

半金属や絶縁体のトポロジカルな性質を表す指標の発見
－ トポロジカル物性を示す新物質探索における指針として期待 －

1. 発表者： 渡邊 悠樹 （東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 講師）

2. 発表のポイント：

- ◆近年注目を集めている「トポロジカル絶縁体」や「トポロジカル半金属」を包括的に取り扱うことができる新理論を提案した。
- ◆世界で初めて、全 230 種類ある結晶の持つ対称性（注1）のすべてにこれまでの理論を拡張した。
- ◆今後トポロジカル物性を示す新物質を探索していく上での指導原理となり、これを応用した新デバイスの開発、スピントロニクスや量子コンピューターの発展に役立つと期待される。

3. 発表概要：

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻の渡邊講師は、米国ハーバード大学の Vishwanath 教授らとの国際共同研究で、近年注目を集めている「トポロジカル絶縁体」や「トポロジカル半金属」と呼ばれる一連の物質群を包括的に取り扱うことができる新理論を提案した。物質のトポロジーに関しては近年盛んに研究されてきたが、2016年にノーベル物理学賞がトポロジカル相の研究に授与されて以降、一層活発化している。

トポロジカル絶縁体・半金属の研究においては、物質の持つ「対称性」が重要な役割を果たす。結晶の持つ対称性は全部で 230 種類あることが知られているが、これまでは、ごく一部の限られた対称性の場合にしか研究がなされてこなかった。今回の新理論では、230 種類のすべての対称性を統一的に扱うことができる。

今後トポロジカル物性を示す新物質を探索していく上での指導原理となり、トポロジカル物質をメモリや集積回路などに応用した新デバイスの開発や、トポロジカル量子コンピューターの発展などに役立つことが期待される。

4. 発表内容：

トポロジカル物質とは、物質中の電子状態が、何らかの要因で「捻られる」ことにより、従来の「金属、半導体、絶縁体」といった枠組みでは理解しきれない新しい性質を示す物質群である。例えばトポロジカル相の代表例である「トポロジカル絶縁体」は、物質内部は絶縁体であるにもかかわらず物質表面は金属になるという興味深い性質を示す。この表面金属状態は、例えばスピントロニクスの分野に応用されており、低消費電力もしくは高速な次世代のデバイス開発につながることを期待されている。また、トポロジカル物質を用いた「トポロジカル量子コンピューター」の実現可能性も提案されている。物質のトポロジカル相の研究は、2000年以降世界中で盛んに行われてきたが、2016年のノーベル物理学賞がトポロジカル相の研究に授与されたことで、この分野の研究は一層活発化している。

トポロジカル絶縁体・半金属の性質の理解には、物質の持つ「対称性」が重要な役割を果たす。結晶の対称性には、例えば回転対称性や反転対称性などと、それらの組み合わせにより、全部で 230 種類が存在することが知られている。これまでの研究によって、この 230 個のうち特定のいくつかの対称性に対しては、「物質が一体どういう条件を満たせばトポロジカル絶縁

体・トポロジカル半金属となるのか」という指標が明らかにされていた。実際その指針に従って $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 (Bi : ビスマス、Sb : アンチモン、Se : セレン、Te : テルル) といったトポロジカル絶縁体が見出され、実現されてきた。しかし、それ以外の多くの対称性にはそのような指標は知られていなかった。

これを踏まえ、本研究では「ある対称性をもつ物質がどういう条件を満たせばトポロジカル物質となるか」という指標を、230 個すべての対称性に対して計算するという難問に挑み、世界で初めて成功した。この計算は、「結晶対称性の表現論」と「群論」(注2)という数学の手法を組み合わせ、「バンド構造」(注3) (図1) を分類することで初めて可能になった (図2はこの分類の概念図)。

本研究の成果は、我々の身の回りの物質の一般的理解を深める基礎科学としての意義がある。さらに応用面では、今後実用に適した新たなトポロジカル物質を探索していく上での指導原理として、この分野の研究を理論・実験の両面から加速させ、先述したような新デバイスの開発やトポロジカル量子コンピューターの発展などに役立つことが期待される。

5. 発表雑誌 :

雑誌名 : 「Nature Communications」 (オンライン版 日本時間 6 月 30 日午後 6 時掲載)

論文タイトル : Symmetry-based Indicators of Band Topology in the 230 Space Groups

著者 : Hoi Chun Po, Ashvin Vishwanath*, Haruki Watanabe

DOI 番号 : s41467-017-00133-2

アブストラクト URL : <http://www.nature.com/ncomms>

6. 問い合わせ先 :

東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻

講師 渡辺 悠樹 (わたなべ はるき)

7. 用語解説 :

(注1) 結晶の対称性 : 左右を入れ替える・反転させるなどの操作のうち、物質の位置や方向、形状を変えないもの。3次元空間には全部で230種類ある。

(注2) 表現論、群論 : どちらも物理のさまざまな分野で頻繁に用いられている数学の手法。

(注3) バンド構造 : 結晶中の電子が持つエネルギーを、運動量の関数として図示したもの。物質の伝導性などの性質を調べる際に重要となる。

8. 添付資料 :

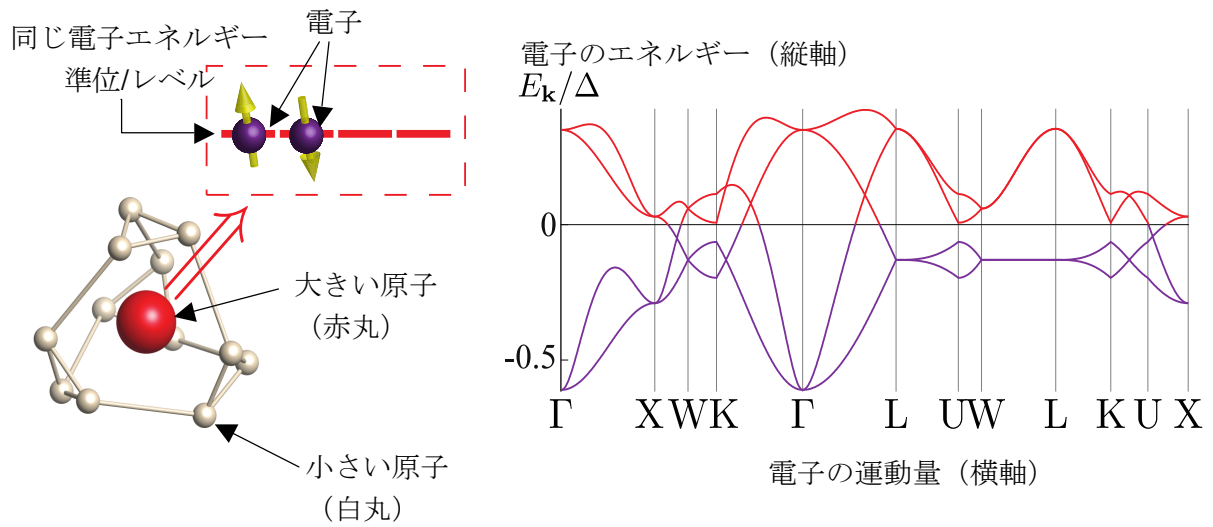


図 1: バンド構造

(左) 原子近傍の電子のエネルギー準位 (じゅんい) / レベルの模式図。図のように 1 つの大きい赤丸の原子を複数の白丸の原子が取り囲むと、対称性により、赤丸原子近傍の電子のエネルギー準位のうち 4 つが同じエネルギーになる (図の 4 本の赤線)。赤破線の枠内は、そのうち 2 つの準位が電子 (紫丸に黄色矢印) で占有されていることを示している。

(右) その原子が周期的に並んだ時のバンド構造の例。縦軸 E_k/Δ は電子のエネルギー、横軸は電子の運動量を表し、 Γ , X, W などには特に対称性が高い特別な運動量を表す。

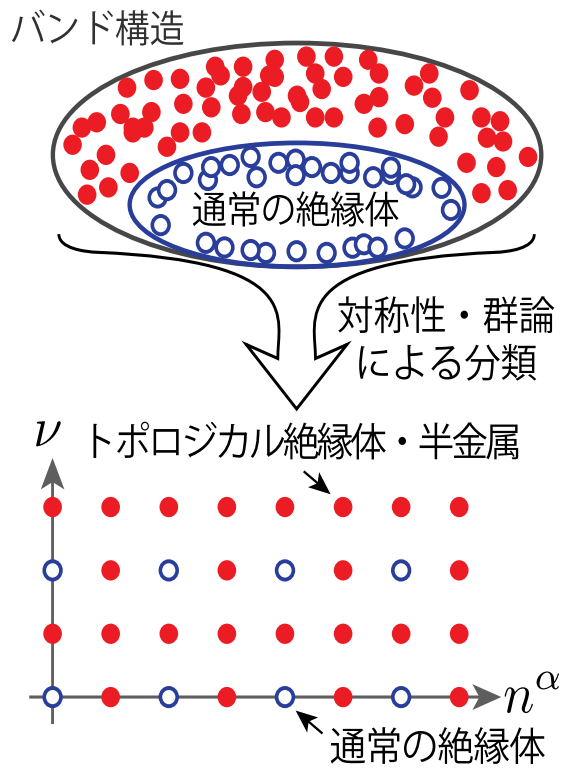


図 2: 対称性と群論によるバンド構造の分類の概念図

ν はバンドの分岐の数、 n^α はバンド構造に含まれる既約表現 α の個数。 ν と n^α に基づいてバンド構造を分類すると、これまでは混在していたトポロジカル・非トポロジカルなバンド構造が整列し、どのバンド構造がトポロジカルになるのか一目瞭然となる。