



関西学院大学
KWANSEI GAKUIN UNIVERSITY

「ベリー曲率ゼロのトポロジカル物質相の理論」 -トポロジカル状態を有する新しい物質群の設計・探索への応用に期待-

報道各位

関西学院広報室

関西学院大学工学部の若林克法教授とFeng Liu（フェン・リュウ）博士研究員は、トポロジカル状態を有する物質（以下、トポロジカル物質）を設計する新しい理論を提案いたしました。トポロジカル物質では、物質の表面やエッジなどの境界面において、無散逸な電流やスピン流が現れ、超低消費電力の電子素子や量子計算素子への応用が期待されています。そのため、近年トポロジカル物質の探索が理論および実験の両面から活発に研究が行われています。従来の研究では、ベリー曲率とよばれるトポロジカル量が有限になる物質で、トポロジカル状態が発現することが知られていました。しかし、本研究では、たとえベリー曲率がゼロであっても、ザック位相と呼ばれる別のトポロジカル量が有限であれば、トポロジカル特性が発現することを解明しました。この理論により、トポロジカル特性をもつ新たな物質群の設計や探索、合成が今後期待されます。この研究成果は2月16日（米国東部時間）に物理学で最も権威のある学術誌「Physical Review Letters」に掲載されました。本研究は一部、文部科学省科学研究費補助金の新学術領域研究「原子層科学」から援助を受けています。

ポイント

- ・ ベリー曲率がゼロでもあるにも関わらず、トポロジカル状態を有する物質群を、ザック位相と呼ばれる別のトポロジカル量を評価することで、発見しました。
- ・ 今回理論提案したトポロジカル状態を有する物質群では、散乱を受けにくい電流が表面やエッジで流れるため、超低消費電力の電子素子や量子計算素子への応用が期待されます。

1. 研究の背景

表面や界面で散乱されない電流やスピン流を持つトポロジカル絶縁体の探索が、理論および実験の両面から、近年世界各国で盛んに研究されており、物性物理および物質科学の最先端領域を形作っています。トポロジカル状態を有する物質（トポロジカル物質）は、物質の表面やエッジなどの境界面において、無散逸な電流やスピン流が現れることが知られています。この特性を利用することで、超低消費電力の電子素子や量子計算素子への応用が期待されています。また、昨年のノーベル物理学賞が、「トポロジカル相転移とトポロジカル相の理論的発見」に贈られたことからわかるように、トポロジカル物質の設計、探索合成は重要な研究課題となっています。特に、従来の理

論では、ベリー曲率とよばれるトポロジカル量が有限になる物質で、トポロジカル状態が発現することが知られていました。本研究グループでは、トポロジカル状態を有する新たな物質群の理論設計と新しい理論手法に基づく設計指針の開発を行ってきました。

2. 研究内容と成果

本研究では、原子間距離の変化等で最近節格子間の電子ホッピングエネルギーが空間的に異なる正方格子を、理論模型の出発点として考えました。図1がトポロジカル状態を示す2次元正方格子の模式図です。最近接格子点は実線で結ばれており、破線の正方形は単位胞を意味し、2次元の最小構成単位になっています。また、単位胞内部での電子ホッピングエネルギー(w)を太線、単位胞間同士(v)での電子ホッピングエネルギーを細線として表しています。本研究では、ザック位相とよばれるトポロジカル量を解析することで、 w と v の大小関係によって、トポロジカル状態の有無が変化することを見出しました。

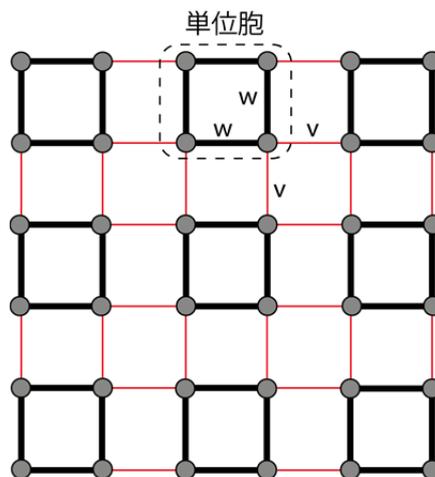


図1：トポロジカル状態を示す2次元正方格子の模式図。最近接格子点は実線で結ばれており、破線の正方形は単位胞を表しています。また、単位胞内部での電子ホッピングエネルギー(w)を太線、単位胞間同士(v)での電子ホッピングエネルギーを細線として表しています。単位胞間のホッピングエネルギー w の大きさが、 v の大きさより小さい場合に、トポロジカル状態が実現する。

単位胞間のホッピングエネルギー(w)を徐々に小さくしていくことで、電子状態が変化し、 $|w| < |v|$ となると、トポロジカル状態が出現します。図2(a)は、 $|w| > |v|$ ($w=2.0, v=1.0$) の場合についてのエネルギー分散を示しており、トポロジカル状態は存在しません。しかし、図2(b)に示すように、 $|w| < |v|$ ($w=1.0, v=2.0$) の場合のエネルギー分散を見ると、青線で示すような、新しい

エネルギー分散が現れます。この青線のエネルギー分散を担う状態を見ると、電子の波動関数は、エッジ付近にのみ振幅をもっており、電流はエッジのみを伝って流れます。このようなエッジが担う電流は、不純物や欠陥による電子散乱を受けにくいいため、極めて高い電子伝導性の起源となり、超低消費電力電子素子や量子機能素子などへの応用が期待されます。

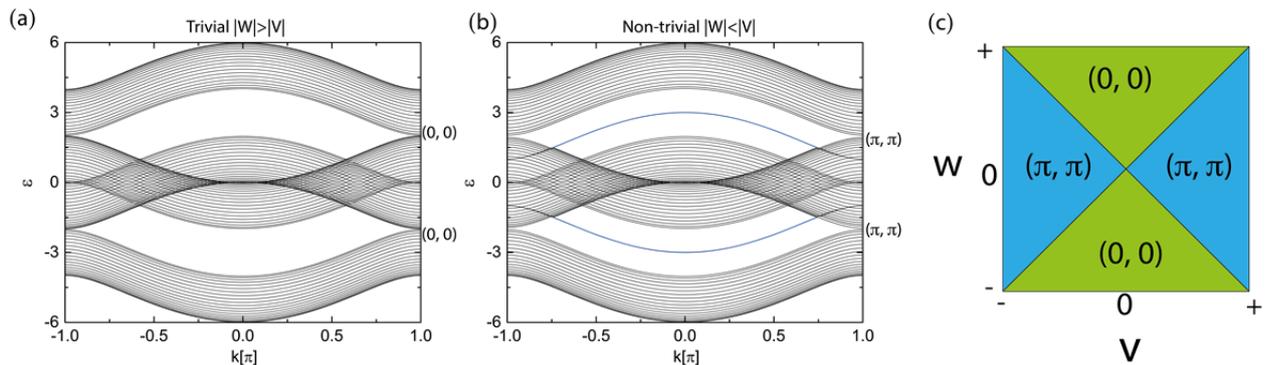


図 2: 本研究での正方格子模型のエネルギー分散関係。(a)は、 $|w| > |v|$ の場合で、トポロジカル状態は現れない。しかし、(b)に示す $|w| < |v|$ の場合には、青色のエネルギー分散が現れる。この青色のエネルギー分散が担う状態はトポロジカル状態であり、そこでは電子はエッジに局在している。(c) ザック位相を見ると、 $|w| < |v|$ に対応する青色の領域のみ、有限の値 (π, π) となり、 $w=v$ を境界にしてザック位相が変化することがわかる。

ホッピングエネルギーの大小関係によって、トポロジカルな性質が変化することをみるために、本研究では、ザック位相を評価しました。図 3 は、 v と w を、それぞれ $-\infty$ から ∞ 変化させたときのザック位相の変化を示している。 $|w| < |v|$ に対応する青色の領域では、ザック位相が、 (π, π) の値となり有限となる。しかし、 $|w| < |v|$ に対応する緑色の領域では、ザック位相がゼロとなり、二つの領域ではトポロジカルな性質が全く異なることを示しています。

3. 今後の展開

本研究で明らかになった原理は、広く 2 次元材料に適用できます。さらに、単純な絶縁体や半導体の円柱をザック位相が有限となるように設計・配置すれば、フォトニック結晶においても、トポロジカル特性を付与することが可能になります。そのため、今後この理論指針にしたがった物質設計および物質探索が期待されます。本研究成果によって、たとえベリー曲率がゼロであっても、ザック位相が有限になるように物質を設計すれば、トポロジカル特性を発現させることが可能である

ことから、新しい物質設計の指針として、より応用に役立つ量子機能の研究開発が期待されます。

【論文タイトル】

原題: Novel Topological Phase with a Zero Berry Curvature

【タイトル和訳】

ベリー曲率ゼロの革新的トポロジカル相

【著者名】

Feng Liu, Katsunori Wakabayashi

【用語解説】

注1) トポロジカル状態

物質がどのような電子物性を示すのかは、物質中の電子の波動関数の振る舞いによって決まります。近年の理論研究から、波動関数の幾何学的（トポロジカル）位相によって、電子物性が分類できることが分かってきています。トポロジカル状態とは、電子の波動関数が特異なトポロジカル位相をもつことで、結晶内部では普通の絶縁体と変わらないが、エッジや表面では散乱されない電流やスピン流が流れている状態。

注2) ベリー曲率とザック位相

結晶運動量空間において、位相幾何学的に導かれる磁場が、ベリー曲率。結晶運動量空間において、位相幾何学的に導かれるベクトルポテンシャルが、ザック位相。

注2) 格子間のホッピングエネルギー

結晶中では電子は原子核にクーロン引力によって束縛されているが、隣接する原子にある一定の確率で遷移（ホッピング）することが可能である。この現象を理論的に記述するモデルは、強束縛モデルとよばれている。電子のホッピングに伴って、運動エネルギーの分だけ、電子系にはエネルギーの利得が生じます。ホッピングエネルギーは、隣接する原子への電子の遷移のしやすさをエネルギーの単位で表した量。

なお、このご案内は、「各新聞社・TV局・通信社」「阪神支局・三田支局・大阪社会部」「大学・科学記者クラブ」「文部科学省記者会」「雑誌社」にお送りしております。

問い合わせ先

■TEL0798-54-6017（広報室）

■理工学部先進ナノエネルギー工学科 教授 若林克法 Email:waka@kwansei.ac.jp