

令和元年6月18日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16H03847

研究課題名(和文)トポロジカル電子状態に基づく新世代デバイス技術の創出

研究課題名(英文)Explorariion of novel device technology based on topological electronic states

研究代表者

笹川 崇男 (Sasagawa, Takao)

東京工業大学・科学技術創成研究院・准教授

研究者番号：30332597

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,200,000円

研究成果の概要(和文)：スピントロニクスから量子コンピューティングまで次世代電子デバイスへの利用が期待される「トポロジカルな電子状態をもつ物質」について、新物質の開拓、そこから生まれる新奇な量子現象や機能の探索に取り組んだ。第一原理計算による物質の探索と選定、各種手法を用いた合成と単結晶化、極低温・強磁場などの極限環境も利用した物性評価と機能実証を総合的に行った。トポロジカル絶縁体、トポロジカル半金属、トポロジカル超伝導体のそれぞれにおいて、物質、現象、機能の観点で想定外の発見が相次ぎ、Natureおよび姉妹誌への5件を筆頭に、インパクトファクターの高い学術誌に総計45件の論文を掲載することができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

トポロジカル電子物質について新物質、新現象、新機能を開拓できた。これは、当該分野の基礎学理の確立といった学術的観点で重要である。加えて、トポロジカル電子物質は、無散逸電気伝導やスピントロニクス、量子コンピュータなどの広範なデバイス技術にも応用可能性のある革新的デバイス素材と位置付けられていることから、将来的には省エネ・高速・高機能等で大きな波及効果も期待される。

研究成果の概要(英文)：Because of their novel quantum states, topological electronic materials are promising components for next generation electronics such as spin devices and quantum computers. We developed both new compounds and novel electronic functionality within a new class of materials called "topological insulators, topological semimetals, and topological superconductors". With regard to materials, phenomena, and functions, several unexpected discoveries were made, which were publised as 45 articles in high-impact-factor journals, including 5 articles in Nature and sister journals.

研究分野：物質科学

キーワード：トポロジカル絶縁体 トポロジカル半金属 トポロジカル超伝導体 新物質探索 新物性探索 単結晶  
第一原理計算 量子計測

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19（共通）

### 1. 研究開始当初の背景

2010年にノーベル賞の対象となった2次元電子状態をもつグラフェンは、極めて高い電子移動度をもつことから、シリコンの限界を超える次世代デバイス材料としての期待が高い。その特性は質量ゼロの相対論的（ディラック）電子が担い、半整数量子ホール効果（強磁場中でホール伝導度が基本物理定数だけで決まる値に量子化され、更に従来の半整数値をとる）や、クライン・トンネリング（ポテンシャル障壁への垂直入射時の透過率が100%）など特異現象には枚挙にいとまがない。一方でグラフェンは、単層原子膜でないとな機能が発現しない、欠陥や不純物で機能劣化が大きい、そもそも作製が困難、物質としての多様性がない、などの実用化に向けた多くの課題を抱える。

本研究で対象としたトポロジカル電子物質は、これら欠点の全てを克服するとともに、グラフェンで実現できる機能をカバーし、更にスピントロニクスや量子計算にまで利用が期待される新しい電子デバイス素材である。例えば、トポロジカル絶縁体のディラック電子はスピンを揃えた輸送特性を担う。更に、磁場・強磁性による時間反転対称性の破れや超伝導による粒子数保存の破れなどが相乗すると、全く新しい電子の粒子性（アクシオン、ワイル、エニオン、マヨラナ）が出現すると理論予言されており、これらを利用する応用の可能性は無限大である。

### 2. 研究の目的

理論先導で進んで実験検証が追いついていないトポロジカル電子物質の研究において、予言されている種々の電子がもつ新奇粒子性を発現する新物質群を探索・開拓し、そこに期待される新量子現象や機能の開発に取り組んだ。

### 3. 研究の方法

第一原理計算を活用して大きな相対論・位相幾何学効果を備えたトポロジカルな電子状態をもつ新物質を探索・設計した。選定した候補物質は、様々な手法により純良大型単結晶試料として準備した。育成に成功した単結晶を用いて、電子物性と電子構造（実空間・運動量空間）の詳細を評価した。

### 4. 研究成果

#### ①トポロジカル絶縁体

##### (a) トポロジカル絶縁体表面スピンの磁場応答の解明（発表論文6：図1）

中身は絶縁体で、その表面にグラフェン類似なディラック電子をもつ2次元金属状態を出現させるのがトポロジカル絶縁体である。この表面電子はスピン偏極しているため、グラフェンを超える電子機能への応用にも期待がもたれている。外部磁場による状態制御を考えた場合、トポロジカル表面電子状態が示す磁気的な相互作用の理解が重要となるが、中身と分離した評価が極めて困難なことから、これまでに実験的な報告はなかった。今回、走査トンネル顕微鏡・分光法を活用し、磁場中のランダウ量子化現象を詳細に測定・解析することにより、トポロジカル表面電子状態のゼーマン効果と $g$ 因子（角運動量と磁気モーメントの比例係数）を定量化することに成功した（図1：[1, 8]）。同じ結晶構造で異なる組成のトポロジカル絶縁体（ $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ と $\text{Sb}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ ）で $g$ 因子を評価したところ、非常に大きな物質依存性があるという、理論予測されていなかった効果を発見した。これは、固溶体として組成を精密制御することにより、トポロジカル表面電子状態の磁気応答を物質設計できる可能性を示すものとしても興味深い結果である。

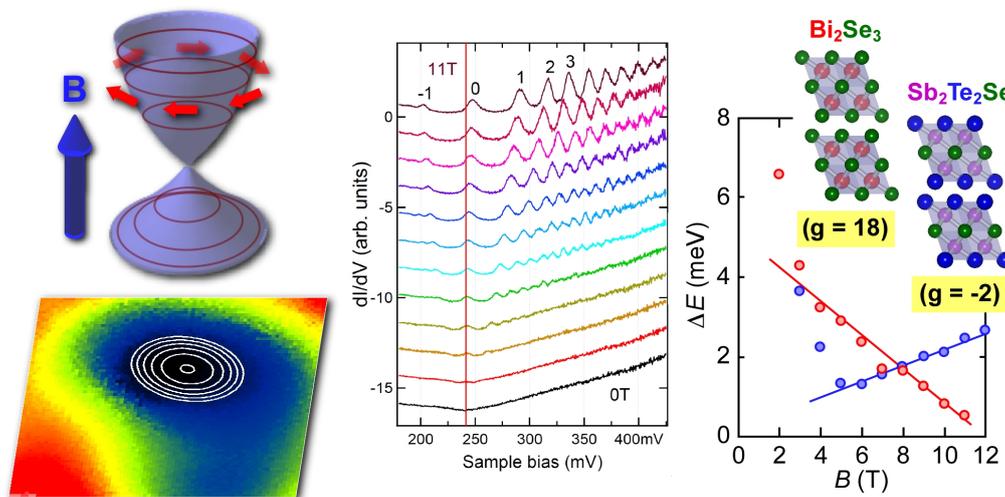


図1.  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ と $\text{Sb}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ のトポロジカル絶縁体単結晶表面における、ゼーマン効果と $g$ 因子を走査トンネル顕微鏡・分光法で評価した結果。

(b) 新しい分類に属する「弱い」トポロジカル絶縁体の発見 (発表論文1 : 図2)

擬一次元の結晶構造を持つビスマスヨウ化物  $\text{Bi}_4\text{I}_4$  は、室温付近で構造相転移し、それに伴って輸送特性が大きく変化することを見出した。化学気相輸送法によって育成に成功した単結晶を用いて、角度分解光電子分光法による電子構造の詳細な直接観察を行ったところ、低温  $\alpha$  相は通常の絶縁体なのに対して、高温  $\beta$  相は特定の結晶面だけにディラック錘型の表面電子状態が出現する「弱い」トポロジカル絶縁体であることを発見した。結晶の冷却速度を制御する事により、高温  $\beta$  相を凍結させて低温においても安定化させることが可能であることも実証することに成功した。通常絶縁体とトポロジカル絶縁体との間の電子相転移を、熱履歴によって ON/OFF 制御できることを実証した本成果は、表面電子状態がもつ無散逸なスピンドラフト特性を利用するスピントロニクス分野への新たな応用技術として、今後の展開が期待される。

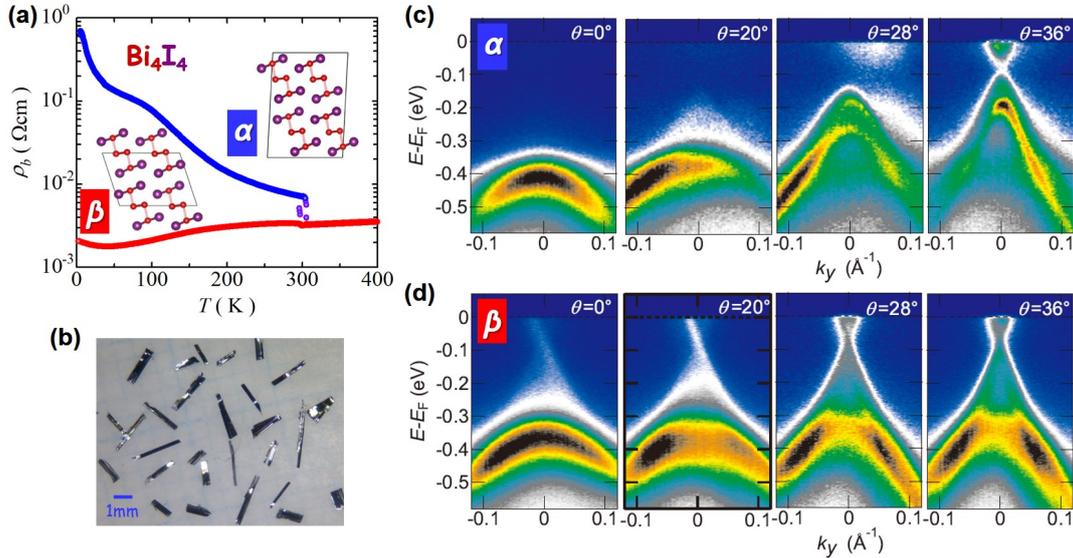


図2. (a) 低温 $\alpha$ 相と高温 $\beta$ 相の結晶構造をもつ  $\text{Bi}_4\text{I}_4$  の結晶構造と抵抗率の温度依存性。(b) 育成に成功した単結晶。(c)-(d) 角度分解光電子分光法で観察した $\alpha$ 相と $\beta$ 相の電子構造。

②トポロジカル半金属：普遍的一般則の提唱 (発表論文3 : 図3)

物性の宝庫として近年注目を集めている遷移金属ダイカルコゲナイド (TMD) において、物質表面にスピン偏極したトポロジカルな電子状態や、物質内部全体にグラフェンと同様な質量ゼロのディラック電子状態が発現する際の、一般的な原理を発見した。経験や実験データを必要としない第一原理計算で求めたTMDの電子状態をもとに一般原理を理論的に構築し、スピン状態までの詳細な電子構造を直接観察できる角度分解光電子分光法によって実験的な検証を行った。これにより、提唱した一般原理による理論予測が正しいことを示す結果として、6つの異なる組成をもつTMDについて、トポロジカル表面電子状態や3次元ディラック電子状態が存在していることの実験実証に成功した。本研究成果は、ノーベル物理学賞で活気づいているトポロジカル電子物質の研究分野に普遍的な基礎学理を与えるとともに、トポロジカル電子状態の制御や物質設計への重要で新たな指針を与える。

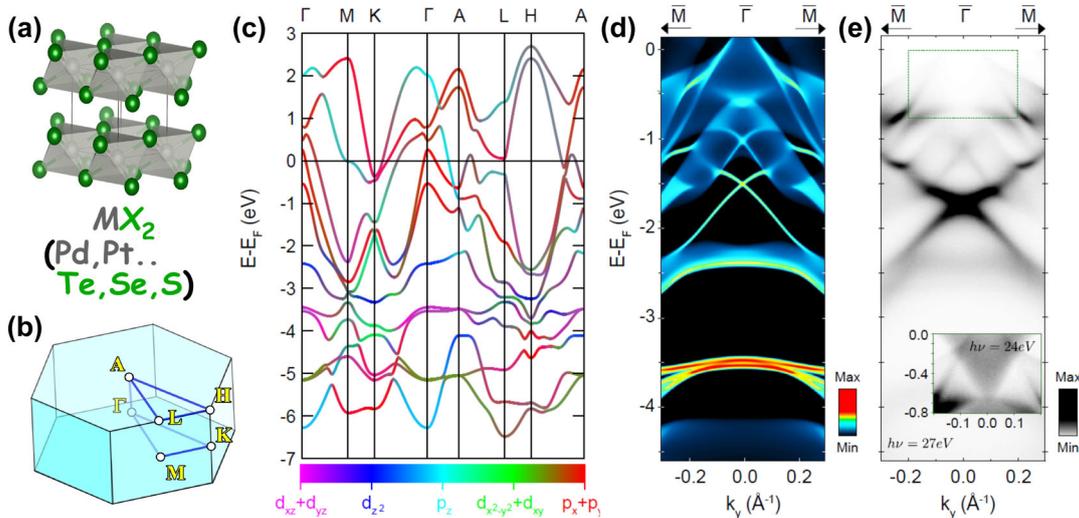


図3. (a) 遷移金属ダイカルコゲナイドの結晶構造。(b) ブリルアンゾーン。(c) 第一原理計算で求めたバルク電子構造。(d) 第一原理計算で求めた表面電子構造。(e) 角度分解光電子分光法で観察した表面電子構造。

③トポロジカル超伝導体：候補物質の電子状態解明（発表論文5：図4）

トポロジカル超伝導体では、エッジや量子化磁束芯にゼロギャップの超伝導状態が生じて、そこに未発見のマヨラナ粒子（自身と反粒子とが区別できない準粒子）が出現する可能性が理論的に指摘されている。マヨラナ粒子のもつ特殊な統計性を利用すると、エラーを生じない新原理の“トポロジカル”量子計算ができると言われているため、物質の確立が望まれている。我々は  $\beta$ -PdBi<sub>2</sub> を有力なトポロジカル超伝導体候補物質として提案してきたが、今回、高品質の単結晶を作製し、走査型トンネル顕微鏡法／分光法（STM/STS）を用いることで、この物質の表面におけるスピン偏極と超伝導を同時に観測することに世界で初めて成功した。観測結果は、全ての電子状態がスピン偏極しており、そのスピン偏極状態が超伝導になっていることを示すものであった。本研究成果は、これまで調べるのが難しかったスピン構造と超伝導の関係解明に向けて突破口を開くものであり、今後、トポロジカル超伝導の完全検証やマヨラナ粒子の検出へつながることが期待できる。

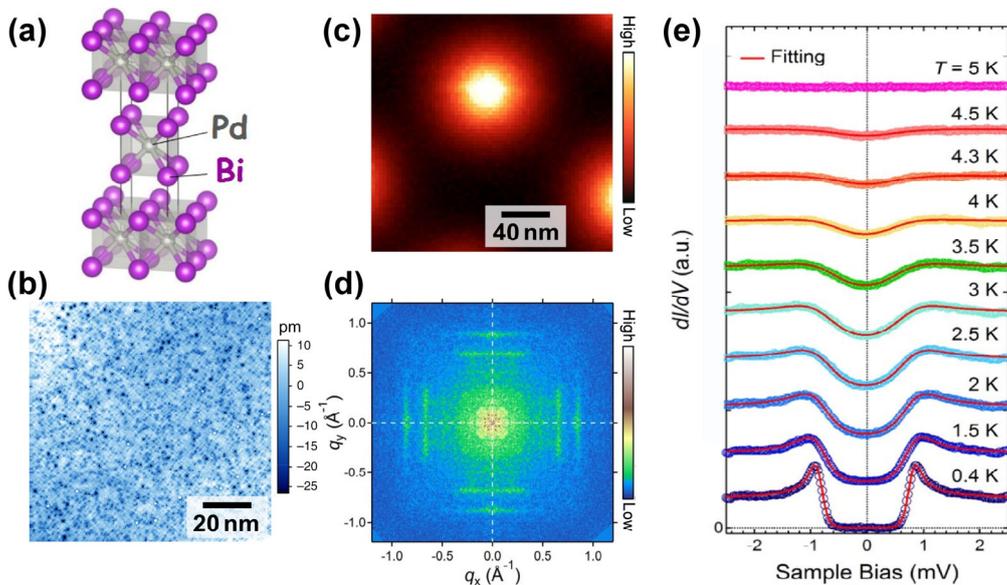


図4. トポロジカル超伝導体候補物質 $\beta$ -PbBi<sub>2</sub>。(a) 結晶構造。(b) 原子像。(c) 1.5 Kにおける  $V=0$  mV の  $dI/dV$  マップによる磁束芯の解像。(d) 準粒子干渉パターン。(e)  $dI/dV$  スペクトル(超伝導ギャップ)の温度依存性。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計45件、全て査読有)

- [1] “A Weak Topological Insulator State in Quasi-one-dimensional Bismuth Iodide”  
R. Noguchi, T. Takahashi, K. Kuroda, M. Ochi, T. Shirasawa, M. Sakano, C. Bareille, M. Nakayama, M.D. Watson, K. Yaji, A. Harasawa, H. Iwasawa, P. Dudin, T.K. Kim, M. Hoesch, V. Kandyba, A. Giampietri, A. Barinov, S. Shin, R. Arita, T. Sasagawa, and T. Kondo,  
*Nature* **566**, 518 (2019).
- [2] “Emergence of Superconductivity in the Cuprates via a Universal Percolation Process”  
D. Pelc, M. Vučković, M.S. Grbić, M. Požek, G. Yu, T. Sasagawa, M. Greven, and N. Barišić,  
*Nature Commun.* **9**, 4327 (2018).
- [3] “Ubiquitous Formation of Bulk Dirac Cones and Topological Surface States from a Single Orbital Manifold in Transition-metal Dichalcogenides”  
M.S. Bahramy, O.J. Clark, B.-J. Yang, J. Feng, L. Bawden, J. M. Riley, I. Markovic, F. Mazzola, V. Sunko, D. Biswas, S. P. Cooil, M. Jorge, J.W.Wells, M. Leandersson, T. Balasubramanian, J. Fujii, I. Vobornik, J. Rault, T. K. Kim, M. Hoesch, K. Okawa, M. Asakawa, T. Sasagawa, T. Eknapakul, W. Meevasana, and P.D.C. King\*,  
*Nature Materials* **17**, 21 (2018).
- [4] “Ultrafast Dynamics of Vibrational Symmetry Breaking in a Charge-ordered Nickelate”  
G. Coslovich, A.F. Kemper, S. Behl, B. Huber, H. A. Bechtel, T. Sasagawa, M.C. Martin, A. Lanzara, and R.A. Kaindl,  
*Science Advances* **3**, e1600735 (2017).
- [5] “Full-gap Superconductivity in Spin-polarised Surface States of Topological Semimetal  $\beta$ -PdBi<sub>2</sub>”

K. Iwaya, Y. Kohsaka, K. Okawa, T. Machida, M.S. Bahramy, T. Hanaguri, and T. Sasagawa,

*Nature Commun.* **8**, 976 (2017).

- [6] “Observation of Zeeman Effect in Topological Surface State with Distinct Material Dependence”

Y.-S. Fu, T. Hanaguri, K. Igarashi, M. Kawamura, M. S. Bahramy, and T. Sasagawa,

*Nature Commun.* **7**, 10829 (2016).

[学会発表] (計 148 件)

- [1] “二次元ヘテロ系の物質科学に向けた層状化合物の単結晶・物性開拓” 笹川崇男  
日本物理学会第 74 回年次大会 領域 7, 4 合同シンポジウム「原子層物質ヘテロ構造の創製と物性探索」 Mar 14-17 (2019). <招待講演>
- [2] “トポロジカル超伝導の確立に向けた物質・物性開拓”  
つくば-柏-本郷 超伝導かけはしプロジェクト ワークショップ (2) Jan 15-16 (2019). <招待講演>
- [3] “Catalogue of Single Crystals having Exotic Electronic States” 笹川崇男  
The 19th Japan-Korea-Taiwan Symposium on Strongly Correlated Electron Systems (JKT19), Jan 11-13 (2019). <招待講演>
- [5] “トポロジカル物性科学に向けた物質開拓” 笹川崇男  
日本物理学会 2018 年秋季大会 領域 5, 9, 4, 8 合同シンポジウム「光で切り拓く新しいトポロジカル物性科学」 Sep 9-12 (2018). <招待講演>
- [6] “誤り耐性量子計算に向けたトポロジカル電子物質・物性の開拓” 笹川崇男  
東大物性研短期研究会「量子情報・物性の新潮流」 Aug 1-3 (2018). <招待講演>
- [7] “トポロジカル電子物質の開拓” 笹川崇男  
日本物理学会第 73 回年次大会 領域 8, 4, 3, 1, 11 合同シンポジウム「トポロジーがもたらす物理学の新展開」 Mar 22-25 (2018). <招待講演>
- [8] “電子の隠れた超能力の開拓：新奇な絶縁体から超伝導体まで” 笹川崇男  
フロンティアサロン第 7 回永瀬賞・特別賞受賞記念：高校生のためのサイエンスセミナー, Sep 22 (2017). <招待講演>
- [9] “超伝導状態のトポロジーが拓く量子計算の未来” 笹川崇男  
第 78 回応用物理学会秋季学術講演会特別シンポジウム「物質中のトポロジー：応用にどのように結びつくのか？」 Sep 5-8 (2017). <招待講演>
- [10] “トポロジカル物質が拓く未来：スピントロニクスから量子計算まで” 笹川崇男  
2017 年度日本物理学会科学セミナー「トポロジーがひらく新しい科学」 Aug 19-20 (2017). <招待講演>
- [11] “トポロジカル超伝導候補物質の開拓” 笹川崇男  
基研研究会「超伝導研究の最先端：多自由度、非平衡、電子相関、トポロジー、人工制御」 Jun 19-21 (2017). <招待講演>
- [12] “トポロジカル量子計算に向けた材料科学者の取り組み” 笹川崇男  
第 36 回量子情報技術研究会 (QIT36) May 29-30 (2017). <招待講演>
- [13] “トポロジカル物質を用いた量子計算への期待と課題” 笹川崇男  
科学技術未来戦略ワークショップ「トポロジカル量子戦略～量子力学の新展開がもたらすデバイスイノベーション～」 Dec 19 (2016) <招待講演>
- [14] “AAPPS C.N.Yang Award Presentation - Topology and Quantum Physics” T. Sasagawa  
Joint 13th Asia Pacific Physics Conference and 22nd Australian Institute of Physics Congress (APPC-AIP) Dec 4-8 (2016). <招待講演>
- [16] “相対論やトポロジーの効果が作り出す新奇機能性電子材料の開拓” 笹川崇男  
5 セラミックス研究機関合同講演会「セラミックスの構造制御と機能発現」 Nov 22 (2016). <招待講演>
- [17] “トポロジカルな電子状態：物質、物性、機能” 笹川崇男  
日本磁気学会第 208 回研究会「スピントロニクスにおける次世代材料開発」 Jun 9 (2016). <招待講演>

〔図書〕（計1件）

[1] “さまざまな超伝導体”（4章） pp.310-315

笹川崇男

超伝導磁束状態の物理（裳華房 2016）

〔産業財産権〕

○出願状況（計0件）

○取得状況（計0件）

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.msl.titech.ac.jp/~sasagawa/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究分担者

### (2) 研究協力者

研究協力者氏名：矢野 力三

ローマ字氏名：Rikizo YANO

研究協力者氏名：大川 顕次郎

ローマ字氏名：Kenjiro OKAWA

研究協力者氏名：三澤 哲郎

ローマ字氏名：Tetsuro MISAWA

研究協力者氏名：村瀬 正恭

ローマ字氏名：Masayuki MURASE

研究協力者氏名：花栗 哲郎

ローマ字氏名：Tetsuo HANAGURI

研究協力者氏名：石坂 香子

ローマ字氏名：Kyoko ISHIZAKA

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。