

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 14 日現在

機関番号：13901

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2016～2017

課題番号：16H06861

研究課題名(和文)トポロジカル半金属における新奇トポロジカル量子現象の理論的研究

研究課題名(英文)Theoretical study on topological quantum phenomena in topological semimetals

研究代表者

小林 伸吾 (Kobayashi, Shingo)

名古屋大学・工学研究科・特任助教

研究者番号：40779675

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：近年トポロジカル半金属は異常電磁気応答やトポロジカル超伝導性を示すことから理論と実験双方から注目を集めています。

第一の成果は、交差線ノード半金属という新奇な半金属に対し、その基礎理論構築及び候補物質提案を行ったことです。この研究より包括的な物質探索が可能です。

第二の成果は、アンチペロブスカイト型ディラック半金属に対するトポロジカル超伝導理論を構築しました。この研究より大きい巻き付き数を持つ新しいトポロジカル相を発見しました。

研究成果の概要(英文)：Topological semimetals have recently attracted considerable theoretical and experimental interest since they exhibit anomalous electromagnetic response and topological superconductivity.

The first research outcome is to establish the general theory of crossing-line-node semimetals and propose candidate materials. This research may stimulate experimental search for topological materials.

The second research outcome is to clarify topological superconductivity in antiperovskite type Dirac semimetals and investigate a new topological phase with a higher winding number.

研究分野：物性物理学

キーワード：トポロジカル半金属 トポロジカル超伝導体 ディラック半金属

1. 研究開始当初の背景

近年、物性物理分野において、幾何学や代数学、群論などの数学的手法により物質の普遍的な性質を探索しようという大きな潮流があり、トポロジカル絶縁体・超伝導体およびトポロジカル半金属といった、固体電子系のトポロジを議論する研究が盛んに行われている。その中でもトポロジカル半金属はディラック半金属、ワイル半金属、線ノード半金属など様々な種類が見つかった。これらの物質ではフェルミ順位近傍の電子状態が有効的にディラック/ワイル方程式で記述される。よって、素粒子物理学と物性物理学を結ぶ学際的な研究分野として理論と実験の双方から注目を集めている。

2. 研究の目的

私はこれまでトポロジカル半金属においてトポロジと群論を用いた研究を行ってきた。トポロジカル半金属の候補物質が次々と発見されていることを念頭に置き、本研究ではトポロジカル半金属における(1)トポロジカル相転移現象と(2)トポロジカル超伝導性を解明することを目的に研究を行った。

3. 研究の方法

(1) 線ノード半金属に焦点を当て、結晶対称性より保護された線ノードの種類を分類する。k・p法により有効モデルを構築する。スピン軌道相互作用を加え、トポロジカル相転移(線ノード半金属 トポロジカル絶縁体や線ノード半金属 ディラック半金属など)の可能性を模索する。

(2) アンチペロブスカイト系のように高い対称性を持ち対称点周りで縮退したバンドを持つ物質を念頭においてモデルと構築する。Oh対称性によりクーパ対を分類し、可能な超伝導相を探索する。軌道間と軌道内の引力相互作用を仮定し超伝導相図を計算し、安定な超伝導状態を決定する。さらには、表面状も計算しマヨラナ準粒子の存在を明らかにする。

4. 研究成果

(1) 私は名古屋大学のグループとの共同研究で複数のバンド交差線を持つ線ノード半金属(交差線ノード半金属)を点群の観点から分類した(図1)。特に、Cnv対称性が重要な役割を果たしていることを見出し、鏡映面の枚数と線ノードの数が対応していることを明らかにした。k・p法により分類した全ての交差線ノード半金属に対する有効モデルも導出した。また、スピン軌道相互作用の効果により交差線ノード半金属がトポロジカル絶縁体あるいはディラック半金属へ転移する条件を明らかにした。興味深いことに、転移前の交差線ノード半金属の形状から転移後の状態を予測することが可能であることもわかった。

さらには、第一原理計算より、YH3 とその

系列において3本の線ノードを持つ状態が存在すること明らかにし、スピン軌道相互作用を入れるとトポロジカル絶縁体になることを明らかにした。本研究は第一原理計算などを用いてトポロジカル物質を探索する一つの指針を与えていると考えている。

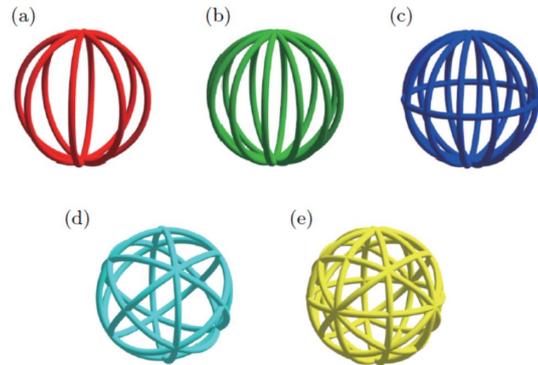


図1 交差線ノード半金属の形状

[Phys. Rev. B **95**, 245208 (2017)より抜粋]

(2) アンチペロブスカイト化合物は点近傍にOh対称性により生じる2つの4重縮退したバンドがある。それぞれd軌道とp軌道から構成され、点近傍で交わりディラック点を作っている。さらには、軌道の混成が生じてディラック点にギャップが開くとき、トポロジカル結晶絶縁体となることが知られている。

私は京都大学基礎物理学研究所のグループとの共同研究でOh対称性を持つ物質における超伝導理論を構築した。我々は対称性の観点からクーパ対を分類し、軌道内の引力相互作用が強いときOh群のAg表現が安定であり、軌道間の引力相互作用が強いときはOh群のAu表現が安定であることを明らかにした。

さらには、トポロジカル数の計算より、Au表現の超伝導状態はトポロジカル超伝導であることを明らかにした。興味深いことに、このトポロジカル相では大きいトポロジカル数を持つ新奇トポロジカル超伝導状態が実現されている。このような大きいトポロジカル数を得るには高い結晶対称性が不可欠であり、アンチペロブスカイト化合物のようなOh対称性を持つ系に固有の現象であると考えられる。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 6 件)

A. Ikeda, T. Fukumoto, M. Oudah, J. N. Hausmann, S. Yonezawa, S. Kobayashi, M. Sato, C. Tassel, F. Takeiri, H. Takatsu, H. Kageyama, Y. Maeno, 「Theoretical band structure of the superconducting

antiperovskite oxide $\text{Sr}_{3-x}\text{SnO}$ 」 Physica B: Physics of Condensed Matter, Elsevier, 査読有, 536, 752-756 (2018)

DOI: 10.1016/j.physb.2017.10.089

S. Kobayashi, Y. Yamakawa, A. Yamakage, T. Inohara, Y. Okamoto, and Y. Tanaka, 「 Crossing-Line-Node Semimetals: General Theory and Application to Rare-Earth Trihydrides 」, Physical Review B, American Physical Society, 査読有, 95, 245208(1)- 245208(15) (2017)

DOI: 10.1103/PhysRevB.95.245208

Y. Xiong, A. Yamakage, S. Kobayashi, M. Sato, and Y. Tanaka, 「 Anisotropic magnetic responses of topological crystalline superconductors 」, Crystals, MDPI AG, 査読有, 7, 58(1)-58(18) (2017)

DOI: 10.3390/cryst7020058

S. Tamura, S. Kobayashi, L. Bo, and Y. Tanaka, 「 Theory of surface Andreev bound states and tunneling spectroscopy in three-dimensional chiral superconductors 」, Physical Review B, American Physical Society, 査読有, 95, 104511(1)- 104511(22) (2017)

DOI: 10.1103/PhysRevB.95.104511

S. Kobayashi, Y. Yanase, and M. Sato, 「 Topologically stable gapless phases in nonsymmorphic superconductors 」, Physical Review B, American Physical Society, 査読有, 94, 134512(1)-134512(11) (2016)

DOI: 10.1103/PhysRevB.94.134512

M. Oudah, A. Ikeda, J. N. Hausmann, S. Yonezawa, T. Fukumoto, S. Kobayashi, M. Sato, and Y. Maeno, 「 Superconductivity in the antiperovskite Dirac-metal oxide $\text{Sr}_{3-x}\text{SnO}$ 」, Nature Communications, Nature, 査読有, 7, 13617(1)-13617(6) (2016)

DOI: 10.1038/ncomms13617

[学会発表](計 13 件)

[国際発表]

S. Kobayashi, Y. Yamakawa, A. Yamakage, Y. Okamoto, and Y. Tanaka
「 Crossing-line-node semimetals: general theory and application to rare-earth trihydrides 」, 『 American Physical Society March Meeting 2018 』, Los Angeles, USA (March, 2018)

S. Kobayashi, S. Sumita, Y. Yanase, and M. Sato 「 Flat band Andreev bound states in unconventional superconductors 」, 『 Oxide Superspin2017 』, Kyoto, Japan (November, 2017)

S. Kobayashi, S. Sumita, Y. Yanase, and M. Sato 「 A hidden topological surface state in nodal superconductors coexisting with anti-ferromagnetic order 」, 『 Trend in Theory of Correlated Materials 』, Tsukuba, Japan (September, 2017)

S. Kobayashi, Y. Yamakawa, A. Yamakawa, T. Inohara, Y. Okamoto, and Y. Tanaka, 「 Crossing-line-node semimetals: general theory and application to rare-earth trihydrides 」, 『 International Conference on Topological Materials Science 2017 』, Tokyo, Japan (May, 2017)

S. Kobayashi and M. Sato 「 Topological superconductivity in Dirac semimetals 」, 『 TOP-SPIN3: Spin and Topological Phenomena in Nanostructures- Towards Topological Materials Science 』, Dresden, Germany (April, 2017)

S. Kobayashi, Y. Tanaka, and M. Sato, 「 Fragile zero-energy surface states in three-dimensional superconductors 」, 『 American Physical Society March Meeting 2017 』, New Orleans, USA (March, 2017)

S. Kobayashi, Y. Tanaka, and M. Sato, 「 Line nodes and surface flat band instability in odd-parity superconductors 」, 『 Superconducting Hybrid nanostructures: physics and applications 』, Moscow, Russian Federation (September, 2016)

[国内発表]

川上拓人、岡村鉄矢、小林伸吾、佐藤昌利、「スピン 3/2 トポロジカル絶縁体の超伝導」、『日本物理学会 第 73 回年次大会』、東京都 (2018 年 3 月)

小林伸吾、山川洋一、山影相、井ノ原拓実、岡本佳比古、田仲由喜夫、「点群により保護された交差線ノード半金属」、『日本物理学会 2017 年秋季大会』、岩手県 (2017 年 9 月)

小林伸吾、山川洋一、山影相、井ノ原拓実、岡本佳比古、田仲由喜夫、「点群により保護されたディラックラインノード半

金属の分類』、『理研 iTHES 神戸量子物性研究会』、兵庫県 (2017 年 3 月)

小林伸吾、柳瀬陽一、佐藤昌利、「非共型対称性な超伝導体におけるノードのトポロジカル安定性』、『第 2 回「トポロジーが紡ぐ物質科学のフロンティア」領域研究会』、宮城県 (2016 年 12 月)

小林伸吾、佐藤昌利、「ディラック半金属とトポロジカル超伝導』、『第 10 回物性科学領域横断研究会』、兵庫県 (2016 年 12 月)

小林伸吾、柳瀬陽一、佐藤昌利、「非共型対称性で保護された線ノード超伝導状態』、『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」』、京都府 (2016 年 10 月)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小林伸吾 (KOBAYASHI, Shingo)
名古屋大学大学院工学研究科・特任助教
研究者番号：40779675