

令和 5 年 6 月 16 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2018～2022

課題番号：18H03678

研究課題名(和文)トポロジカル物質科学の開拓

研究課題名(英文)Frontiers in topological material science

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) 22,900,000円

研究成果の概要(和文)：トポロジカル結晶絶縁体の特異な結晶形状の理論、原子絶縁体のコーナー電荷の量子化の一般論、3次元系でのノダルラインのモース理論による解析など、トポロジカル相の基礎理論を構築した。さらに多様なトポロジカル相の新舞台として、電子化物(エレクトライド)を提案した。また非エルミート系を記述するブロッホ理論の一般的定式化を初めて行った。また電流が磁化を誘起する現象をカイラルなトポロジカル絶縁体で理論的に提案し、候補物質提案を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

今回構築したトポロジカル相の基礎理論は、それぞれ広い範囲の系に適用できる汎用的なものである。特に非エルミート系でのブロッホ理論は、非エルミート系の基礎定理として認知されるようになり、非エルミート系の理論的理解を格段に進展させた。また電子化物などトポロジカル材料の提案は、今後実験への波及効果が期待できる。さらにトポロジカル相の結晶形状の研究は、結晶形状という観点をトポロジカル相に導入した初めての研究であり、今後研究の深化が期待できる。このように本研究によって電子系でのトポロジカル材料を広げ、その物性に関する理解が深まったと同時に、メタマテリアルなどへの応用も広がったといえる。

研究成果の概要(英文)：We constructed fundamental theories of topological phases, such as the theory of crystal shapes of topological crystalline insulators, the theory of quantize corner charges of atomic insulators, and Morse-theory analysis of nodal lines in three dimensions. Furthermore, we proposed the electrifieds as a new stage of various topological phases. In addition, we proposed the phenomenon of current-induced magnetization in chiral topological insulators, and we proposed some candidate materials for this phenomenon.

研究分野：物性理論

キーワード：物性理論 トポロジカル絶縁体 トポロジカル半金属 第一原理計算 スピントロニクス 表面状態

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

トポロジカル絶縁体は、バルクでは非磁性絶縁体でありながら、エッジ状態や表面状態がフェルミエネルギー上にあってスピン流を運ぶ新しいトポロジカルな相である。さらにトポロジカル絶縁体の研究から派生して、3次元のバルクのバンド構造において、(高対称点でない)一般の波数の点でギャップが閉じるようなトポロジカル半金属の研究も盛んに行われるようになってきた。そうしたトポロジカル絶縁体・半金属の研究が世界的に精力的に進められた結果、数学的理解はかなり進んで来ており、トポロジカル相の分類理論はかなりの部分が完成しているといってもよい。

本研究代表者はトポロジカル相の研究に2005年頃より携わっており、数々の論文を発表しているが、当初より物質での実現に重点をおいて研究してきた。例えば2006年には2原子層ビスマス薄膜がトポロジカル絶縁体となることを理論的に見出した。この論文は $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ での3次元トポロジカル絶縁体の実験による観測への契機ともなった。さらにトポロジカル半金属の代表例であるワイル半金属の提案とその性質も(「ワイル半金属」と命名される前より)世界に先駆けて出している。最近では、例えばカルシウムが高圧下でノーダルライン半金属となり、それが強誘電体同様の分極表面電荷を生み出し、それがバルクキャリアで遮蔽されることを理論的に見いだした。また単体テルルはらせん状の鎖からなる特異な結晶構造で、その低い結晶対称性により、高圧下でワイル半金属になることを見いだした。またテルルのようならせん状の結晶では、電流により軌道磁化が電流と平行ないし反平行に誘起されるという、ソレノイドと類似の現象が見られる事を理論的に見いだした。

トポロジカル相の研究の現状を見ると、近年、特に理論分野でめざましい発展があり、トポロジカルナンバードのようにより定義され、それがどのような表面状態や新奇現象をもたらすかの一般論が構築されてきている。しかし物質科学という点で見ればまだ入り口にすぎない。例えば種々のトポロジカルな絶縁相となるにはバンド反転という、価電子バンドと伝導バンドが混成してその性質の乗り換えが起こることが必須であるが、そのような物質をどのように設計するかは、未だに試行錯誤に頼っている。それらを踏まえた、本研究課題の核心となる学問的問いは、トポロジカル相を実際の物質でどのように実現するか、ということである。我々が見いだしたように、意外にもありふれた物質(Bi, Te, Ca など)に関しても実はトポロジエの効果が重要な役割を果たすことがよくあるが、どのような物質でトポロジカル相が実現するかは未知の部分が多いため、このような学問的問いに答えることが重要な課題となっている。

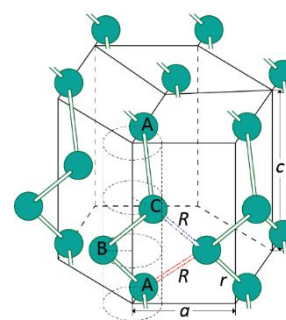


図1：テルルの結晶構造

2. 研究の目的

トポロジカル相についての研究はこの10年間でめざましい発展を遂げ、数学的基礎付けはかなり整備されてきたが、実際の物質に関する議論は体系だて進められておらず、全体像が見えていない。本研究ではトポロジカル相の理論と、物質科学との2つの研究が緊密に連携することによって、トポロジカル物質科学という新分野を開拓することを目的としている。具体的には(A)トポロジカル相を示す物質探索、(B)トポロジカル相および関連物質の新物性、(C)電子系以外のトポロジカル相への展開、の3項目を柱として研究を進める。これにより、従来の物質科学にトポロジエという新たな視点を取り入れた理論体系を作り、さらにトポロジカル相の物質提案や、実現された特異なバンド構造を利用した新奇現象の予言を、物質に即した形で体系的に行う。これにより、ありふれた物質群にさえも、トポロジカル相の物理から新たな知見をもたらすことができる。

3. 研究の方法

本研究では、(i)理論からのアプローチ、(ii)物質科学(第一原理計算・実験)からのアプローチという両面から、研究の方向性を見極めつつ研究を進行させる。(i)では例えば近年確立されてきたトポロジカルバンドの分類理論や、場の理論を用いた計算手法などの理論的な枠組みを参考にしつつ、トポロジカル物質の探索や新物性予言を行い、物質科学を創出していき、というのが大きな流れである。このようなアプローチは演繹的なアプローチであり、一般論を打ち立ててそれを個別の物質へ適用するものである。一方では、第一原理計算や実験の結果から帰納的に一般的な法則や規則性を見いだすことも有効であり、これが(ii)である。(ii)については、第一原理計算の立場からみて新しいトポロジカル相の知見を予想し、それを理論の立場から補強していくというアプローチも行う。第一原理計算では膨大な研究成果や知見の蓄積

があり、実はその中にトポロジカル物質相に関する知見が隠れていることが少なくない。そのため物性理論の研究と密に連携することで、新しい観点からトポロジカル物質相の新物質、新物性を探る。こうした両面からのアプローチを自在に行うため、研究分担者として平山元昭氏が参画し、代表者の村上は(i)、分担者の平山は(ii)を主な得意分野としつつも、互いに緊密な連絡を取ることで有機的に新分野開拓を目指す。

4. 研究成果

(1) トポロジカル物質の新舞台として、電子化物(エレクトライド)を提案した。電子化物では電子がアニオンとして構造を安定化しており、仕事関数が小さいため触媒等への応用が期待されている。この小さな仕事関数に着目し、量子化分極を持つトポロジカル絶縁相 Sc_2C 、ノーダルライン半金属 Y_2C 、 Sr_2Bi 、量子スピンホール絶縁体 HfBr 、異常ホール絶縁体 LaBr を発見した。 Sc_2C 表面金属状態は空隙起源のため、 Sc_2C 表面の上に宙に浮かんでいる。この電子雲は小さな仕事関数を持つため、 Sc_2C を基板として用いることで、表面に載せた物質に対して高密度の電子ドーピングを行うことが可能になる。例えば MoS_2 に対しては $\text{Mo}1$ サイトあたり 1 電子のドーピングが可能となる。これは従来の電界効果トランジスタの約 100 倍ものドーピング性能 ($1.05 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) である。

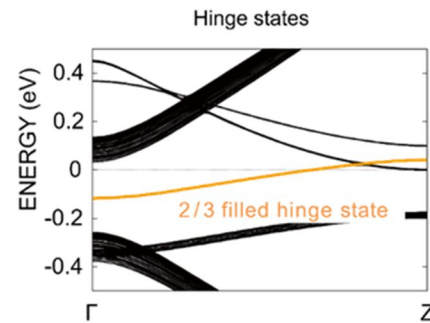


図 2: エレクトライドでの ヒンジ状態の量子化充填率。

さらに量子化されたヒンジ電荷を持つ高次トポロジカル絶縁相の候補物質として、アパタイト電子化物を提案した。アパタイト電子化物では、バルクと表面が絶縁性を示し、ヒンジ領域のみ量子化された電荷を持つ金属性を示すことを第一原理計算によって実証した。すなわち六角柱状の結晶を仮定すると、その六角柱のヒンジが 2/3 充填された金属状態となり (図 2) さらにこの充填率の量子化が、回転対称性に起因した高次トポロジカル結晶絶縁相に起因することを示した。またアパタイト電子化物の分類を行い、代表的な Dirac 半金属である Na_3Bi が価電子バンド最下部に空隙電子のバンドを持つ電子化物であることを見出した。

(2) 非エルミート系のブロッホ理論の定式化を行った。エルミート系においては固体物理学の教科書にあるブロッホ理論がよく知られており、これにより開放境界条件下での大きな系でのスペクトルが計算できるが、非エルミート系ではそうした理論が知られていなかった。そのため、非エルミート系でのバンド構造のブロッホ理論を 1 次元系で構築した。この理論では、波数 k の定義域が一般化ブリュアン域 (図 3。ただし $\beta = e^{ik}$ としている) で与えられ、通常のエルミート系とは質的に異なる。この一般化ブリュアン域の一般的な構成法を本研究で与えた。さらに非エルミート系で破綻すると思われていたバルク境界対応が、一般化ブリュアン域を考えることで、1 次元でも成り立つようにできることを示した。

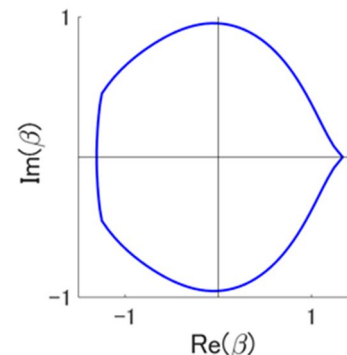


図 3: 一般化ブリュアン域

こうした非エルミート系のブロッホ理論に付随して現れる

異常な物性の提案を進めた。非エルミート表皮効果のスケーリング則の定式化、非ブロッホ理論のフォトニック結晶への展開などを行った。また特に Bogoliubov-de Gennes 型のボーズ粒子系では、エルミート性と非エルミート性が一つの系で共存していることを示した。また空間反転対称性のある系では、非エルミート表皮モードの侵入長が系の大きさに比例するという特異な振る舞いを示すことを示した。

我々の構築した非エルミート系でのブロッホ理論は非エルミート系の基礎定理となり、スペクトルの計算が格段に容易になるとともに、破れると思われていたバルク境界対応が示されるなど、非エルミート系の理論的理解が格段に進んだ。このような非エルミート系の枠組みは、特にメタマテリアルなどへの応用が広く期待され、実際すでにこのブロッホ理論はさまざまな理論・実験研究へと広く応用されている。

(4) BIC (bound states in continuum) と呼ばれる、バンド内に現れる束縛状態について理論研究を行った。2 次元系では通常、波数空間で点状にそうした状態が現れる。本研究ではこうした状態が線状に出る場合があることを理論的に示した。2 次元方向を向く擬スピンの自由度がある 3 次元系を考え、その上に、その系と巻き付き数が異なる 2 次元系を重ねた場合に、その巻き付き数の差により、表面の局在状態がバルクバンド内でも局在状態のまま残ることを示した。BIC はフォトニクス系などで盛んに研究されており、そうした分野への展開も期待できる。

(5) 表面弾性波について、電子系と同様のトポロジカル相を設計する方法の一つを提案した。物体表面に三角格子状の凹凸を設けた場合の表面弾性波を摂動論で求めた。さらに系を回転させたとき、コリオリ力で表面弾性波バンドにギャップが開き、量子ホール系と同様の相となり、

カイラルエッジモードがギャップ中に現れることを理論的に示した。こうした研究はトポロジカルメタマテリアルの分野への波及効果が期待できる。こうした分野の先行研究は主に数値シミュレーションに大きく頼っており、解析計算が少なく、どのような原理でトポロジカル相が実現できるのか理解できていない場合も多い。本研究成果のような解析計算は、トポロジカル相設計の指針を与えるものとして重要である。

(6) 磁気弾性波におけるベリー曲率の定式化とその性質の解明を行った。磁気弾性結合および双極子相互作用によってはベリー曲率が符号変化を起こすことを示した。またこうしたベリー曲率の符号変化が、波束の試料端での反射の際のシフト量に現れることを提案した。こうした双極子相互作用を用いたベリー曲率の物理は、長さスケールがミクロン程度まで大きくなるために、実験での実現や観測が（ナノスケールでの例と比べて）格段に容易であり、今後実験での観測が期待できる。

(7) 映進対称性に保護されたトポロジカル結晶絶縁体相の理論研究を行った。この相を特徴づけるトポロジカル不変量は一般に波数空間内での積分で表される複雑な式であるが、空間反転対称性を加えるとこれが対称性指標と呼ばれる単純な形の式で書けることを示した。さらにこれが、高次トポロジカル絶縁体を特徴づける Z_4 トポロジカル不変量と同一となることを示した。

(8) 空間反転対称性に守られた高次トポロジカル絶縁体の系において、cutting procedure の手法を用いて、 Z_4 トポロジカル不変量とヒンジ状態の出現との関係を一般に明らかにした。さらに、こうした相で結晶のどこにヒンジ状態が出るかを、全ての該当する点群について示した。特に $MnBi_2Te_4$ などの候補物質がある層状反強磁性体については、層の数が奇数か偶数かに依存して、ヒンジ状態の出方がどう変化するかを一般的に示した（図4）。こうした物質系は今でも盛んに研究されており、今後ヒンジ状態や電気磁気効果の観測など面白い実験が期待されていることから、本研究が今後この分野において注目されると期待される。

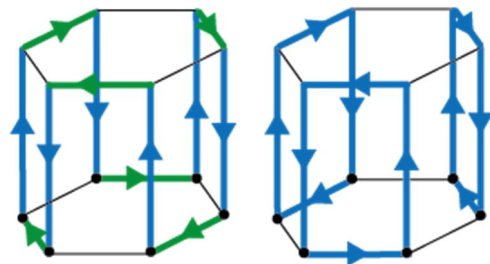


図4：空間反転対称性に守られた高次トポロジカル絶縁体のヒンジ状態。層状反強磁性体の奇数層（左）と偶数層（右）の場合を示す。

(9) 結晶の空間群対称性に守られたトポロジカル結晶絶縁体においては、表面の面方位によってギャップレス表面状態が現れるかが異なる。ギャップレス表面状態が現れると表面エネルギーが高くなるため、一般にそのような表面状態を持つ面方位の表面は、表面エネルギーが高くなり、結晶の平衡形状では相対的に出現しにくくなると予想される。これを確かめるために、映進対称性に守られたトポロジカル結晶絶縁体について考察した。こうした系に

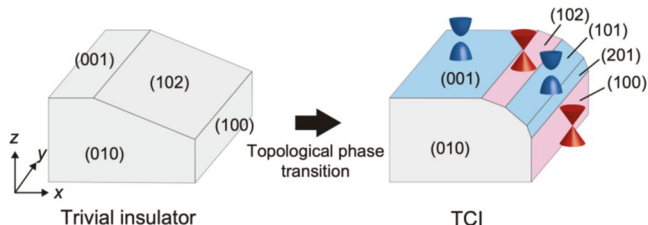


図5：映進対称性に守られたトポロジカル結晶絶縁体の形状（右図）。通常の絶縁体（左図）と形状が異なる。

においては、表面の面方位を示すミラー指数の偶奇によって、トポロジカル表面状態が現れるかが決まり、トポロジカル表面状態が現れると表面エネルギーが増加することを計算で示した。これを用いて、トポロジカル相は非トポロジカル相と比べて結晶形状が異なり、特異な形となることを示した（図5）。この成果は、トポロジカル相と結晶形状の関係に注目した初めての研究である。こうした観点によりトポロジカル相の物理に、結晶形状という視点が加わり、今後実験・理論両面でさまざまな方向へ展開できる。

(10) 2次元系で、絶縁体相から別の絶縁体相へとワイル半金属相をまたいで転移する際には、一般に電気分極がジャンプすることを示し、そのジャンプの大きさは、間に挟まるワイル半金属相でのワイル点同士の相対位置、すなわち「ワイル双極子」のみで書けることを示した。こうした普遍的な性質は、2次元の波数空間に外部パラメータを合わせた3次元空間でのワイル点を考えると、そのモノポールの強さが量子化されるというトポロジカルな性質からきている。この結果は物質の詳細によらない一般的・普遍的な成果であり、学術的な意義が大きい。

(11) 3次元系でのノーダルラインが、系の変化に伴ってトポロジー変化をする事象を、モース理論を用いて一般的に考察し、分類できることを示した。ここでのノーダルラインは、時間反転対称性および空間反転対称性に守られたスピンレス系で一般に出るものであり、ベリー位相が π に量子化されるものである。モース理論で導入される指数の値によって、ノーダルラインのトポロジー変化の事象は、生成、消滅、繋ぎ替えの3種に分類されることがわかり、これ以

外は一般に起こらないことを示した。さらに様々な点群対称性の下でどのようなトポロジ変化についても一般的に分類した。このようにモース理論は、トポロジカル半金属などトポロジカルな縮退現象の分類にも使うことができ、今後さまざまな応用の方向性がありうる。

(12) 系に電流を流すと磁化が生じる効果(kinetic magnetoelectric 効果)がトポロジカル絶縁体においても起こることを理論的に提案した。これは先行研究では金属において研究されてきたが、本研究においてトポロジカル絶縁体を考えると、表面の金属状態を流れる電流がらせん状に流れるために軌道磁化が生じることを理論的に示した。この場合、金属に比べて電流が描くループが大きいいため、通常の金属よりもより効果が大きく表れると期待できる。さらにこの効果を示すためにはトポロジカル絶縁体が空間反転対称性を破っている必要があることを示し、そのような候補物質選定・計算を行った。その結果、 $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ や CdGeAs_2 などの候補物質を得た。前者では表面フェルミ面を計算し、それによる本効果の大きさを見積もった結果、確かに予想通り、例えばテルルの場合と比べても数桁大きな効果となることを見出した。こうした結果は、電子の軌道運動を利用したスピントロニクス分野など、スピントロニクスの新しい展開を考えるための鍵となる。またトポロジカル絶縁体の物理としても、探索が困難な、対称性の低いトポロジカル絶縁体に関する先駆的な研究として重要である。

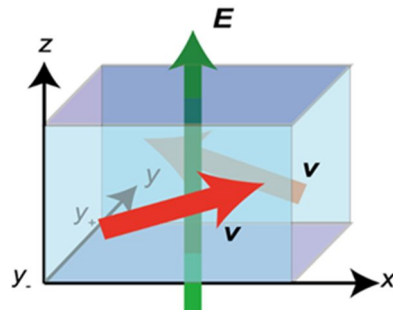


図 6: kinetic magnetoelectric effect の模式図

(13) カイラルフォノンと呼ばれるフォノンの回転自由度の基礎理論を構築した。特に $k=0$ でのゴールドストーンモードであるゼロ周波数のフォノンに対して時間反転対称性を破ってギャップを開くとき、その角運動量は系によらず普遍的な値をとることを示した。

また、らせん対称性を持つ系において、回転対称性を持つ系と同様に擬角運動量と呼ばれる量子数を各モードに対し定義できることを示し、テルルの場合に適用してその物理的な意義やそれによる光学選択則を示した。また、らせん対称性が厳密でなく近似的になり

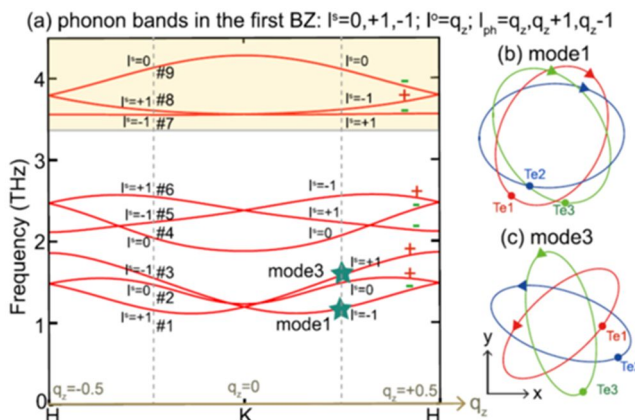


図 7: テルルでの(a) フォノンバンド構造と擬角運動量、(b)(c)角運動量を持つフォノン。

たつ場合のフォノン角運動量と光学選択則の議論を、物質の例も交えて行った。また実験グループと協力して、 $\alpha\text{-RuCl}_3$ でのフォノンモードに現れる特異性、 RbV_3Sb_5 などでの特異な電荷密度波、 BaPtGe のフォノンでの 4 重ワイル点の観測などの成果を、理論の立場からサポートした。

(14) 原子絶縁体 (obstructed atomic insulators) におけるコーナー電荷の量子化について、2 次元での一般的な定式化を行った。先行研究では特殊な系のみが扱われていたところを一般化し、どのような条件でコーナー電荷が分数に量子化するか一般的な条件を導出した。さらに 3 次元においては、代表的な多面体形状の結晶におけるコーナー電荷やヒンジ電荷密度の定式化を行った。コーナー電荷が量子化されるためには全ての頂点が対称性の下で等価にならなければならないことから、頂点推移的な多面体の形状を持つ結晶でなければならない。そこで図 8 のような結晶形状を考えた結果、考察した全ての場合についてフィリングアナロジーと呼ばれるトポロジカル不変量が、結晶形状によらずに、単位胞中央にある電荷の量で与えられることを示した。この数を頂点の個数で割ったものが分数コーナー電荷となる。さらにこれを、バンド構造の波数空間での高対称点での既約表現などで表す公式を得た。この結果は、原子絶縁体のトポロジカル不変量による網羅的な分類と、その物理的な意味を考える上で重要な結果となる。

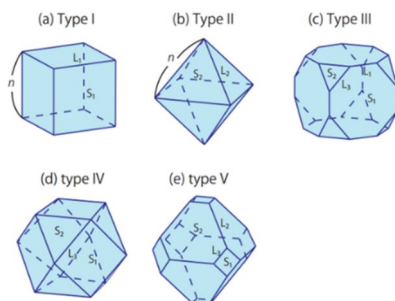


図 8: (a)-(e) 本研究で扱った結晶の形状

(15) 実験家と共同で、単元素固体である Te における Weyl 点の研究を行った。圧力下での量子振動の測定結果からトポロジカル相転移の様相を明らかにした。また、スピン分解光電子分光によって、Weyl 点の持つ特異なスピン構造を実験・第一原理計算の両面から確認した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計34件（うち査読付論文 34件／うち国際共著 10件／うちオープンアクセス 10件）

1. 著者名 Arai Nobuhiro, Murakami Shuichi	4. 巻 90
2. 論文標題 Anisotropic Penetration Depths of Corner States in a Higher-Order Topological Insulator	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 074711 ~ 074711
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.074711	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 Li Haoxiang, Zhang T. T., Yilmaz T., Pai Y. Y., Marvinney C. E., Said A., Yin Q. W., Gong C. S., Tu Z. J., Vescovo E., Nelson C. S., Moore R. G., Murakami S., Lei H. C., Lee H. N., Lawrie B. J., Miao H.	4. 巻 11
2. 論文標題 Observation of Unconventional Charge Density Wave without Acoustic Phonon Anomaly in Kagome Superconductors AV ₃ Sb ₅ (A=Rb,Cs)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review X	6. 最初と最後の頁 31050
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevX.11.031050	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 Li Haoxiang, Zhang T. T., Said A., Fabbris G., Mazzone D. G., Yan J. Q., Mandrus D., Halasz Gabor B., Okamoto S., Murakami S., Dean M. P. M., Lee H. N., Miao H.	4. 巻 12
2. 論文標題 Giant phonon anomalies in the proximate Kitaev quantum spin liquid -RuCl ₃	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 3513
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-021-23826-1	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 Takahashi Ryo, Zhang Tiantian, Murakami Shuichi	4. 巻 103
2. 論文標題 General corner charge formula in two-dimensional C _n -symmetric higher-order topological insulators	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205123
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.205123	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 Osumi Ken, Zhang Tiantian, Murakami Shuichi	4. 巻 4
2. 論文標題 Kinetic magnetoelectric effect in topological insulators	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Physics	6. 最初と最後の頁 211
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42005-021-00702-4	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 Zhang Tiantian, Murakami Shuichi	4. 巻 54
2. 論文標題 Predicting topological materials: symmetry-based indicator theories and beyond	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics D: Applied Physics	6. 最初と最後の頁 414002 ~ 414002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6463/ac13f4	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 Peng Bo, Murakami Shuichi, Monserrat Bartomeu, Zhang Tiantian	4. 巻 7
2. 論文標題 Degenerate topological line surface phonons in quasi-1D double helix crystal SnP	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 195
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-021-00667-6	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 Zhang Tiantian, Hara Daisuke, Murakami Shuichi	4. 巻 3
2. 論文標題 Unique surface-state connection between Weyl and nodal ring fermions in ferromagnetic material Cs ₂ MoCl ₆	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 L042037
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.L042037	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 Li Haoxiang, Zhang Tiantian, Said A., Fu Y., Fabbris G., Mazzone D. G., Zhang J., Lapano J., Lee H. N., Lei H. C., Dean M. P. M., Murakami S., Miao H.	4. 巻 103
2. 論文標題 Observation of a chiral wave function in the twofold-degenerate quadruple Weyl system BaPtGe	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 184301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.184301	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 Kim Heejae, Cheng Hengbin, Lu Ling, Murakami Shuichi	4. 巻 29
2. 論文標題 Theoretical analysis of glide- Z_2 magnetic topological photonic crystals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Optics Express	6. 最初と最後の頁 31164 ~ 31164
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1364/OE.439590	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 Naito Katsuaki, Takahashi Ryo, Watanabe Haruki, Murakami Shuichi	4. 巻 105
2. 論文標題 Fractional hinge and corner charges in various crystal shapes with cubic symmetry	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 45126
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.045126	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 Zhang Tiantian, Murakami Shuichi	4. 巻 4
2. 論文標題 Chiral phonons and pseudoangular momentum in nonsymmorphic systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 L012024
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.4.L012024	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 Tanaka Yutaro, Takahashi Ryo, Okugawa Ryo, Murakami Shuichi	4. 巻 105
2. 論文標題 Rotoinversion-symmetric bulk-hinge correspondence and its applications to higher-order Weyl semimetals	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115119
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.115119	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 Yokomizo Kazuki, Murakami Shuichi	4. 巻 104
2. 論文標題 Scaling rule for the critical non-Hermitian skin effect	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 165117
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.165117	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 Yokomizo Kazuki, Murakami Shuichi	4. 巻 103
2. 論文標題 Non-Bloch band theory in bosonic Bogoliubov-de Gennes systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 165123
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.165123	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 Hirayama Motoaki, Takahashi Ryo, Matsuishi Satoru, Hosono Hideo, Murakami Shuichi	4. 巻 2
2. 論文標題 Higher-order topological crystalline insulating phase and quantized hinge charge in topological electrified apatite	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43131
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.043131	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 Aihara Yusuke, Hirayama Motoaki, Murakami Shuichi	4. 巻 2
2. 論文標題 Anomalous dielectric response in insulators with the \mathbb{Z}_2 Zak phase	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 33224
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.033224	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 Inoue Tomohiro, Murakami Shuichi	4. 巻 99
2. 論文標題 Topological band structure of surface acoustic waves on a periodically corrugated surface	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 195443
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PHYSREVB.99.195443	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 Yokomizo Kazuki, Murakami Shuichi	4. 巻 123
2. 論文標題 Non-Bloch Band Theory of Non-Hermitian Systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 66404
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PHYSREVLETT.123.066404	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 Takeichi Manabu, Murakami Shuichi	4. 巻 99
2. 論文標題 Topological linelike bound states in the continuum	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 35128
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PHYSREVB.99.035128	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 Inoshita Takeshi、Hirayama Motoaki、Hamada Noriaki、Hosono Hideo、Murakami Shuichi	4. 巻 100
2. 論文標題 Topological semimetal phases manifested in transition metal dichalcogenides intercalated with 3d metals	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 121112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PHYSREVB.100.121112	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 Kim Heejae、Shiozaki Ken、Murakami Shuichi	4. 巻 100
2. 論文標題 Glide-symmetric magnetic topological crystalline insulators with inversion symmetry	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 165202
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PHYSREVB.100.165202	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 Ideue Toshiya、Hirayama Motoaki、Taiko Hiroaki、Takahashi Takanari、Murase Masayuki、Miyake Takashi、Murakami Shuichi、Sasagawa Takao、Iwasa Yoshihiro	4. 巻 116
2. 論文標題 Pressure-induced topological phase transition in noncentrosymmetric elemental tellurium	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of the National Academy of Sciences	6. 最初と最後の頁 25530 ~ 25534
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1073/PNAS.1905524116	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 Okamoto Akihiro、Murakami Shuichi、Everschor-Sitte Karin	4. 巻 101
2. 論文標題 Berry curvature for magnetoelastic waves	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 66424
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PHYSREVB.101.064424	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 Tanaka Yutaro, Takahashi Ryo, Murakami Shuichi	4. 巻 101
2. 論文標題 Appearance of hinge states in second-order topological insulators via the cutting procedure	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115120
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PHYSREVB.101.115120	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 Takahashi Ryo, Tanaka Yutaro, Murakami Shuichi	4. 巻 2
2. 論文標題 Bulk-edge and bulk-hinge correspondence in inversion-symmetric insulators	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 13300
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PHYSREVRESEARCH.2.013300	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 Sakano M., Hirayama M., Takahashi T., Akebi S., Nakayama M., Kuroda K., Taguchi K., Yoshikawa T., Miyamoto K., Okuda T., Ono K., Kumigashira H., Ideue T., Iwasa Y., Mitsuishi N., Ishizaka K., Shin S., Miyake T., Murakami S., Sasagawa T., Kondo Takeshi	4. 巻 124
2. 論文標題 Radial Spin Texture in Elemental Tellurium with Chiral Crystal Structure	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 136404
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PHYSREVLETT.124.136404	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 Aihara Yusuke, Hirayama Motoaki, Murakami Shuichi	4. 巻 2
2. 論文標題 Anomalous dielectric response in insulators with the Zak phase	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 33224
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.033224	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 Hirayama Motoaki、Takahashi Ryo、Matsuishi Satoru、Hosono Hideo、Murakami Shuichi	4. 巻 2
2. 論文標題 Higher-order topological crystalline insulating phase and quantized hinge charge in topological electrified apatite	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43131
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.043131	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 Yokomizo Kazuki、Murakami Shuichi	4. 巻 123
2. 論文標題 Non-Bloch Band Theory of Non-Hermitian Systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 66404
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.123.066404	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 Inoue Tomohiro、Murakami Shuichi	4. 巻 99
2. 論文標題 Topological band structure of surface acoustic waves on a periodically corrugated surface	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 195443
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.195443	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 Takeichi Manabu、Murakami Shuichi	4. 巻 99
2. 論文標題 Topological linelike bound states in the continuum	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 35128
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.035128	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 Yokomizo Kazuki, Yamada Hiroaki, Murakami Shuichi	4. 巻 30
2. 論文標題 Nodal-line semimetal superlattices	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 505301 ~ 505301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/aaeabe	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 Hirayama Motoaki, Matsuishi Satoru, Hosono Hideo, Murakami Shuichi	4. 巻 8
2. 論文標題 Electrides as a New Platform of Topological Materials	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review X	6. 最初と最後の頁 31067
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevX.8.031067	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 -

[学会発表] 計33件 (うち招待講演 25件 / うち国際学会 24件)

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 Spectral flows and surface terminations in higher-order topological insulators
3. 学会等名 Recent Developments on Multipole Moments in Quantum Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 Axion insulators and topological chiral hinge states protected by inversion symmetry
3. 学会等名 CORRELATED ELECTRONS VIRTUAL INTERNATIONAL SEMINARS (CEVIS) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 Theoretical approaches to topological materials
3. 学会等名 CEMS colloquium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 Topological materials and higher-order topological materials
3. 学会等名 2nd IIT Guwahati and TokyoTech Joint Workshop on Condensed Matter and High Energy Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 カイラル結晶でのカイラル輸送現象と物質への応用
3. 学会等名 日本物理学会年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 Generalized corner-charge formula in higher-order topological insulators and its application to one-dimensional electrides
3. 学会等名 APS March Meeting 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 Theoretical approaches to topological materials
3. 学会等名 The 4th Symposium for The Core Research Cluster for Materials Science and the 3rd Symposium on International Joint Graduate Program in Materials Science, (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 トポロジカル物質概論：現状と展望
3. 学会等名 第245回 J O E M研究会「トポロジカル絶縁体」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 Bloch Band Theory for Non-Hermitian Systems
3. 学会等名 YITP workshop YITP-W-21-11 "Theoretical studies of topological phases of matter " (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 非エルミート系のブロッホ理論とトポロジー
3. 学会等名 京都大学物理学第一教室談話会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 New horizons of topological materials
3. 学会等名 NIMS Week (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 Kinetic magnetoelectric effect in topological insulators
3. 学会等名 722. WE-Heraeus-Seminar "Hybrid Solid State Quantum Circuits, Sensors, and Metrology" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Bloch Band Theory for Non-Hermitian Systems
3. 学会等名 NTT12019 and BEC 2019 (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 New Horizons of Topological Material Science
3. 学会等名 SSDM 2019 (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 generation and conversion of phonon angular momenta
3. 学会等名 SpinPeru (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 New Horizons of Topological Material Science
3. 学会等名 TokyoTech and IIT Guwahati Joint Workshop Condensed Matter and High-Energy Physics (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 Anomalous dielectric response in insulators with the pi Zak phase
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 村上修一
2. 発表標題 トポロジカル材料科学の現状と展開
3. 学会等名 第73回 超精密加工専門委員会 研究会 「量子力学の世界が織りなす物理の深淵とその応用」 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Generations and conversions of phonon angular momenta
3. 学会等名 New Perspective in Spin Conversion Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Higher-order topological crystalline insulating phase in topological electride apatite
3. 学会等名 The 2nd Annual symposium in the Tokyo Tech-UCL-McGill Core-to-Core collaboration Defect Functionalized Sustainable Energy Materials: From Design to Devices Application (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Spectral flows and surface terminations in higher-order topological insulators
3. 学会等名 Recent Developments on Multipole Moments in Quantum Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Topological phases in condensed matter
3. 学会等名 Tokyo Institute of Technology and Stony Brook University Joint Science and Technology Meeting (TokyoTech-SBU meeting 2019) (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 Bloch Band Theory for Non-Hermitian Systems
3. 学会等名 New Trends in Topological Insulators 2019 and Variety and Universality of Bulk-Edge Correspondence in Topological Phases 2019 (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 New Horizons of Topological Material Science
3. 学会等名 SSDM2019 (2019 Internatioal Conference on Solid State Devices and Materials) (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 New routes to topological materials
3. 学会等名 The 380th ZhongGuanCun Forum (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 Anomalous dielectric response in insulators with the p Zak phase
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shuichi Murakami
2. 発表標題 Higher-order topological crystalline insulating phase in topological electride apatite
3. 学会等名 The 2nd Annual symposium in the Tokyo Tech-UCL-McGill Core-to-Core collaboration Defect Functionalized Sustainable Energy Materials: From Design to Devices Application (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 平山元昭
2. 発表標題 第一原理計算によるトポロジカル材料開拓
3. 学会等名 元素戦略研究センターセミナー (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 平山元昭
2. 発表標題 第一原理計算による新しいトポロジカル半金属相の開拓
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 平山元昭
2. 発表標題 対称性の観点からの第一原理トポロジカル物質探索
3. 学会等名 物質のトポロジカル相の理論的探究
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M. Hirayama, S. Matsuishi, H. Hosono, and S. Murakami
2. 発表標題 Electrides as a New Platform of Topological Materials
3. 学会等名 APS March Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平山元昭, 松石聡, 細野秀雄, 村上修一
2. 発表標題 トポロジカル物質の新たな舞台としての電子化物
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平山元昭
2. 発表標題 第一原理手法を用いたトポロジカル系の理論研究と材料提案
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会 (招待講演)
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
研究 分担者	平山 元昭 (Hirayama Motoaki) (70761005)	国立研究開発法人理化学研究所・創発物性科学研究センター・ユニットリーダー (82401)	

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			
米国	Oak Ridge National Laboratory	Brookhaven National Laboratory	Argonne National Laboratory	
英国	University of Cambridge			
中国	Institute of Physics	Renmin University of China		
ドイツ	マインツ大学			