造を実現することに成功している。また、中国の華中科技大学の実験家との共同研究 Yu et al. *npj Quantum Information* (2022) ではダイヤモンド NV 中心において量子計量の測定を通じて量子推定におけるパラメータ推定の限界である量子 Cramér-Rao 限界を実験的に検証することにも成功した。

研究テーマ②「散逸系・開放系特有のトポロジカル現象の探求」

振動子の結合系における非エルミート物性

非エルミート系における幾何学的効果やトポロジーの効果を探求するという方向では、まずはイリノイ大学アーバナ・シャンペーン校の Gadway 研究室とバーミンガム大学の Price 研究室との一連の共同研究を挙げたい。この共同研究からは3本の論文, Anandwade et al. *arXiv* (2021), Singhal et al. *arXiv* (2022), Martello et al. *arXiv* (2023), を投稿しているが、いずれもまだ出版されてはいない。Singhal et al は下記主な研究成果リストで論文2として挙げている。これらの論文では、2個の振動子を結合させて適切な極限で2準位系のシュレディンガー方程式をシミュレートする方法を探求した。ここで、シミュレートするハミルトニアンは非エルミート性・非線形性を含む任意のものにできる。特に私の最大の貢献は、非エルミートハミルトニアンに含まれるパラメータを断熱的に変化させたとにベリー位相がどのような形で波動関数に影響を与えるのかを理論的に明らかにしたことである。

アクティブマターにおけるトポロジカルエッジ状態

こちらはまだ投稿中で出版されていないが、Yamauchi et al. *arXiv* (2020)においてカイラリティのあるアクティブマターにおいてトポロジカルエッジ状態が観測可能であることをマウスの神経幹細胞を用いた実験との共同研究で明らかにした。(これは理研の川口研および慶應大学の早田氏との共同研究である。)マウスの神経幹細胞は培養して適切な環境に置くと動き回ることができる。特に2次元平面上の限られた領域を動けるようにすると、領域の端近くを好んで動き回るように見える。また、幹細胞の密度のゆらぎの時間変化から集団運動の分散関係を測定すると、端近くに線形な分散が見える。この線形分散がトポロジカルエッジ状態に他ならないことを、幹細胞集団をアクティブマターとしてモデル化することで理論的に示すことができた。幹細胞の動きに自然に存在するカイラリティが時間反転対称性を破り、エネルギーバンドのチャーン数がゼロではない値を取るようになる。なお、アクティブマターはエネルギーを保存せず、導出されるモデルは非エルミートなものになるが、ここで見られるトポロジーはいわゆる線ギャップのもとのものであり、トポロジカル数やバルク・エッジ対応はエルミート系のチェーン絶縁体と同様のものが成り立つ。

非エルミート量子多体モデルの提案

Faugno and Ozawa, *PRL* (2022)では、量子的な粒子間相互作用によってトポロジーが誘導されるようなモデルを提案した。このモデルは一粒子のレベルではトポロジカルに自明だが、粒子が二つあるときには複素エネルギーの空間に点ギャップ(ある複素エネルギーの周りを囲むよう

なエネルギースペクトル)を生じる非自明なトポロジを示す。ここで相互作用として考えているのはホッピングが粒子数に依存するようないわばダイナミカルなゲージ場の効果である。本論文ではこのようなダイナミカルなゲージ場を実験的に実現するための Floquet 理論を用いたプロトコルも提案している。特に、このプロトコルは Floquet 理論を用いてよく知られた一粒子の非エルミート模型である Hatano-Nelson 模型の実現方法を含んでおり、本論文の方法を用いれば Hatano-Nelson 模型を実現することもできる。(ダイナミカルなゲージ場を実現するためには Hatano-Nelson 模型にさらに時間変調を加える。)この論文以前に、一粒子レベルでトポロジカルに非自明なときに相互作用が加わるとどうなるのかを示す研究はあったが、私の知る限り一粒子では自明だが二粒子以上で初めてトポロジカルになる非エルミート系は知られていなかった。本論文が非エルミート性と量子多体性の関連を研究する端緒となれば幸いである。

研究テーマ③「人工量子系のトポロジカル現象のデバイスへの応用」

シリコンフォトニクスにおける人工次元の実現

横浜国立大学の馬場研究室、東京大学の岩本研究室、そして慶應義塾大学の太田研究室との共同研究で、世界で初めてシリコンフォトニクスのプラットフォームで周波数人工次元を実験的に実現したのが下記主な研究成果リストで挙げた論文 3 (Balčytis et al. Science Advances (2022)) である。実験家との共同研究だが、理論的な部分は私が担当している。この実験のもととなったアイデアである周波数人工次元が私自身が 2016 年に理論的に提唱したものである。マイクロ波での周波数人工次元の実験は数年前から出てきていたが、シリコンフォトニクスで用いる光通信波長帯での実験の成功はこれが初めてである。

トポロジカル・レーザーの理論

論文 Secli et al. APL Photonics (2021) においては、世界で初めての 2 次元トポロジカルレーザーの実験 (Bahari et al. Science (2017)) でなぜトポロジカル端状態からレーザー発振したのかという長年の謎について、ゲインが周波数依存性を持っていることを仮定して説明することに成功した。

その他

人工量子系のトポロジカル物性に関連して 2 つレビュー論文を書いているのでここで簡単に紹介する。Ota et al. Nanophotonics (2020) はゲインがあるときのトポロジカル・フォトニクスのレビューである。また、Price et al. J. Phys. Photonics (2022) はトポロジカル・フォトニクスのロードマップと銘打ってトポロジカル・フォトニクスのこれからの進展の方向性を議論するレビューになっているが、私はトポロジカル・レーザーの章を担当した。

3. 今後の展開

本さきがけ研究では主に古典的な系あるいは一粒子物理におけるトポロジカル物性を詳しく調べた。次に私が興味を持っているのがより量子性が重要な系におけるトポロジカル物性である。すでに本研究最終年度にいくつか量子性が効いてくる系についての研究を始めている。原子・分子・光物理はさまざまな量子コンピュータのプラットフォームと密接に関わっている。本さきがけ研究

を通じて明らかにしてきた原子・分子・光物理におけるトポロジカル物性を量子コンピュータと組み合わせる新しい物理を切り拓いていけないかと考えている。例えば、Rydberg 原子列を使って人工次元やトポロジカルな模型などを実現してその性質を調べることに興味がある。

また、本さがけ研究は固体電子系で発展してきたトポロジカル物性の考えを原子・分子・光に持ち込むというのが大きなモチベーションであったが、逆に原子・分子・光でわかってきたトポロジカルな物性を固体電子系に逆輸入する研究にも興味がある。例えば、私の量子計量とベリー曲率の関係に関する研究は当初原子系や光を念頭に置いてきたが、ひねり2層グラフェンなどとも関係することがわかってきており、ここからファンデルワールス物質の研究に入り込めたら面白いのではないかなと思っている。

将来的な社会実装という点ではトポロジカル・フォトンクスは大きな可能性を秘めている。しかし、本さがけでは光アイソレータの開発まで持っていくことはできなかった。人工次元を用いて光アイソレータのプロトタイプを実現するためには複数の共振器の結合と特性の安定化などクリアすべき課題はあるが、実験室レベルでの成功であればあと数年で見られるのではないかと感じている。トポロジカル・レーザーは世界中でかなり多くの研究者が精力的に研究しているが、従来のレーザーと比べて何が優れているのか、どういった場面で使うのが適しているのかなど理論的・実験的に考えるべきことは多い。個人的には光集積回路の中の一要素として組み込むような使い方が最初の応用となるのではないかと感じているが、そこまでにはまだ 4~5 年はかかるのではないかと感じている。

4. 自己評価

研究目的の達成状況

研究テーマ①に関しては概ね当初の目的を達成したと思っている。しかし、当初計画にあった人工次元を用いた高次元(たとえば4次元)の模型の研究は当初考えていたほど進まなかった。

研究テーマ②についても、非エルミートベリー位相の定式化など当初目的を達成することができている。当初計画になかったアクティブマターへと研究を拡張できたのも研究に広がりが出て良かったと思っている。非エルミート量子多体系の研究も予想外の結果であり、満足している。ただ、アクティブマターについてはもう少し研究を進められたら良かったと思う。

3つの研究テーマの中で研究テーマ③が最も当初目標の達成から遠かった。特に、光アイソレータの実現はまだしばらくの時間がかかりそうであり、トポロジカル・レーザーの応用もまだ目処がつかない。しかし、人工次元を含む構造を用いた光アイソレータ実現の第一歩としてシリコンフォトンクスの人工次元の実験がうまくいったので一応及第点かなと思っている。

研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

私は理論家であり、主な研究費の使途は出張旅費であった。そして、そもそも満額申請しておらず、3年半で総額 1000 万円を要求していた。しかし、新型コロナウイルスのパンデミックが始まってしまったため出張が大幅に減り、当初予定していたような予算の使い方はできなくなった。かわりに計算性能の良いコンピュータを購入して数値計算に使うことができたので研究は比較的スムーズに進んだ。幸い最終年度には出張に行けるようになってきた。

研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果

研究の直接的応用を通じた社会への波及効果という点では研究テーマ③「人工量子系のトポロジカル現象のデバイスへの応用」があるが、これは上記の通り当初予定したほどには進まなかった。いずれはトポロジカルフォトリクスを用いたデバイスが光集積回路などに組み込まれて社会で役立つ日が来ることを望んでいるし、これからもその方向の研究は継続していくつもりである。

より一般的には、原子・分子・光物理の量子シミュレーションは量子技術・量子コンピュータへと直接的につながっていくものであり、個人的には原子・分子・光におけるトポロジカル物性の研究成果をこれからの量子技術の発展へとつなげていきたいと強く感じている。

研究成果の社会への波及効果という点では、ありがたいことに研究をいくつかの雑誌に取り上げてもらうことができた。特にヘブライ語の一般向け雑誌「Epoch」2020年12月号には写真付きで人工次元の研究を紹介してもらうことができた。高次元をシミュレートするという人工次元の方法は科学記者や一般読者の好奇心を煽る要素があるようである。こういった形で社会とつながることも基礎研究の社会への還元の方法として意味のあることではないかと思っている。

当初計画では想定されていなかった展開やそれによる成果、及び研究者としての飛躍につながるような成果

まず、古典振動子系を用いた非エルミートハミルトニアンの研究は当初計画になかった。そもそも古典振動子系は原子・分子・光ではないようにも思える。しかし、調べてみるうちに古典振動子系の運動方程式をシュレディンガー方程式にマップする際に量子光学でしばしば使われる回転波近似がうまく使えるなど、類似点が多く、本さきがけ研究の一環として研究することにした。その結果、非エルミート系の断熱ベリー位相の定式化に成功するなど面白い結果が得られたのは幸いだった。同様に、アクティブマターの研究も当初計画になかったが、非エルミート性を含むトポロジカルな分散関係が見つかったのは想定外の展開だった。原子・分子・光を超えて古典振動子系やアクティブマターに研究の幅を広げることができたのは自分にとって大きなプラスになったと感じている。

そのほかに、量子計量とベリー曲率の間の等号・不等号に関する研究は当初はあまり深く考えずに等号・不等号に関する研究として論文を発表したが、その後いろいろな方の研究のおかげでこの等号成立条件がひねり2層グラフェンと関係していることや、分数量子ホール状態の実現の可能性なども見つかってきて、予想外の広がりを見せている。当初原子・分子・光を念頭に始めた研究が固体電子系へもインパクトを与えることができていたのは私としては大変嬉しい。私自身も少しひねり2層グラフェン関係の研究をしてみたいとも感じている。

また、非エルミート系で量子多体性によってトポロジーが誘起されるモデルの提案を行ったが、当初計画には非エルミート性と量子多体性を組み合わせる研究は念頭になかった。上でも書いたが、本さきがけ研究では主に古典的あるいは一粒子のトポロジカルバンド構造を調べてきたが、これからは量子多体性の研究も絡めていきたいと感じている。

5. 主な研究成果リスト

(1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数: 23件

1. Ozawa and Mera, Relations between topology and the quantum metric for Chern insulators, *Physical Review B* **104**, 045103 (2021)

この論文では、最近人工量子系で直接測定に成功した量子計量(quantum metric)と呼ばれる、量子状態由来のパラメータ空間の幾何学的構造がトポロジーとどのように関連しているのかを議論している。量子計量による体積要素とベリー曲率の間には一般に不等号が成り立つが、その等号成立条件を明らかにし、直感的には模型がランダウ準位(一様磁場中の荷電粒子)の状況に近づくと不等号が等号に漸近することを示した。

2. Singhal, Martello, Agrawal, Ozawa, Price, Gadway, Measuring the Adiabatic Non-Hermitian Berry Phase in Feedback-Coupled Oscillators, arXiv:2205.02700

この論文では非エルミート系における断熱ベリー位相の定式化に成功した。ベリー位相は非エルミート系では虚部を持ち得る。この虚部はパラメータの変化が必ずしも閉曲線を描かなくてもゲージ不変になり、それは波動関数のノルムの変化として観測可能であることを示した。また、この論文では振動子の結合系を用いて非エルミート系を実験的に実現し、非エルミートベリー位相の測定にも成功している。私は理論的定式化を主導した。

3. Balčytis, Ozawa, Ota, Iwamoto, Maeda, Baba, Synthetic dimension band structures on a Si CMOS photonic platform, Science Advances 8, eabk0468 (2022)

この論文は実験家との共同研究だが、理論部分は私が担当・主導している。シリコンフォトリソグラフィのリング共振器において周波数方向を次元とみなして一つの共振器から次元の格子模型をシミュレートすることに世界で初めて成功した。有効的に磁場や電場の効果をシミュレートすることも可能であり、実験的にこれらの効果のもとでのバンド構造を測定することもできた。私の役割は系の理論的なモデル化と実験結果の説明である。

(2)特許出願

該当なし

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

主要な学会発表

2022年4月に韓国物理学会で招待講演

タイトル「Relations between quantum metric and topology in geometrically flat Chern insulators」

2022年5月にCLEO 2022(アメリカ San Jose とオンラインのハイブリッド開催)で招待講演

タイトル「Recent progress in synthetic dimensions and topological structures in silicon photonics」

2022年8月にThe 15th Asia Pacific Physics Conference (APPC15)で招待講演

タイトル「Synthetic dimensions and topological band structures in atomic and optical matter」

受賞

2021年に文部科学大臣表彰若手科学者賞を受賞

受賞研究テーマは「光と原子物理におけるトポロジカル物性の理論研究」

雑誌における特集

矢野経済研究所発行「Yano E plus」2022年4月号の特集「トポロジカル絶縁体の動向」において3ページにわたり研究活動が取り上げられる。

プレスリリース

代表的な論文で3番目にあげたシリコンフォトニクスの人工次元の実現の論文出版に際し、横浜国立大学、東北大学、東京大学、慶應義塾大学で共同でプレスリリースを行なった。プレスリリースタイトルは「人工次元フォトニクスの実証～新しい光物理のオンチップ搭載～」