

## 課題名(タイトル):

Numerical analysis of the nonlinear transport properties and band topology in chiral materials

## 利用者氏名:

仲澤一輝

## 理研における所属研究室名:

創発物性科学研究センター 量子システム理論研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係  
電流や熱流といった固体中の量子輸送現象は、これまで物質内部の非自明な構造(電子状態, 磁気構造, etc.)のプローブとして基礎研究から応用まで幅広く研究されてきた。また, 線形応答の範囲の輸送現象を微視的模型から正確に計算することが可能な枠組みとしては久保公式が広く適用されている。最近では, 反転対称性が破れた物質で期待される非線形輸送現象が脚光を浴びており, 我々を含め電場または温度勾配に誘起される非線形輸送現象の微視的な定式化が行われているところである。本課題では, 次の2点を具体的に明らかにする。

- 半導体ナノ構造の有効模型において期待される非線形伝導度における量子振動を調べ, その有用性を調べる
- CoSiなどのB20型結晶や単体Teなどのカイラルな物質において, 電場と温度勾配のクロス積の方向に期待されるHall応答(NCTEホール効果)を第一原理計算に基づいて定量評価し, 通常の電場の2次応答とどのように異なるか調べる。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

- スピン軌道相互作用のある2次元電子系(2DEG)が磁場下でLandau準位を形成している模型を考える。800以上のLandau準位を考え, 微視的定式化の基づく非線形伝導度の式を用いてこれを評価する。
- まずDFT計算によって電子構造を調べ, DFTバンドをよく再現する多軌道Wannier模型を構成する。Wannier模型に基づいて, 非線形熱電伝導率や非線形伝導度といった輸送係数を計算し, その振る舞いを議論する。

## 3. 結果

- まず, 線形伝導度に比べて, 非線形伝導度の方が弱磁場領域まで振動が生き残る傾向にあることを見出した。また, スピン軌道相互作用の種類によって, 量子振動の位相が異なることも見出した。

さらに, 非線形Hall伝導度が, 縦方向の非線形Hall伝導度と同程度の量子振動を発現することを見出した。(線形のHall効果ではこれは非常に弱い効果であることが知られている。)これらの特徴は, 非線形伝導度における量子振動が線形伝導度にはない特徴を持つことを見出した。

- 前年度から引き続き, カイラルTeとB20型化合物CoSiのそれぞれについて, 第一原理計算に基づくWannier模型を用いてNCTEホール効果の計算を行った。両方の物質において, 軌道磁気モーメントが非常に重要な役割を示すことが明らかとなった。さらに, CoSiにおいては, カイラルTeでは有限に残ったBerry曲率双極子の寄与が完全に打ち消しあい, 軌道磁気モーメントのみが寄与するという結果を得た。

## 4. まとめ

いずれの現象も, 線形応答では予期しなかった特徴を有し, 物質評価のみならず基礎学理の観点からも大変価値のある結果である。アウトプットとしては, Aのテーマは現在論文の準備中である。Bのテーマは前年度の結果も併せて取りまとめ, それぞれ後述の2編の論文が出版された。さらに, 前年度にHBW2を利用して取り組んだ非線形輸送現象に関する別の論文も, アクセプトされている。

## 5. 今後の計画・展望

- 非線形領域における量子振動は, 広範囲の物質に適用できるため, 様々な物質における系統的評価を行う予定である。また, 本定式化は今のところ連続体近似の下で適用可能になっているが, 格子系にも適用できる枠組みの構築も検討しており, ここではより大規模な計算が要求される。
- 非線形な熱電現象は, 輸送現象のみならず, エーデルシュタイン効果のような電磁交差応答にも顔を出すことが期待される。そのような新しい非線形現象の開拓にも進む予定である。

2024 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

1. **K. Nakazawa**, H. F. Legg, J. Klinovaja, and D. Loss, “Interband contributions to nonlinear transport in semiconductor nanostructures,” *Phys. Rev. B* – **Accepted** (2025)
2. **K. Nakazawa**, T. Yamaguchi, and A. Yamakage, “Nonlinear charge and thermal transport properties induced by orbital magnetic moment in chiral crystalline cobalt monosilicide,” *Phys. Rev. B* **111**, 045161 (2025).
3. **K. Nakazawa**, T. Yamaguchi, and A. Yamakage, “Nonlinear charge transport properties in chiral tellurium,” *Phys. Rev. Materials* **8**, L091601 (2024).

【口頭発表】

1. 仲澤一輝, H. F. Legg, J. Klinovaja, D. Loss, 「半導体ナノ構造における非線形輸送現象に対するバンド間効果」, 日本物理学会第 79 回年次大会, 北海道大学, 2024 年 9 月.
2. **K. Nakazawa**, H. F. Legg, J. Klinovaja, and D. Loss, “Interband effect of second-order charge response to electric field in semiconductor nanostructures,” *Quantum Designer Physics 2024 (QDP2024)*, San Sebastian, Spain, July 2024.
3. (Invited) **Kazuki Nakazawa**, “Nonlinear transport properties in semiconductor nanostructures and chiral tellurium,” *New Perspectives in Spintronics and Quantum transport 2024*, Kanazawa, Japan, June 2024.

【ポスター発表】

1. **K. Nakazawa**, H. F. Legg, J. Klinovaja, and D. Loss, “Interband effect of second-order charge response to electric field in semiconductor nanostructures,” *Quantum Designer Physics 2024*, San Sebastian, Spain, July 2024.
2. **K. Nakazawa**, H. F. Legg, J. Klinovaja, and D. Loss, “Interband effect of second-order charge response to electric field in semiconductor nanostructures,” *Swiss-Japanese Quantum Symposium 2024*, Tokyo, Japan, June 2024.