

令和 5 年 6 月 5 日現在

機関番号：11301

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2022

課題番号：19K14607

研究課題名（和文）乱れのあるトポロジカル量子系における臨界現象の数値的研究

研究課題名（英文）Numerical study of critical phenomena in disordered topological quantum systems

研究代表者

小林 浩二（Kobayashi, Koji）

東北大学・金属材料研究所・特任助教

研究者番号：10711905

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,600,000円

研究成果の概要（和文）：乱れのあるトポロジカル量子系における臨界現象と輸送現象の性質を数値計算により明らかにした。

トポロジカル半金属における臨界現象の新しい解析方法の提案や、乱れの存在下での輸送現象を調べるための数値計算手法の改良を行い、それらを用いることで、これまでほぼ未知の領域であった乱れのあるディラック/ワイル半金属の臨界・輸送特性について詳細に調べた。さらに、その特殊な特性をスピントロニクス・デバイス応用へ繋げるための基礎研究や提案までを行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

トポロジカル量子系は乱れに対する頑強性が特徴とされているが、その具体的な性質の研究には技術的困難が伴う。本研究では新しい計算手法を提案すると同時に実際にそれを用いて新奇な輸送特性の性質などを調べたことで、乱れたトポロジカル量子系を効率的に研究する道筋を示した。

特にワイル半金属における新奇な磁気抵抗やホール効果の研究は、スピントロニクスデバイスへの応用を考える上で重要な基礎理論となるのみならず、デバイス応用へ向けた課題と利点を明らかにするなど、実験研究の進展も刺激するものである。

研究成果の概要（英文）：We have numerically studied critical properties and transport phenomena in disordered topological quantum systems.

We proposed a new analytical method for investigating transport phenomena in the presence of disorder. Using those numerical methods, we investigated in detail the critical and transport properties of Dirac/Weyl semimetals, which had been unclear because of the technical challenges. In addition, we carried out fundamental research and proposals for spintronics device applications of topological quantum systems.

研究分野：物性理論

キーワード：トポロジカル量子系 ワイル半金属 量子相転移 異常ホール効果 量子輸送現象

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) トポロジカル量子系研究の発展：近年、トポロジカルな秩序によって特徴付けられる新しい物質相が注目を集めている。その代表例といえるトポロジカル絶縁体は、バルクは絶縁体でありながら、特殊な表面・エッジ状態を示す新しい物質相である。トポロジカル絶縁体の表面では線形分散を持つ特別な電子状態(ディラック/ワイル電子系)が実現し、そこでは特殊な輸送現象などが見られる。例えば表面・エッジ状態はたとえ不純物があったとしても(必要な対称性を破らなければ)後方散乱を受けない完全伝導性を示すことが期待される。このような、乱れの下での安定性がトポロジカル量子現象の一番の特徴であると言える。

(2) 乱れの存在下でのトポロジカル現象：一般に、トポロジカル絶縁体はチャーン数などのトポロジカル数(波動関数のブリルアンゾーン内でのトポロジーを特徴付ける量)が自明でない、といった特徴によって規定される。ところが、ひとたび乱れが入ると並進対称性が破れるために波数が良い量子数でなくなり、こういった波数空間内で考えるシンプルな理解が通用しなくなってしまふ。そのため、数値シミュレーションに基づいた、乱れの存在下でトポロジカル量子系が示す現象の性質の解明が問題となっている。

2. 研究の目的

(1) 乱れあるトポロジカル相の性質の解明：トポロジカル秩序を持つ系におけるアンダーソン局在の効果、すなわち臨界特性・輸送特性を、主に数値計算の側面から明らかにする。たとえば3次元系においては複数種類のトポロジカル相が存在するため、乱れを導入することでそれらトポロジカル相から多種多様なトポロジカル相転移が見られるが、それらの転移点付近における普遍的な振る舞いを調べることで、トポロジカル相の理解を深める。

(2) 数値計算手法の開発と改良：これまでの研究で我々が提案した数値計算手法を改良し、さらに高精度に、さらに多様な系に適用できるようにプログラム開発を行う。これを用いて、対称性の異なる様々なトポロジカル系の振る舞いを系統的に調べる事を可能にする。

3. 研究の方法

(1) 本研究では主に、強束縛模型に基づく実空間の有限格子系を扱う。乱れとしては、格子点ごとにランダムなポテンシャルを導入する。その強さおよび系のサイズを変化させ、輸送特性もしくは輸送特性を指標とする臨界現象を調べる。数値計算技法としては、例えば電極の効果の詳細に取り入れるよう改良した再帰グリーン関数法や、チェビシェフ展開を用いた波束の時間発展法などを使用する。

(2) 前述の数値シミュレーションのみならず、乱れの無い系における解析的な表式の導出や、第一原理計算アルゴリズムなど、様々な理論的手法を相補的に用いて研究を進める。

4. 研究成果

(1) 乱れた強磁性カゴメ格子系における量子異常ホール効果および磁壁磁気抵抗効果の乱れに対する頑強性を明らかにした。強磁性カゴメ格子系においては、磁化の向きを制御することで量子異常ホール相から拡散伝導相へと相転移すること、すなわち伝導状態を制御できる事を示した。この特性を応用し、磁壁構造を作ることによって乱れに対し安定な巨大な磁気抵抗効果が起きることを提案した。強磁性カゴメ格子系は $\text{Fe}_3\text{Sn}, \text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ などが発見されており、この成果は、乱れのあるトポロジカル量子系が理論的興味の対象にとどまらず、スピントロニクス・デバイスへの応用にも重要な候補物質であることを示すものである。

(2) 乱れたディラック/ワイル半金属における弾道的輸送現象を発見し、その速度からスケールリング理論に基づいて臨界指数を見積もる方法を示した。これまでのディラック/ワイル半金属の臨界現象の先行研究は、ほとんどがディラック点(厳密に $E=0$)における電子状態密度の数学的特性に注目したものであるが、本研究の特徴は電子波束の運動という輸送現象に注目した点、さらにその特徴をシミュレーションにより可視化したことである。これは乱れのあるディラック/ワイル半金属の性質について明確で直観的な理解を与えるだけでなく、実験的観測も可能であると期待される。さらに弾道的伝導の速度の消失をスケールリング理論の式を用いて解析することで、相転移点、及び臨界指数を評価することにも成功した。これは金属-半金属転移の性質の解明に近づくのみならず、現実の物質としてのディラック/ワイル半金属の特性の理解にも繋がる成果である。

(3) トポロジカルディラック半金属における強磁性電極誘起ホール効果を理論的に提案し、数値計算によりその性質を明らかにした。強磁性電極誘起ホール効果は、トポロジカルディラック半金属に強磁性体の電極を接続し、その磁化を制御することで現れるホール効果である。通常の物質では、この効果は試料そのものに外部磁場もしくは磁化を与える方法に比べ微弱な効果となるが、トポロジカルディラック半金属ではこれが顕著に表れ、特にハーフメタル電極を用いると 100%近い理想的なホール角（印加電圧と出力ホール電圧の比）が得られることを発見した。特に、向かい合う電極の磁化を平行／反平行にすることでホール効果を ON / OFF できることから、スピントロニクスデバイスへの応用も期待される。本結果は理想的なトポロジカルディラック半金属のモデルだけでなく、第一原理計算から見積もられた物質パラメータを用いた有効モデルや、2次元量子スピンホール系においても同様に大きなホール角が得られる。これは強磁性電極誘起ホール効果が、ヘリカル表面状態を持つ系において普遍的に見られることを示唆している。

(4) ディラック／ワイル半金属薄膜に磁場を印加した際のランダウ準位形成を研究した。特に、薄膜の積層方向と磁場の印加方向を任意に変えた際のエネルギー準位を表す近似的表式を導出した。これはいわゆるワイル軌道と呼ばれて最近活発に議論されている問題に関して重要な示唆を与えるものである。

(5) ワイル半金属における異常ホール伝導度と縦伝導度の関係を解明した。詳細な数値シミュレーションにより内因性ホール効果と外因性ホール効果の寄与を分離し、それらのシステムサイズ依存性を調べることでワイル点近傍における内因性異常ホール伝導度の増大が見られることを示した。特に、有限エネルギー領域におけるホール伝導度の増大の普遍的性質が示唆されたことは、ワイル半金属の臨界現象を解き明かす際の重要な手がかりとなる。

(6) CPA と呼ばれる近似計算手法をワニエ関数に基づく第一原理計算アルゴリズムに組み込むことで、ランダム合金の第一原理計算を大幅に効率化するアルゴリズムを開発した。このアルゴリズムを用いて、合金における従来の第一原理計算の結果が、非常に効率的に再現できることを示した。このアルゴリズムを応用することで、多元合金からなるトポロジカル物質の組成乱れによる相転移を第一原理計算により調べることも可能になる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Kobayashi Koji, Nomura Kentaro	4. 巻 3
2. 論文標題 Ferromagnetic-electrodes-induced Hall effect in topological Dirac semimetals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 033023(1-11)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.3.033023	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Nguyen D.-H.-Minh, Kobayashi Koji, Wichmann Jan-Erik R., Nomura Kentaro	4. 巻 104
2. 論文標題 Quantum Hall effect induced by chiral Landau levels in topological semimetal films	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 045302(1-12)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.104.045302	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 Kobayashi Koji, Nomura Kentaro	4. 巻 91
2. 論文標題 Intrinsic and Extrinsic Anomalous Hall Effects in Disordered Magnetic Weyl Semimetal	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 013703(1-5)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.91.013703	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Ito Naohiro, Nomoto Takuya, Kobayashi Koji, Mankovsky Sergiy, Nomura Kentaro, Arita Ryotaro, Ebert Hubert, Koretsune Takashi	4. 巻 105
2. 論文標題 Wannier-based implementation of the coherent potential approximation with applications to Fe-based transition metal alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 125136(1-10)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.105.125136	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 該当する

1. 著者名 Kobayashi Koji, Wada Miku, Ohtsuki Toni	4. 巻 2
2. 論文標題 Ballistic transport in disordered Dirac and Weyl semimetals	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 022061(R) 1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevresearch.2.022061	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kobayashi Koji, Takagaki Masaki, Nomura Kentaro	4. 巻 100
2. 論文標題 Robust magnetotransport in disordered ferromagnetic kagome layers with quantum anomalous Hall effect	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 161301(R) 1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.161301	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13件(うち招待講演 0件/うち国際学会 5件)

1. 発表者名 小林浩二, 野村健太郎
2. 発表標題 ワイル半金属における内因性ホール効果と縦伝導度(Intrinsic Hall conductance and longitudinal conductance in Weyl semimetals)
3. 学会等名 第140回金属材料研究所講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小林浩二, 野村健太郎
2. 発表標題 トポロジカルディラック半金属を用いた連続的抵抗制御: トポロジカルディラックメモリスタ(Continuous control of resistance with topological Dirac semimetals: topological Dirac memristor)
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Kobayashi, K. Nomura
2. 発表標題 Relation Between Hall and Longitudinal Conductances in Disordered Magnetic Weyl Semimetal Thin Films
3. 学会等名 EP2DS-24/MSS-20 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 伊東直洋, 野本拓也, 小林浩二, Sergiy Mankovsky, 野村健太郎, 有田亮太郎, F, Hubert Ebert, 是常隆
2. 発表標題 Wannier関数を用いたCPA計算の実装
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Koji Kobayashi, Miku Wada, Tomi Ohtsuki
2. 発表標題 Critical behavior of ballistic transport in disordered Dirac and Weyl semimetals
3. 学会等名 Localisation 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小林浩二、野村健太郎
2. 発表標題 強磁性電極を接続したトポロジカルディラック半金属のホール磁気抵抗効果
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小林浩二、野村健太郎
2. 発表標題 トポロジカルディラック半金属における強磁性電極誘起ホール磁気抵抗効果
3. 学会等名 第139回金属材料研究所講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小林浩二、野村健太郎
2. 発表標題 ワイル半金属における内因性・外因性ホール効果と縦伝導度
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Kobayashi, M. Wada, T. Ohtsuki
2. 発表標題 Ballistic feature in disordered Dirac and Weyl semimetals
3. 学会等名 APS March Meeting 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小林浩二、野村健太郎
2. 発表標題 ワイル半金属中のランダムな磁区による磁気抵抗効果
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Kobayashi, M. Takagaki, K. Nomura
2. 発表標題 Robust magnetotransport in disordered quantum anomalous Hall Kagome layers
3. 学会等名 Summit of Materials Science 2019: SMS2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Kobayashi, M. Takagaki, K. Nomura
2. 発表標題 Robust magnetoresistance in disordered quantum anomalous Hall Kagome layers
3. 学会等名 International Conference on Topological Materials Science 2019 (TopoMat 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小林浩二、野村健太郎
2. 発表標題 強磁性電極によるトポロジカルディラック半金属中の量子異常ホール効果
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020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
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
ドイツ	ミュンヘン大学			