

平成 30 年 6 月 14 日現在

機関番号：13901

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2017

課題番号：16K17725

研究課題名（和文）トポロジカル半金属の探索と量子輸送理論

研究課題名（英文）Material development and quantum transport theory of topological semimetals

研究代表者

山影 相 (Yamakage, Ai)

名古屋大学・理学研究科・助教

研究者番号：90750290

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,200,000円

研究成果の概要（和文）：ワイル半金属などのトポロジカル半金属では、その波動関数をもつトポロジカルな非自明性に由来して、電磁応答などの量子現象が新奇なものになる。本研究ではトポロジカル半金属の一つである線ノード半金属において、光誘起の異常ホール効果（印加電場の直交方向に電流が生じる）が起きることを発見した。また、線ノードが交差した構造をもつ線ノード半金属についての一般論を構築し、さらにそれを応用してRH₃（R:希土類）が三本の交差線ノードをもつトポロジカル半金属であることを予言した。

研究成果の概要（英文）：Topological semimetals such as Weyl semimetals exhibit novel quantum phenomena stemming from topological nontriviality of wavefunctions. We have shown that the photovoltaic anomalous Hall effect occurs in a nodal-line semimetal. Furthermore, we have studied a general theory for crossing nodal lines and its application to rare-earth trihydrides RH₃ (R:rare earth).

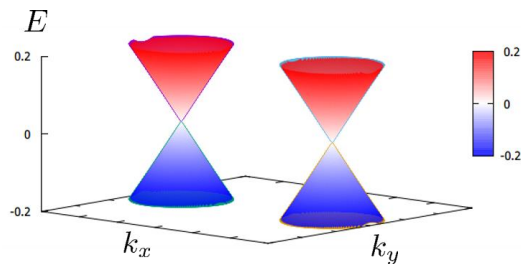
研究分野：物性理論

キーワード：トポロジカル 半金属 線ノード CaAgX

1. 研究開始当初の背景

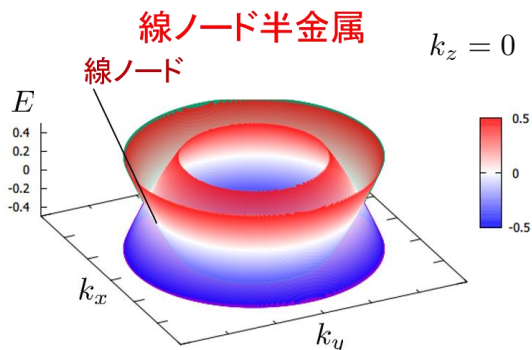
物質の電子状態は金属とバンドギャップをもつ絶縁体に大別されるが、これらの中間の状態として零ギャップ半導体を考えることができる。しかもこれは摂動に対して安定に存在する。近年ではこれが対称性とトポロジカル不変量の観点から理解され[A]、トポロジカル半金属(ワイル・ディラック半金属)と呼ばれている。これらの半金属は波動関数から定義されるトポロジカル不変量を持ち、これに対応して異常な量子現象が起きる。例えば、異常ホール効果やカイラル磁気効果と呼ばれるトポロジカルな電磁応答が生じると期待されている[B]。後者は外部電場を印加することなく、磁場に対して平行に電流が誘起されるという現象であり[C]、散逸の無い電子輸送の可能性があり非常に興味深い。

上に述べたのはバンドギャップがブリルアン域中の点で閉じている(点ノード)半金属である。



図：点ノード半金属のエネルギースペクトル

一方、ごく最近、申請者[D]を含む一連の研究により、点ではなく線上でバンドギャップが消失する(線ノード)トポロジカル半金属が可能であること、またその物質が見つかりつつある。



図：線ノード半金属のエネルギースペクトル

線ノードは点ノードとは明らかに異なる電子状態である。例えばこれらの系にキャリアがドーブされると、点ノード半金属の場合にはフェルミ面は球面であるが、線ノード半金属の場合には円環状になる。また、線ノードは鏡映などの結晶対称性によって保護されており、点ノードの場合とは異なるトポロジカル不変量を定義できることも申請者によって明らかにされている[D]。さらに磁場中のランダウ準位が平坦バンドを形成すること[E]や、線ノードの長さに比例して電気分極と軌道磁化が自発的に誘起される可能性[F]などが議論されており、点ノードとは異なる非自明な物性も期待されている。

2. 研究の目的

(1) 線ノードに固有の新奇物性を解明する。具体的には、外場(電場・磁場)に対する応答を調べる。点ノードでは上述の特異な電磁応答が生じたが、線ノードでは点ノードと定性的に異なる電磁応答が期待できる。

(2) 新しいトポロジカル半金属物質を見つける。これは、実験においても重要であるが、新しいトポロジカル相を見つけることは自然に新奇な物性の発見につながるもので、理論を考える上でも非常に示唆的である。

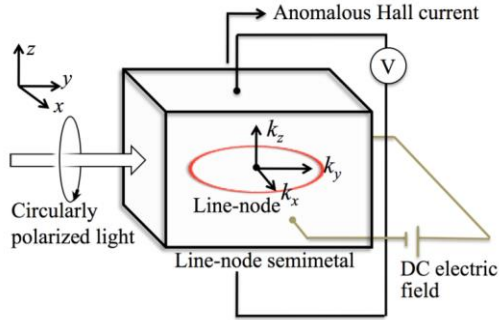
3. 研究の方法

(1) 電磁応答を評価するのに用いる模型は、簡単な 2×2 行列で表される有効ハミルトニアンを用いる。まずは線ノードに固有の振る舞いだけに興味があるので、このような有効模型で十分と考えられる。この模型で線形応答理論により電磁応答を計算する。また、光(高周波)に対する応答をフロッケ理論により議論する。

(2) 第一原理計算(wien2k, quantum espresso)によりバンド構造を計算する。これを基にWannier90によりタイトバインディング模型を構築し、トポロジカル不変量の解析をする。

4. 研究成果

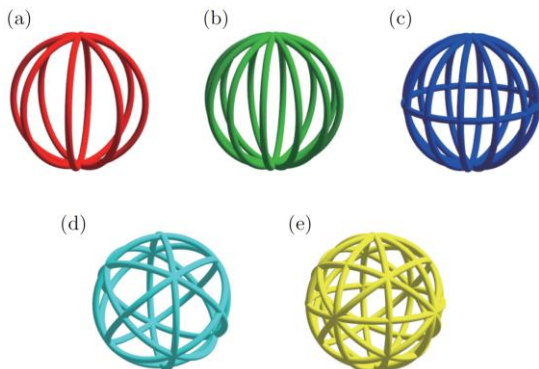
1. 線ノード半金属における光誘起異常ホール効果[4]



上図に示した配置で、線ノード半金属に円偏光を照射すると異常ホール効果が生じることを見出した。そのホール伝導率は線ノードの半径に比例する。異常ホール効果が起きる背後には、円偏光によって線ノードが点ノード（ワイル半金属）に変形するという機構があることも判明した。しかも、点ノードの数は最小の2個である。これまでに知られているワイル半金属物質に比べて非常にシンプルなワイル半金属の実現法としても興味深い。

2. 交差線ノードの一般論と三水素化希土類への応用[2]

点ノードは、その運動量とエネルギーという自由度をもつのに対し、線ノードは運動量とエネルギーに加えて、その形状自体の自由度をもつ。



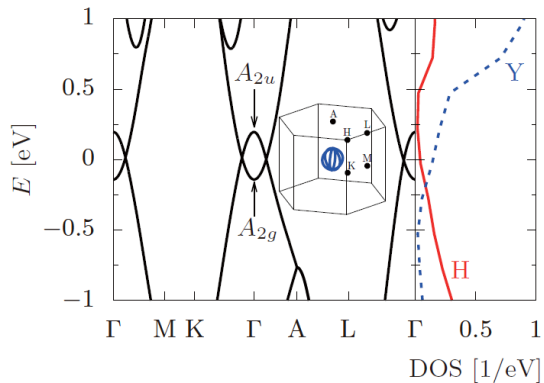
本研究では上図のような交差した形状の線ノードについての一般論を構築し、結晶の対称性と可能な交差線ノードのタイプを分類した。さらに、これらの交差線ノードがスピン軌道相互作用の効果によってトポジ

カル絶縁体になるかディラック半金属になるかを下図のように一意に決定できる場合があることを明らかにした。

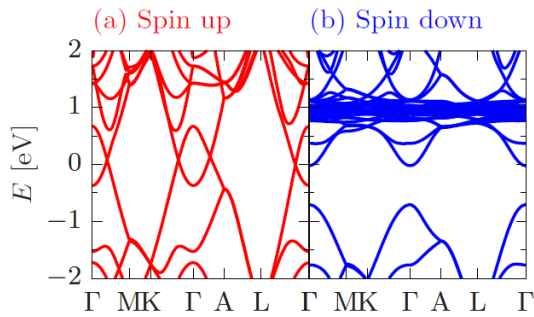
PG	Line nodes	SOI
C_s, C_{nh}	h	TI
D_{3d}	d^3	TI
$D_{nd} (n = 2, 4, 6)$	d^n	I
C_{2v}	$v(zx), v(zy)$	TI
	v^2	I
C_{3v}	v^3	TI
$C_{nv} (n = 4, 6)$	$v^{n/2}, d^{n/2}$	DP
	$v^{n/2}d^{n/2}$	I
D_{2h}	$h(zx), h(zy), h(xy), h^3$	TI
	h^2	NI
D_{3h}	h, v^3	TI
	hv^3	I
$D_{nh} (n = 4, 6)$	$v^{n/2}, d^{n/2}, hv^{n/2}, hd^{n/2}$	DP
	$v^{n/2}d^{n/2}$	NI
	$h, hv^{n/2}d^{n/2}$	TI
T_d	d^6	I
T_h	h^3	TI
O_h	h^3, d^6	DP
	h^3d^6	TI

図：結晶の点群 (PG) と線ノードの関係および、スピン軌道相互作用 (SOI) を考慮した後のトポジカル相。TI：トポジカル絶縁体, I：絶縁体, NI：通常絶縁体, DP：ディラック半金属。

これらの結果はトポジカル物質の探索を非常に簡単化する。実際、 RH_3 (R:希土類) においては3本の交差線ノードが現れることや、 GdH_3 ではハーフメタルの交差線ノードをもつことを明らかにした。



図： YH_3 のエネルギーバンドと交差線ノード



図：強磁性 GdH3 のエネルギーバンド

3. 超伝導対称性とトポロジカル不変量の関係[3]

当初の研究計画には無かったが、トポロジカル超伝導の超伝導対称性とトポロジカル不変量の間の一対一の関係があることを明らかにした。すなわち、クーパー対の異方性が非自明なトポロジカル相を生む。具体的な計算なしにトポロジカル超伝導相を予言することが可能になり、物質探索に有益である。さらに、超伝導対称性とトポロジカル超伝導体の表面に創出するマヨラナ粒子の磁気異方性の方向にも一対一の対応があることが分かり、磁場によって実験的にトポロジカル超伝導相の判定、ひいては、背後にある超伝導対称性についての有効な情報を得ることができる。

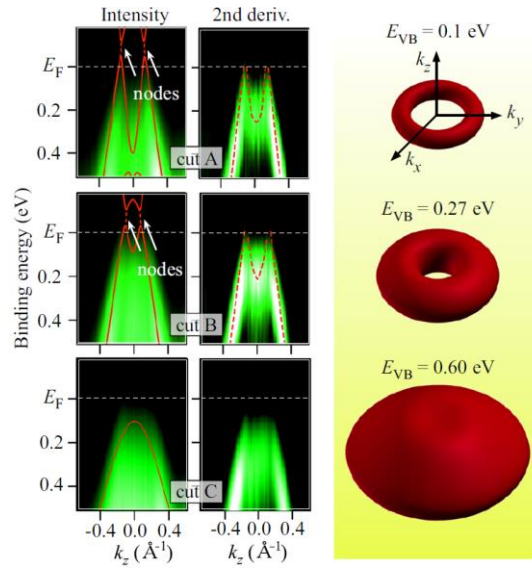
Γ	$W[U, x]$	Δ	S
A_{1u}	$W[C_2'(x)]$	$\sigma_y s_z$	x
A_{2u}	$W[\sigma_v(xz), x]$	$\sigma_z s_0$	y
B_{1u}	$W[C_2'(x)]$	$\sin k_x \sin k_y \sigma_z s_0$	x
B_{2u}	$W[\sigma_v(xz), x]$	$(\cos k_x - \cos k_y) \sigma_z s_0$	y
$E_u(x)$	0	$\sigma_y s_y$	0
$E_u(y)$	$W[\sigma_h, x]$	$\sigma_y s_x$	z

表：結晶の対称性が D_{4h} の場合の、超伝導対称性(既約表現 Γ)、トポロジカル不変量 W 、超伝導対ポテンシャル Δ の例、マヨラナ粒子の磁気異方性の方向 S 。

4. 角度分解光電子分光による CaAgAs におけるフェルミトーラスの観測[1]

当初の研究計画には無かったが、実験との共同研究により、我々が予言していた線ノード半金属候補物質 CaAgAs[D][G]におけるフェルミ面が、下図のように、トーラス状になっていることを観測した。これは線ノード半金属に少しのキャリアドーピングがされていることを意味する。すなわち、もしさらにキャリア制御ができればこの物質は理想的な

線ノード半金属物質として確立される。



<参考文献>

- [A] S. Murakami, *New J. Phys.* **9**, 356 (2007).
 [B] A. A. Zyuzin, et al., *Phys. Rev. B* **85**, 165110 (2012).
 [C] K. Fukushima, et al., *Phys. Rev. D* **78**, 074033 (2008).
 [D] **Ai Yamakage**, Youichi Yamakawa, Yukio Tanaka, and Yoshihiko Okamoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 013708 (2016).
 [E] J.-W. Rhim and Y. B. Kim, *Phys. Rev. B* **92**, 045126 (2015).
 [F] S. T. Ramamurthy and T. L. Hughes, *Phys. Rev. B* **95**, 075138 (2017).
 [G] Y. Okamoto, T. Inohara, **A. Yamakage**, Y. Yamakawa, and K. Takenaka, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 123701 (2016).

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 4 件)

全て査読有り

- [1] D. Takane, K. Nakayama, S. Souma, T. Wada, Y. Okamoto, K. Takenaka, Y. Yamakawa, **A. Yamakage**, T. Mitsuhashi, K. Horiba, H. Kumigashira, T. Takahashi, and T. Sato, “Observation of Dirac-like energy band and ring-torus Fermi surface in topological line-node semimetal CaAgAs,” *npj Quantum Materials* **3**, 1 (2018).
 [2] Shingo Kobayashi, Youichi Yamakawa, **Ai Yamakage**, Takumi Inohara, Yoshihiko Okamoto, and Yukio Tanaka, “Crossing-Line-Node Semimetals: General Theory and Application to Rare-Earth Trihydrides,” *Phys. Rev. B* **95**, 245208 (2017).
 [3] Y. Xiong, **A. Yamakage**, S. Kobayashi, M. Sato, and Y. Tanaka, “Anisotropic magnetic

responses of topological crystalline superconductors,” Crystals 7, 58 (2017).

- [4] K. Taguchi, D.-H. Xu, **A. Yamakage**, and K. T. Law, “Photovoltaic anomalous Hall effect in line-node semimetals,” Phys. Rev. B **94**, 155206 (2016).

[学会発表] (計 10 件)

(招待講演)

1. **山影相** 「トポロジカル超伝導体における表面リフシツク転移」合同シンポジウム「低次元超伝導の新展開」2017/8/19 横浜市立大学金沢八景キャンパス
2. **山影相** 「ラインノードディラック半金属 CaAgX(X=P,As)」第二回 ディラック電子系マルチフェロイクス研究会 2016/11/18 名古屋大学
3. **山影相** 「ラインノードディラック半金属 CaAgX(X=P,As)の提案と実現」日本物理学会 2016 年秋季大会 シンポジウム「トポロジカル材料開発の新展開」2016/9/14 金沢大学

(国際会議口頭発表)

1. **A. Yamakage**, Y. Yamakawa, K. Taguchi, Y. Tanaka, and Y. Okamoto, “Dirac and Weyl materials with nodal lines,” APS March Meeting 2018 March, 5, 2018, Los Angeles, California

(国内会議口頭発表)

1. **山影相**, 田口勝久「スピン縮退の解けたラインノード半金属の電子状態」日本物理学会 第 73 回年次大会 (2018 年) 2018 年 3 月 24 日 東京理科大学 (野田キャンパス)
2. **山影相** 「ラインノードを有するディラック・ワイル電子物質」第七回「強相関電子系理論の最前線」2017/12/5 イマジンホテル&リゾート函館
3. **山影相** 「はじめに」日本物理学会 2017 年秋季大会 領域 4, 領域 6, 領域 8 合同シンポジウム 主題: 超伝導物質および超流動ヘリウム研究の切り開くトポロジカル物理の最前線 岩手大学 2017/09/23
4. **山影相** 「トポロジカル超伝導体の不変量と磁場応答」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」京都大学 基礎物理学研究所 2017/06/19
5. **山影相** 「ラインノードディラック半金属 CaAgX (X=P, As)」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 片平さくらホール (東北大学 片平キャンパス内) 2016/12/16
6. **山影相** 「トポロジカル超伝導体におけるマヨラナ粒子の異方的磁気応答」第六回「強相関電子系理論の最前線」研

究会 -若手によるオープン・イノベーション- 勝浦観光ホテル 2016/12/22

[図書] (計 1 件)

Junichiro Inoue, **Ai Yamakage**, Syuta Honda, “Graphene in Spintronics: Fundamentals and Applications,” 306 pages, Pan Stanford (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

<http://www.st.phys.nagoya-u.ac.jp/~ai>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山影 相 (YAMAKAGE, Ai)

名古屋大学・大学院理学研究科・助教

研究者番号: 90750290

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

なし