

令和 2 年 6 月 6 日現在

機関番号：12608

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2019

課題番号：16K13834

研究課題名(和文)カイラル伝導の理論的探索

研究課題名(英文)Theoretical studies on chiral transport in crystals

研究代表者

村上 修一 (Murakami, Shuichi)

東京工業大学・理学院・教授

研究者番号：30282685

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：らせん状構造の結晶で電流がそれと平行や反平行に軌道磁化を誘起する現象を以前予言し、カイラル伝導と呼ぶ。本研究で結晶内伝導のらせん性を示すパラメタを導入し、これが古典的ソレノイドより1, 2桁大きくなりうることを示した。また、極性金属、2次元薄膜、絶縁体界面・表面など極性を持つ金属に対して新たに電流誘起軌道磁化の理論を構築し、これが環状電流形成によることを示した。また2次元系面内方向の軌道磁化の計算手法を開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

電流誘起軌道磁化(カイラル伝導)は、従来のスピン軌道相互作用を利用した磁化制御と異なり、結晶構造自身により決まる現象であり、多種多様な結晶構造を利用することで、従来のスピントロニクスとは異なる形で磁化を制御できる可能性を拓く。本研究によりこの効果が現れる物質系を、らせん構造の結晶のみならず、表面・界面、2次元原子層膜などさまざまな方向へ広げることができ、理論・実験面で今後の広がりが期待できる。

研究成果の概要(英文)：In our previous work we predicted that in chiral crystals, a current induces an orbital magnetization in either parallel or antiparallel directions, and we call this phenomenon chiral transport. In this project, we introduced a parameter representing how chiral the transport in the crystal is, and we showed that it can be enhanced by one or two orders of magnitude compared with classical solenoids. In addition, we constructed a theory of this current-induced orbital magnetization in a broader class of metals, such as polar metals, two-dimensional thin films without inversion symmetry, and surfaces/interfaces of insulators, and we physically interpret this phenomenon in terms of formation of current loops. As a byproduct, we constructed a method to calculate in-plane orbital magnetization in two-dimensional systems.

研究分野：物性理論

キーワード：物性理論 スピンエレクトロニクス

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

トポロジカル絶縁体やワイル半金属など、トポロジーにより特徴づけられる特異なバンド構造を持つ物質が近年盛んに研究されるようになり、ごく最近ではトポロジカル結晶絶縁体や nonsymmorphic な空間群対称性を持つ物質など、対称性とトポロジーとのかかわりで興味深い研究課題が多く出てきている。本研究代表者は例えばテルル (Te、図1) について、螺旋状の鎖が集合した構造であることに注目して、圧力下でワイル半金属となることを発表した。またこうした螺旋状の物質は、ソレノイドとの類推から、例えば電流を流すことで軌道磁化を生み出すことができることを理論的に提唱した。こうした磁化発現機構は、通常のスピントロニクスでの磁化制御機構のようにスピン軌道相互作用によらず、結晶構造の“非対称性”で規定されるため、従来とは異なる形での磁化制御機構につながる可能性があるとともに、物質探索や実験との共同研究なども面白い方向性と考えられる。

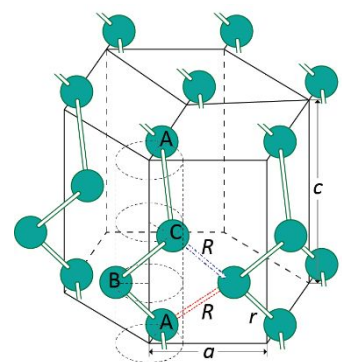


図1：テルルの結晶構造

2. 研究の目的

螺旋状の結晶構造を持つ物質など、空間反転対称性も鏡映対称性も持たない物質において、その結晶構造に基づく特異な輸送現象や物理的性質を探索する。探索においては解析計算が可能な簡単なモデルでの計算とともに、第一原理計算との協力による物質探索なども含めて行う。具体的研究項目としては(A)螺旋状の結晶でのソレノイドの輸送の探索、(B)カイラルな物質でのトポロジカルバンド構造の探索と制御、(C)他の粒子系でのカイラルな結晶構造のカイラル伝導、から着手し、そこから、(D)トポロジカル相との関わりの追究、(E)スピントロニクス応用に向けた検討、を行う。こうした研究を通じて、カイラル伝導を特徴づける結晶構造の「螺旋度」の定量化を行い、それがもたらす現象や候補物質を提案する。

3. 研究の方法

(A)螺旋状の系でのカイラル輸送の探索

強く束縛された電子のモデルなどを用いてカイラル輸送の性質を調べる。特に結晶構造とカイラル輸送の関係の定量化を行う。例えばスピンホール効果等、スピン軌道相互作用に起因した効果は、スピン軌道相互作用の大きさがスケールされるが、上に挙げたカイラル伝導はスピン軌道相互作用とは直接関係なく、むしろ結晶構造がどの程度螺旋状になっているかという「螺旋度」のような量で特徴づけられると考えられる。これをモデル計算を用いて定量化する。

(B)カイラルな物質でのトポロジカルバンド構造の探索と制御

カイラルな結晶構造の物質は実は数が多いが、カイラル輸送の側面は我々の研究以前はなかったと思われる。(A)での螺旋度の考え方を使うことで、カイラル伝導を示すと予想される物質を洗い出すことができる。第一原理計算の研究者と協力して、バンド構造やカイラル伝導の計算を行う。

(C)他の粒子系でのカイラルな結晶構造のカイラル伝導

電子がカイラルな結晶を流れると磁化が生じる現象を他の粒子系に応用し、例えば電流や熱流などの流れをカイラルな系に流すときの新規現象の可能性を探索する。

(D)トポロジカル相との関わりの追究

研究代表者の研究でも明らかになってきたように、対称性の有無、特に空間反転対称性の有無はトポロジカル相(トポロジカル絶縁体、ワイル半金属など)の出現に大きな影響を与える。ここで取り上げる系はカイラルで、空間反転を破り、ワイル半金属の出現を許している。これらから空間反転対称性の破れたカイラルなワイル半金属を考えて、カイラル伝導を計算する。

(E)スピントロニクス応用に向けた検討

スピン軌道相互作用を用いずに磁化を発現でき、それが結晶構造で制御できるということは、磁化制御のための新たな手段を我々が得ることを意味する。この手段を積極的に利用することでスピントロニクスへの応用につなげる可能性を検討する。

4. 研究成果

(1)カイラル伝導の理論の発展

[Yoda, Yokoyama, Murakami, Nano Lett. 18, 916 (2018), 養田, 横山, 村上, 日本物理学会誌 72, 872 (2017)]

らせん結晶でのカイラル伝導の理論の発展

らせん状の結晶構造を持つ系についてカイラル伝導の大きさがどのように決まるかを、蜂の巣

格子を積層した簡単な模型を用いて追究した(図2)。らせん状の系では結晶構造が右巻きないし左巻きとなり、古典的なソレノイドとの類推から、結晶の巻き方によって、電流を流すとそれと平行ないし反平行に磁化が生じると我々は以前予言し、カイラル伝導と呼んでいる。これについて、隣接した層間にらせん状に飛び移り積分を設定し、らせん状のホッピングやフェルミエネルギー等のパラメタを変化させて、カイラル伝導の大きさがどう変わるかを調べた。その結果、この模型のバンド構造は一般にワイル点を持っていて、そのワイル点周辺の有効模型でこのカイラル伝導がよく記述できることが分かった。

さらにこの系で、古典的なソレノイドと比較したときの結晶のカイラル性・らせん性を示す無次元パラメタ ξ を導入することができた。これは結晶の単位胞をマイクロなソレノイドとみなしたときの巻き数を表して、らせん軸方向の電流と単位胞のまわりを周回する電流との比で表される(図3)。この値は系の詳細に依存するが、系やそのフェルミエネルギーを調整すれば、このらせん性を表すパラメタ ξ が古典的なソレノイドと比べて1, 2桁程度大きくなる場合があることを示した。例えば図2のような結晶は直観的には ξ が1未満であろうと予想されるが、この系のバンド構造がワイル半金属となりフェルミエネルギーがワイル点近傍になると、この ξ が発散していくことが分かった。これは結晶構造を調整していくことで、カイラル伝導を大きくできる可能性があることを示唆している。

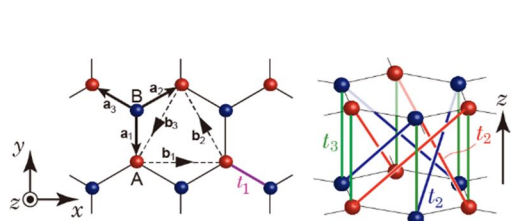


図2：カイラル伝導の模型

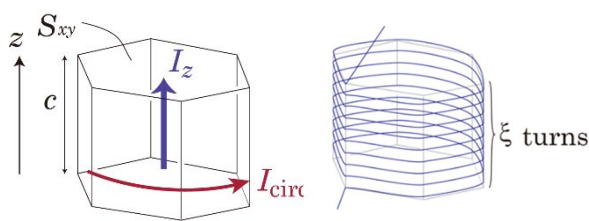


図3：カイラル伝導を特徴づける性能指数 ξ

極性金属での電流誘起軌道磁化

前項で述べたカイラル伝導、すなわち電流誘起軌道磁化は、空間反転対称性が破れていれば出現するので、らせん状の系とは異なる対称性を持つ系として極性金属を考え、その性質を考察した。簡単な模型として2種類の2次元正方格子を交互に積層し、隣接した層間に飛び移り積分を設定して簡単な極性金属の模型を作り、電流誘起軌道磁化がどのような起源でどのように出現するかを調べた。その結果、対称性からも分かる通り、極性のベクトルと電流と誘起される軌道磁化の3つのベクトルは全て互いに垂直であることを見いだした。さらに面間のホッピングが面内ホッピングに比べて非常に小さい場合に、面間ホッピングを摂動として電流誘起軌道磁化を計算し、面間に形成される環状電流が軌道磁化の起源であることを確認した。また例として極性金属 SnP において極性方向と垂直に電流を、第一原理計算から得た SnP に関するパラメタを用いて定量評価して、十分観測しうる大きさであることを示した。

2次元系の面内方向軌道磁化

空間反転対称性の破れた2次元薄膜、絶縁体の界面・表面の2次元金属などについて、模型を構築して、電流誘起軌道磁化の計算とその物理的解釈の理論を構築した。なお対称性から面内方向に電流を流すと、面内で電流に垂直方向に軌道磁化が生じると予想され、計算結果もそれと一致している。なお2次元系については、先行研究の範囲で面内方向の軌道磁化を計算する手法が存在しないため、計算手法を開発して計算を行った(図4)。ここで用いた手法は、2次元系を仮想的に重層して仮想的な3次元系とみなして計算する方法であり、この手法を用いて2次元系での面内軌道磁化の公式を得た。さらに2次元薄膜や絶縁体表面の強束縛模型を作って電流誘起軌道磁化の計算を行い、物理的性質を解析した。例えば絶縁体表面に金属的な表面状態があるときには、この金属状態に電流を流すと図5のように環状電流が生じて、軌道磁化が誘起され

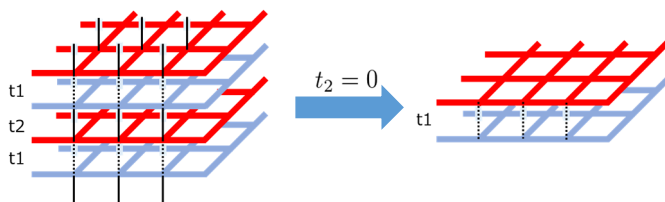


図4：2次元系面内軌道磁化を仮想的3次元系から求める手法

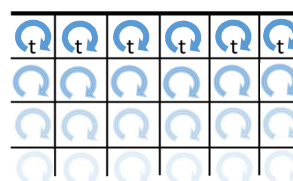


図5：絶縁体表面での電流誘起軌道磁化の模式図

ることが分かった。こうした計算手法は2次元原子層強磁性体の磁化の計算や、またLaAlO₃/SrTiO₃界面など絶縁体の界面での電流誘起軌道磁化の計算へと広く応用できる。

まとめと展望

このように本研究では、らせん結晶をはじめとして、極性金属、2次元薄膜、絶縁体界面・表面など極性を持つ金属に対して新たに電流誘起軌道磁化の理論を構築し、これが環状電流形成によることを示した。また2次元系面内方向の軌道磁化の計算手法を開発した。このように電流誘起軌道磁化(カイラル伝導)は、従来のスピン軌道相互作用を利用した磁化制御と異なり、結晶構造自身により決まる現象であり、多種多様な結晶構造を利用することで、従来のスピントロニクスとは異なる形で磁化を制御できる可能性を拓き、理論・実験面で今後の広がりが期待できる。なおトポロジカル系での電流誘起軌道磁化についても計算が進んでおり、非トポロジカル系にはない特異な性質が現れることを見出しつつあり、未解決の課題があるものの今後の発展の余地が大きい。

(2)トポロジカル半金属の理論と低い結晶対称性の系への応用

[Murakami, Hirayama, Okugawa, Miyake, Sci. Adv. 3, e1602680 (2017); Takahashi, Murakami, Phys. Rev. B96, 155206 (2017); Yokomizo, Murakami, Phys. Rev. B95, 155101 (2016)]

空間反転対称性が破れた系では、ワイル半金属と呼ばれるトポロジカル半金属が実現される可能性がある。本研究では空間反転対称性が破れた系でバンドギャップを閉じたときには、ワイル半金属ないしノーダルライン半金属というトポロジカル半金属に必ずなることを理論的に示した。さらに第一原理計算によりこうした挙動を示す物質をいくつか発見し、確かにこのような挙動を示すことを実証した。また、ワイル半金属と絶縁体との超格子で現れる物質相を理論的に解明した。2つの積層パターンを考え、各層の厚さを変えることで出現する相図を、有効模型と格子模型の2つで計算した。特に一方の積層パターンではさまざまなチャーン数の量子異常ホール相が出るという興味深い結果が得られた。また対称性によりノーダルラインが必ず現れるような系(filling-enforced nodal-line semimetal)の対称性を網羅的に分類した。これらの結果は、カイラル伝導を実現する系のデザインに重要な知見を与える。

(3)カイラル結晶でのフォノン角運動量の理論

カイラル伝導で考えたような電流誘起磁化と類似の現象が、他の粒子系で見られるかを考察した。その例としてフォノンについて、空間反転対称性の破れた結晶に熱流を流すとフォノン角運動量が誘起されることを理論的に提案した。簡単な模型についてフォノンの分散と各フォノンモードでの角運動量を計算し、熱流を流したときにフォノン角運動量が生じることを見いだした。極性のある結晶であるGaNと、カイラルな結晶であるTe(図6)のそれぞれにつ

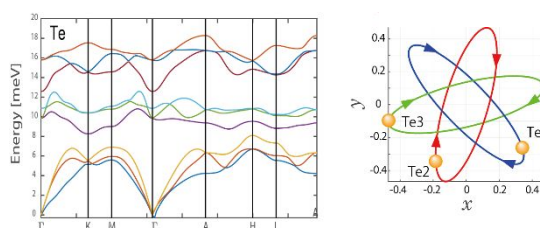


図6：テルルのフォノンのバンド構造(左図)とフォノンでの原子核の回転運動の例(右図)

いて、フォノンの分散と各フォノンモードでの角運動量を計算し、熱流を流したときにフォノン角運動量が生じることを見いだした。テルルのようにカイラルな結晶でフォノンにこうした性質が出ることは、本研究のテーマであるカイラル伝導が、フォノンなどにも拡張できることを示唆しており、今後こうした方向へ研究を進展させることができると期待できる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Taiki Yoda, Takehito Yokoyama, and Shuichi Murakami	4. 巻 18
2. 論文標題 Orbital Edelstein Effect as a Condensed-Matter Analog of Solenoids	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nano Lett.	6. 最初と最後の頁 916-920
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.7b04300	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Shuichi Murakami, Motoaki Hirayama, Ryo Okugawa, Takashi Miyake	4. 巻 3
2. 論文標題 Emergence of topological semimetals in gap closing in semiconductors without inversion symmetry	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Sci. Adv.	6. 最初と最後の頁 e1602680
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.1602680	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 養田大騎, 横山毅人, 村上修一	4. 巻 72巻
2. 論文標題 らせん結晶における電流が誘起する軌道磁化	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 日本物理学会誌	6. 最初と最後の頁 872
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11316/butsuri.72.12_872	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ryo Takahashi, Motoaki Hirayama, and Shuichi Murakami	4. 巻 96
2. 論文標題 Spinless hourglass nodal-line semimetals	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 155206
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.96.155206	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Yokomizo, S. Murakami	4. 巻 95
2. 論文標題 Topological phases in a Weyl semimetal multilayer	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 155101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.155101	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計28件 (うち招待講演 26件 / うち国際学会 24件)

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Orbital Edelstein effect and Phonon Edelstein Effect
3. 学会等名 MRS Fall Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Theoretical Proposals for New Edelstein effects
3. 学会等名 International Symposium on Magnetism and Magnetic Materials 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 New variants of the Edelstein effect
3. 学会等名 SPIE Optics + Photonics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Topology and transport in inversion-asymmetric crystals
3. 学会等名 OIST seminar (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Various Edelstein effects in inversion asymmetric crystals
3. 学会等名 IcAUMS 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Topology and transport in inversion asymmetric crystals
3. 学会等名 FROM SOLID STATE TO BIOPHYSICS IX (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Topological bands and topological phase transitions in electronic and magnonic systems
3. 学会等名 Intermag 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Edelstein effects in inversion asymmetric crystals
3. 学会等名 6th International Conference on Superconductivity and Magnetism (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Topology and transport in inversion-asymmetric crystals
3. 学会等名 The 2nd Fudan Workshop on Complex Quantum Material (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Symmetry, topology, and emergent phenomena in topological semimetals
3. 学会等名 Psi-k/CECAM Research Conference on "Ab-initio Spin-orbitronics", (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Topology and transport in inversion-asymmetric crystals
3. 学会等名 CEMS Symposium on Trends in Condensed Matter Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 空間反転対称性の破れた系でのトポロジカル相とスピントロニクス
3. 学会等名 北海道大学学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 New variants of the Edelstein effect
3. 学会等名 Japan-Korea Spintronics Program (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Edelstein effects in inversion asymmetric crystals
3. 学会等名 New Excitations in Spintronics 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Orbital Edelstein effect as a condensed-matter analog of solenoid
3. 学会等名 APS March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Topology and symmetry in topological semimetals (plenary)
3. 学会等名 1st Workshop on Topological Quantum Phenomena and Quantum Information Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Topological phases in condensed materials (tutorial)
3. 学会等名 1st Workshop on Topological Quantum Phenomena and Quantum Information Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 トポロジカル物質相でのトポロジーと対称性の協奏
3. 学会等名 物性物理分野における協働展開 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 In-plane electric polarization of bilayer graphene nanoribbons by interlayer voltage
3. 学会等名 "5th International Conference on Superconductivity and Ferromagnetism (ICSM 2016)" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Topological phases in condensed matter
3. 学会等名 17th iTHES Colloquium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Interplay between topology and symmetry in topological insulators/semimetals
3. 学会等名 EU-JAPAN Workshop on Computational Materials Design and Realization for Spintronics, Moltronics, Quantronics, Superconductivity and Topotronics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Current-induced magnetizations in chiral systems
3. 学会等名 International workshop on Nano-Spin Conversion Science and Quantum Spin Dynamics (NSCS-QSD 2016) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 村上 修一
2. 発表標題 ワイル半金属とトポロジカル相転移
3. 学会等名 第二回 デイラック電子系マルチフェロイクス研究会 (招待講演)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Topological phase transitions in three dimensions
3. 学会等名 Chiral Matter 2016 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Emergence of topological semimetals in gap closing in semiconductors without inversion symmetry
3. 学会等名 APS March Meeting 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Overview of topological metals
3. 学会等名 48th Springschool, Forschungszentrum Juelich (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Theory of Chiral Transport in Chiral Crystals
3. 学会等名 The 80th Okazaki Conference, Chirality-induced spin selectivity and its related phenomena (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Theory of chiral transport in chiral crystals
3. 学会等名 META 2019 (10th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (招待講演) (国際学会))
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----