

令和 2 年 7 月 13 日現在

機関番号：82108

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K14358

研究課題名(和文) 特異なバンド構造とその操作による新奇物性

研究課題名(英文) Novel physics by manipulating singular band structures

研究代表者

苅宿 俊風 (KARIYADO, Toshikaze)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・主任研究員

研究者番号：60711281

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：特異な性質を持つ物質群(ディラック・ワイル半金属やトポロジカル絶縁体)について、微細構造の作り込みによって電子を制御する方法の理論的研究を行った。結果、原子間距離より緩やかに変化する構造が電子にとって実効的に磁場として感じられる現象の理解を深める、グラフェン(炭素原子一層からなる2次元物質)にナノサイズの穴を周期的に導入することで不純物散乱に強い電気伝導チャンネル(トポロジカル境界状態)を実現する方法の提案、といった成果を得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ディラック・ワイル半金属やトポロジカル絶縁体は通常の金属・半導体とは異なる性質を持ち、その特異性を活かした新しい機能の開発が期待されている。本研究課題で遂行したこうした物質群での電子状態制御の研究は、新しい物質の理解を深めると同時に特異性による新規機能開発の足がかりとなるものである。また、グラフェンに関しては穴の導入を含め試料の加工・合成の実験技術が日々進歩している中、トポロジカル境界状態という側面に光を当てたことは今後の理論・実験の発展につながるものである。

研究成果の概要(英文)：This is a theoretical study on manipulating electrons by introducing nanostructures in singular materials, such as Dirac/Weyl semimetals and topological insulators. The study covers elaboration of basic understanding of a phenomenon where smooth (in interatomic distance) change in material properties acts as an effective magnetic field for electron, and a proposal for realizing topological interface states, which form an electronic conducting channel robust against scattering, by introducing nanoscale holes on a 2D carbon sheet, graphene.

研究分野：物性理論

キーワード：ディラック半金属 トポロジカル絶縁体 グラフェン 超構造

1. 研究開始当初の背景

研究開始当初の時点を含めこのところバンド構造の特異点及びその周辺の線形分散で特徴づけられるディラック・ワイル半金属と呼ばれる物質群の研究が理論・実験両面から進められている。とりわけ Cd_3As_2 といった代表的な物質で線形分散が実験的に確認されて以降盛んな研究がなされるようになってきている。ディラック・ワイル半金属の興味深い点としては線形分散の存在から電子の低エネルギーの物性現象が相対論的なディラック方程式に支配されること、バンド構造の特異点とトポロジが関連することなどが挙げられる。こうした特徴は新奇の物性現象発見や通常の金属・半導体にはない新たな機能の獲得を期待させるものであった。

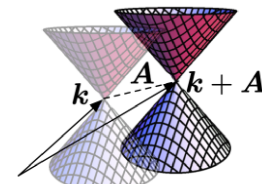
一方波数空間の特異点由来の現象を捉えるには何らかの実空間構造を導入することで結晶の並進対称性を破り波数を良い量子数でなくすことがひとつの方針となり得る。実際ディラック・ワイル半金属においてその表面に特徴的な状態が現れることが知られていた。こうしたことからディラック・ワイル半金属における実空間構造のもたらす効果をより広範に明らかにすることが重要であると考えた。

2. 研究の目的

実際にディラック・ワイル半金属における実空間構造のもたらす効果を研究するにあたって、物質パラメータが格子定数に比べて遥かに長いスケールで緩やかに変調する長波長構造、格子定数に近いスケールの微細構造、と大きく分けて二種類の実空間構造の与え方を考える。

(1) 長波長構造

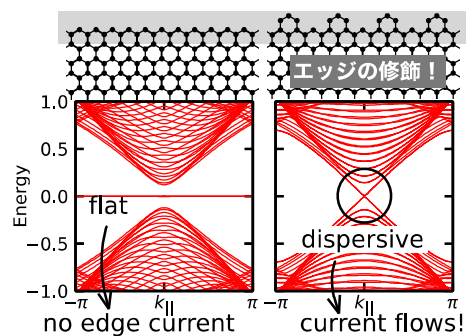
長波長構造を与える一例としては格子歪みによって格子定数(及び格子構造)が緩やかに変わるといったことがある。こうした長波長構造は基本的に波数空間の特異点を保ったまま波数空間内での位置をずらす効果を生む。特異点をずらす効果は有効模型の範囲内ではゲージ場の形で電子と結合することが知られており(右図)、そのゲージ場により外部磁場なしでも磁場と同等の効果をもたらす(擬磁場)ことも知られている。本研究課題では、それを発展させ擬磁場による電子状態の制御や操作を特にバレー自由度に注目して探求することをひとつの目的に据えた。



特異点の移動と「ゲージ場」

(2) 微細構造

微細構造に関して研究代表者は本研究課題を開始する以前から、ハニカム格子を持つトポロジカル系のエッジ状態についてエッジの形状がその振る舞いに大きく影響する場合(右図: エッジ形状でエッジ状態の分散関係が大きく異なる)について調べ研究を進めていた。このケーススタディは形状によるエッジ状態の操作・スイッチングの可能性を示唆しており、その探究を本研究課題の目的のひとつとした。またそうしたエッジ形状とエッジ状態の関係を明らかにするためトポロジカル指数などを用いた解析と理論体系の構築も目指すこととした。



3. 研究の方法

(1) 長波長構造

長波長構造を扱うにあたってはそのそもそもの性質から連続体有効模型(今回の場合はディラック方程式)との相性が良い。よってまずはディラック方程式に基づく解析を進め、例えば擬磁場由来のランダウ準位の形成等について理解を深め新たな知見を得ることを目指す。これは有効模型に基づく解析であることもあり一般論を指向したものである。

同時に以上と相補的な観点を与え具体的な各個の物質研究と結び付けるため、線形分散を持つことが知られている Ca_3PbO を代表とするアンチペロプスカイト型の物質群における擬磁場の生成の研究も行う。ここでは第一原理計算も援用しながら実際の物質と深く結びついた研究方法をとる。

(2) 微細構造

現在の実験的な加工技術の発展や限界も考慮し、まずはグラフェンを中心とした2次元物質についてエッジを含む系の電子状態の解析を進める。微細構造を扱うため、連続体模型ではなく各原子とその上の電子軌道を取り込める強束縛模型による解析が主となる。必要に応じ強束縛

模型のパラメータを第一原理計算から求めることも行う。

また加工技術の限界にとらわれずエッジ状態制御の理論を探求するという観点で、より人工的な制御の自由度の大きいメタマテリアルも適宜研究対象に含める。これによりメタマテリアル上での電磁波や振動モードの表面伝導の制御法を探る。

4. 研究成果

長波長構造関連のトピックについては概ね計画通り研究を進め、擬磁場によるランダウ準位の個数公式の導出及びアンチペロブスカイト系での可能な擬磁場の見積もりを成果として公表した[T. Kariyado, J. Phys. Soc. Jpn. **88**, 083701 (2019)]。一方微細構造関連のトピックについては、グラフェンと微細構造の研究を進める中でグラフェンナノメッシュにおけるトポロジカル状態の実現へと研究内容を展開しその結果を論文として公表した[T. Kariyado *et al.*, Phys. Rev. B **98**, 195416 (2018)]。

また研究期間の中途に角度非整合二層グラフェンにおける超伝導が報告され、実空間構造を与える方法として非整合積層が喫緊の課題として浮上した。これを受け角度非整合二層系における電子状態制御の理論構築に取り組んだ[T. Kariyado and A. Vishwanath, Phys. Rev. Research **1**, 033076 (2019)]。

(1) 擬磁場によるランダウ準位の個数公式

擬磁場の生成に本質的な役割を果たす波数空間での特異点の移動距離とその実空間での変調の長さスケールのパラメータ化を工夫することにより、擬磁場によって生じる(観測可能な)ランダウ準位の個数を同定する簡潔な公式の導出に成功した。公式が非常に簡潔であるため適用が容易であると同時に擬磁場の生成に関する知見を深めることにも貢献している。

また公式の有用性を示すため擬磁場生成の最小要件を満たすような簡単なモデルを提案し数値計算による公式の確認を行っているが、制御自由度の高いメタマテリアル等ではその簡単なモデルをそのまま実現することも可能と考えられ、今後への発展という意味でも意義深い提案をすることができた。

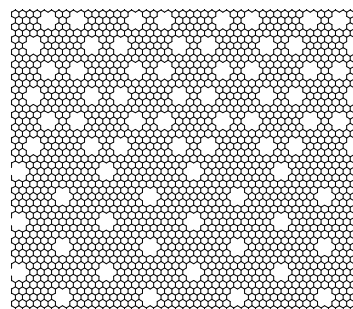
(2) アンチペロブスカイト系における擬磁場

前段の個数公式の研究は物質中で実現可能な擬磁場の強度と波数空間での特異点のずれとの間の定量的な関係を明確にするものである。これを踏まえ一例としてフェルミ面近傍に線形分散を持つことが予言されているアンチペロブスカイト Ca_3SnO と Sr_3SnO の中間的な化合物 $\text{Ca}_{3(1-x)}\text{Sr}_{3x}\text{SnO}$ を取り上げ、波数空間での特異点の位置の x に対する依存性を調べた。具体的には Ca_3SnO の単位胞を拡張し部分的な Sr 置換を行った仮想的な系に対し第一原理計算によって特異点の位置を求めた。これは個数公式の有用性を示すための試験的な意味を持つと同時に、これまで擬磁場の研究によく用いられていた状況が 2次元のグラフェンに歪みを加えたものであるのに対し、3次元のバルク物質でかつ化学組成の勾配を用いているという点が今後も発展も含め意義深い。またより広い意味で該当のアンチペロブスカイト系が興味深い物質であることを示す好例にもなっている。

今後は上記を利用した物質の機能開発等への発展が望まれる。

(3) グラフェンナノメッシュ

グラフェンに周期的に穴を導入した系、いわゆるグラフェンナノメッシュにおける電子状態制御の研究を行った。主たる成果は穴の配列の工夫によりトポロジカルに非自明な相を実現できることを示した点である。具体的には穴を三角格子的に配列した場合と八ニカム格子的に配列した場合とでトポロジカルな性質が異なる。このため前者の領域と後者の領域を隣接させる(右図)とその界面に特徴的な境界状態が形成されることが予想されこれは数値計算によっても支持された。電子状態の穴の形状や間隔への依存性も調べ、グラフェンナノメッシュにおいてトポロジカル状態が出現するための条件についても明らかにした。

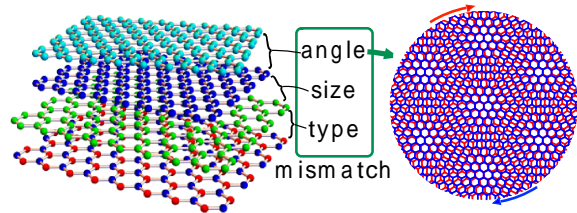


グラフェンへの穴の導入で線形分散にギャップを生じさせることができるという点は以前から知られていたが、そのギャップがトポロジカルに非自明かどうかを明らかにしたことが本研究独自性であり画期的な点である。また、グラフェンにギャップを生じさせること自体が2次元物質によるデバイス開発には重要であるため、実験的にグラフェンナノメッシュを生成する技術の開発はホットトピックであり続けているが、今回さらにトポロジーという観点を加えることができたことは実験研究をさらに刺激するという意義も持つ。

今後は境界状態を利用したデバイスの提案や、実験からのフィードバックを受けての理論デザイン改善といった方向に進展することが望まれる。

(4) 角度非整合二層系

格子定数の異なる2種類の2次元物質や角度をずらした同種の2次元物質を積層させると全体の結晶構造にモアレパターンと呼ばれる超構造が現れる(右図)。こうした超構造は電子の感じるポテンシャルに影響するため、これを用いた電子状態制御への可能性が広がる。モアレパターンによる電子状態制御は特に最近角度非整合二層グラフェンにおける超伝導が報告されて以降盛んになっている。そこでは実際モアレパターンが平坦バンドを生じさせそれが炭素物質における超伝導という特異な現象の鍵になっていると考えられている。



本課題の当初の研究計画には含まれていなかったものの、超構造による電子状態制御という結びつきから角度非整合二層系の研究に取り組んだ。結果として一般的な角度非整合二層系において電子の感じるポテンシャルに対する対称性による制約に関する理論を構築することができた。制約を知ることは角度非整合二層系の電子状態を理解、また予言する際に非常に有用となる。

今後は一般論によって得られた知見を活かしての物質探索・デバイス開発へと発展することが期待される。

(5) その他

以上の主要な研究成果に加え、量子スピン系の研究を行い相関のある系のパラメータ空間の特異点とディラック・ワイル半金属の波数空間の特異点との関連性の研究[T. Kariyado *et al.*, Phys. Rev. Lett. **120**, 247202 (2018)], ハニカム格子に超構造を与えて生じるトポロジカル相における点欠陥に関する研究等で成果をあげた[T. Kariyado and R.-J. Slager, Phys. Rev. Research **1**, 032027(R) (2019)]。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Toshikaze Kariyado, Robert-Jan Slager	4. 巻 1
2. 論文標題 -fluxes, semimetals, and flat bands in artificial materials	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 032027-1-6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.1.032027	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 該当する
1. 著者名 Toshikaze Kariyado, Ashvin Vishwanath	4. 巻 1
2. 論文標題 Flat band in twisted bilayer Bravais lattices	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 033076-1-11
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.1.033076	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 該当する
1. 著者名 Toshikaze Kariyado	4. 巻 88
2. 論文標題 Counting Pseudo Landau Levels in Spatially Modulated Dirac Systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 083701-1-4
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.88.083701	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 Toshikaze Kariyado, Takahiro Morimoto, Yasuhiro Hatsugai	4. 巻 120
2. 論文標題 ZN Berry Phases in Symmetry Protected Topological Phases	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 247202 1-5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevLett.120.247202	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 Toshikaze Kariyado, Yong-Cheng Jiang, Hongxin Yang, Xiao Hu	4. 巻 98
2. 論文標題 Counterpropagating topological interface states in graphene patchwork structures with regular arrays of nanoholes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 195416 1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.195416	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 Yuta Takahashi, Toshikaze Kariyado, Yasuhiro Hatsugai	4. 巻 99
2. 論文標題 Weyl points of mechanical diamond	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 024102 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.024102	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 Toshikaze Kariyado, and Xiao Hu	4. 巻 7
2. 論文標題 Topological States Characterized by Mirror Winding Numbers in Graphene with Bond Modulation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 16515 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-017-16334-0	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 Koji Kudo, Toshikaze Kariyado, and Yasuhiro Hatsugai	4. 巻 86
2. 論文標題 Many-Body Chern Numbers of $\nu=1/3$ and $1/2$ States on Various Lattices	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 103701 1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.86.103701	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 Toshikaze Kariyado, and Masao Ogata	4. 巻 1
2. 論文標題 Evolution of Band Topology by Competing Band Overlap and Spin-Orbit Coupling: Twin Dirac Cones in Ba ₃ SnO as a Prototype	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 061201 1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.1.061201	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11件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 Toshikaze Kariyado
2. 発表標題 Flat band and strong correlation in slightly twisted bilayers of generic type
3. 学会等名 Trends in Theory of Correlated Materials (TTCM2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 苅宿俊風, Ashvin Vishwanath
2. 発表標題 一般の角度非整合二層系における平坦バンド
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Toshikaze Kariyado
2. 発表標題 Band engineering in a Diarc material A ₃ EO (A=Ca/Sr/Ba, E=Sn/Pb) antiperovskite family
3. 学会等名 Symmetry and Topology in Condensed-Matter Physics (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Toshikaze Kariyado
2. 発表標題 Counting formula for the pseudo Landau levels visible in an energy spectrum
3. 学会等名 American Physical Society March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Toshikaze Kariyado, Takahiro Morimoto, and Yasuhiro Hatsugai
2. 発表標題 Z _N Berry Phase and Symmetry Protected Topological Phase in Spin Chain
3. 学会等名 International Conference on Topological Materials Science 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Toshikaze Kariyado, Takahiro Morimoto, and Yasuhiro Hatsugai
2. 発表標題 Z _N Berry phase as an index for symmetry protected topological phases: Application to one-dimensional models with SU(N) symmetry
3. 学会等名 Trends in Theory of Correlated Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 菊宿俊風
2. 発表標題 ディラック系における擬磁場とランダウ準位
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Toshikaze Kariyado
2. 発表標題 Estimation of Pseudo Magnetic Field for Isotropic/Anisotropic Dirac Cones
3. 学会等名 Novel Quantum State in Condensed Matter 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Toshikaze Kariyado
2. 発表標題 Topological States in Nano Punctured Graphene
3. 学会等名 International workshop "Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Toshikaze Kariyado, Yongcheng Jiang, Xiao Hu
2. 発表標題 Counterpropagating Topological Interface States in Nano Punctured Graphene
3. 学会等名 American Physical Society March Meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 蒯宿俊風, Yongcheng Jiang, 胡曉
2. 発表標題 グラフェンナノメッシュにおけるトポロジカル現象
3. 学会等名 日本物理学会年次大会
4. 発表年 2018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
--	---------------------------	-----------------------	----