## 2022年度 関西学院大学 海外客員教員(招聘C)招聘成果報告書

(\*本報告書は本学ウェブサイト等で公開されます)

		(適宜行追加可)
受入担当	所属・職	工学部・教授
教員	氏名	若林 克法
海外客員	所属・職	インド科学教育大学ティルパティ物理学科・助教授
教員	氏名	DUTTA, Sudipta
招聘目的		1. 授業担当及び研究 ②. 共同研究 (いずれかにO)
招聘期間		2022年 12月 2日 ~ 2023年 1月 1日
<b>招聘成果報告</b> 以下の内容を記載して		(1)トポロジカル絶縁体は、バルクはエネルギーバンドギャップを有する絶縁体でありながら、金属的な表面・エッジ状態を持つ物質である。この性質は半導体
下さい。		界面で実現される二次元電子系に強磁場を印加することで現れる整数量子ホール系に似ており、この 20 年間に多くの注目を集めてきました。しかし、トポロジカル絶縁体は、整数量子ホール系とは異なり、磁場を必要としない。特に、Z2
1. 授業担当及び研究		トポロジカル絶縁体と呼ばれるこのような物質の最初の微視的な理論模型は、グ
(1)授業科目名		ラフェン格子にスピン軌道相互作用を介した近傍ホッピングを導入することで
(2)授業担当の成果		提案された(現在 Kane-Mele モデルと呼ばれる)。このような低次元量子閉じ込め系では、電子・電子相互作用が含まれると、スピン軌道相互作用と競合し、興味

深い量子相が生じることが知られている。 そこで、本研究では、スピン軌道相互作用とハバード相関項の強さを変えるこ とで、準1次元系における Kane-Mele-Hubbard 模型の磁気的性質と伝導的性質 を数値理論的に調べた。

(2) 本研究では、多体配置相互作用法(CI)とコリニア平均場計算を用いて、Kane-|Mele-Hubbard 模型の磁気的性質と伝導的性質を理論的に解析した。 従来用いら れてきた他の数値計算法では、系の特性を特殊な波数点や特定のパラメータ値で しか調べることができなかった。しかし、CI 法を用いることで、ブリルアンゾ ーン全体にわたる電荷ギャップとスピンギャップの変化を得ることができた。 電 荷ギャップ、スピンギャップ、スピン密度分布、スピン相関関数を解析すること で、ジグザググラフェンナノリボンにおける様々な量子相を得ることができた。 スピンセクターはスピン軌道相互作用とハバード項のすべての値においてトポ ロジカルな性質を保っているが、電荷セクターはブリルアンゾーン境界からディ ラックポイントへの多体電荷ギャップの極小値のシフトによって示されるトポ

ロジカル相転移を示す。さらに、スピン密度分布から、スピン軌道相互作用とハ バード相関が引き起こすリボン形状のヘリカルスピンオーダーが明らかになっ た。本研究は、この種の系における運動量分解されたスピンと電荷の励起の振る

舞いについて基礎的な理解を与えるものである。

さらに、上記の研究に加えて、反転対称性の破れた二次元系におけるバレー分 極とその理論的・計算的方法についても議論している。励起子散乱過程を考慮す るために、密度汎関数理論に GW 近似と Bethe-Salpeter 方程式近似を導入する 方法について議論した。また、空間反転対称性の破れた Borocarbonitride 系に ついて、そのバレー選択的振動子強度の観点からバレー分極を議論した。この研 究は、円二色性バレーホール素子を実現し、未来型エレクトロニクスに応用する 上で大きなインパクトを与えるものである。

- (3)研究の内容
- (4)研究の成果
- 2. 共同研究
  - (1) 共同研究の内容
  - (2) 共同研究の成果