

令和 5 年 6 月 12 日現在

機関番号：15301

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2021～2022

課題番号：21K18877

研究課題名（和文）Beyond5G時代に向けたトポロジカル・ナノフォニクス開拓

研究課題名（英文）Development of Topological Nanophononics for the Beyond 5G Era

研究代表者

鶴田 健二（Tsuruta, Kenji）

岡山大学・自然科学学域・教授

研究者番号：00304329

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 5,000,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、トポロジカル絶縁体の概念を、音波・弾性波に拡張した“トポロジカル・フォニクス”により、Beyond 5G時代の超高周波弾性波デバイスの動作原理実証を目指し、原子レベルのトポロジカル相界面を探索、ボロンナイトライド表面のグラフェンに粒界を導入することでTHz帯でのトポロジカル導波路実現の可能性を示した。

また、カーボンナノチューブとボロンナイトライドチューブのヘテロ結合の光励起状態における原子ダイナミクスについて、超高速時間分解電子線回折法と時間依存密度汎関数法とを組み合わせ、1ピコ秒程度の時間内での電荷移動と、それに伴ってフォノン輸送が誘起がされることを見出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

Beyond 5G/6Gが社会実装されるには、THz帯で動作するナノスケール弾性波デバイスの設計法確立が喫緊の課題である。しかし、弾性波デバイスをTHz帯まで引き上げることは、熱的な分子振動の領域とも重なり、既存の概念に基づく設計のみでは、実現は難しい。

一方、トポロジカル絶縁体理論を援用し、フォノンの“トポロジーに保護されたエッジ状態”が発現する結晶粒界構造や人工周期構造を設計できれば、この問題を一気に解決する可能性がある。本研究は、ナノスケールのトポロジカル・フォニクスの学理構築、さらに電子励起と組み合わせたスイッチング機能の可能性を探索した他に例を見ない取り組みである。

研究成果の概要（英文）：In this study, the concept of topological insulators is extended to sound waves and elastic waves, called "topological phononics", with the aim of demonstrating the operating principle of ultrahigh-frequency elastic wave devices in the Beyond 5G era. Exploring atomic-level topological interfaces, we have demonstrated the possibility of realizing a topological waveguide in the THz band by introducing grain boundaries into graphene on boron nitride.

In addition, we investigated the atomic dynamics in the photoexcited state in the carbon nanotubes/boron nitride nanotube heterostructure through combined analyses of ultrafast time-resolved electron diffraction and time-dependent density functional theory. We found that the charge transfer occurs within one pico-second, which induces a phonon transport.

研究分野：ナノ・マイクロデバイス物理

キーワード：音響トポロジカル絶縁体 テラヘルツ弾性波 第一原理フォノン解析 時間依存密度汎関数法 時間分解電子線回折実験

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

表面弾性波(SAW)を用いたデバイス(SAW フィルタ等)の高集積化は、現代の通信機器が MHz 帯から GHz 帯へ進化する際に盛んに研究された。今後、Society5.0 において Beyond 5G/6G が社会インフラとなるには、THz 弾性波デバイスの実装がカギとなる。2020 年 6 月に総務省が打ち出した「Beyond 5G 推進戦略」では 2025 を最初のマイルストーンとして 2030 年までの社会実装開始を目指すとする。しかし、現在の通信機器内に使われている SAW フィルタなど、いわゆる電子素子以外の情報キャリア伝送機器の高周波数化に対する具体策が抜け落ちている。

一方近年、波動伝搬のロバスト性(欠陥や伝搬路の屈曲によって散乱されにくい)を持つトポロジカル絶縁体の概念を、音波・弾性波に拡張した“トポロジカル・フォノンクス”が急速に注目を集めている。

2. 研究の目的

本研究では、トポロジカルエッジモードをナノスケールで励起・制御する基礎理論を構築し、第一原理計算、分子動力学(MD)シミュレーション、ならびに電子線回折実験により実証する。さらに、複数のトポロジカルエッジ状態間を光励起で遷移させることによる、新しいフォノン伝搬制御法の確立も目指す。具体的目標として、(A)原子レベルのトポロジカル相界面の局在フォノン伝搬理論確立、(B)トポロジカル相界面に対する光励起による局在フォノン制御の実証、を掲げた。

3. 研究の方法

《A》鶴田・三澤は、有限要素法、ならびに第一原理密度汎関数法によるフォノンバンド計算によって、トポロジカル相界面のエッジ状態を持ちうる物質とその粒界構造、および人工周期構造を探索した。三澤は、探索したトポロジカル構造の第一原理計算のデータをもとに、人工ニューラルネットワーク(ANN)機械学習による経験的相互作用ポテンシャルを導出も目指した。

《B》大村は、光励起で原子間の結合状態を転移させることによるフォノンモードが変化するダイナミクスを、時間依存密度汎関数法に基づく非断熱の第一原理 MD シミュレーション法を用いて解析した。羽田は、光励起状態に伴うフォノンダイナミクスの検証として、時間分解電子線回折実験を実施した。

4. 研究成果

本研究では、近年、波動伝搬のロバスト性により注目が集まるトポロジカル絶縁体の概念を、音波・弾性波に拡張した“トポロジカル・フォノンクス”により、Beyond 5G時代の超高周波弾性波デバイスの動作原理の理論実証を目指した。全期間の実施実績・成果を、当初設定した達成目標項目ごとに以下に記す。

《A》原子レベルのトポロジカル相界面の局在フォノン伝搬理論確立

本研究課題に取り組む以前に実施した研究により、 C_{3v} 対称性を持つ八面体格子状のフォノン結晶がその単位セル内の連続的変形により kHz 帯や MHz 帯のバンドトポロジカル相転移を起こし、転移前後の構造を組み合わせればその界面で“トポロジーに保護されたエッジモード”が形成されることが分かっており、適切な材料・サイズで設計すれば GHz・THz 帯でもエッジモードが発現し、欠陥や屈曲に対してロバストな導波路が作製可能であることが予想され

る。我々は有限要素シミュレーションを実施し、GaAs の薄板上に C_{3v} 構造を持つナノフォニック構造を設計し、有限要素シミュレーションによって、極めて損失の小さい高効率なトポロジカル・エッジモード伝搬を実証した(図1)。これらの内の GHz 帯構造(図1(a))の試作および実験実証は現在進行中である。

原子レベルのトポロジカル相界面に基づく局在フォノン伝播の実証のため、ナノ材料におけるトポロジカル相界面のエッジ状態を持ちうる構造の探索を行なった。六方晶窒化ホウ素(h-BN)とグラフェンの積層系において、グラフェン側に線欠陥型の結晶粒界を導入した系に対するフォノン分散関係を密度汎関数理論に基づく第一原理バンド計算により解析したところ、52THz 付近に孤立したフォノンバンドが生じていることを見出した(図2)。当該バンドの固有ベクトルを解析した結果、結晶粒界近傍に局在化した面内振動モードを成していることを確認した。さらに、波数空間におけるフォノンバンドの Berry 曲率を解析したところ、当該バンドは原点非対称である非自明なトポロジを持つことが確認できた。以上の結果は、二次元物質における線欠陥型の結晶粒界を利用した超高周波トポロジカル導波路設計の実現可能性を示唆するものである。今後は孤立バンド以外のフォノンバンドに関しても振動モードおよびトポロジの詳しい解析を進めるとともに、人工ニューラルネットワークを利用した機械学習などによりフォノンの性質を高精度に再現可能な経験

的原子間相互作用ポテンシャルを導出することで、探索した構造に基づくフォノン導波路の設計および大規模 MD 法によるフォノン伝播シミュレーションを進めていく予定である。

【B】 トポロジカル相界面に対する光励起による局在フォノン制御

時間依存型密度汎関数法に基づく非断熱過程を取り入れた第一原理 MD シミュレーション法を用いて、カーボンナノチューブ(CNT)と窒化ホウ素ナノチューブ(BNNT)のヘテロ結合の光励起状態における原子ダイナミクスを調べた。計算モデルとして、図3(a)のようなカーボン(グラフェン)ナノシートと窒化ホウ素(BN)ナノシートを重ねた系を用いて、400nmの波長の光による光励起状態を再現し、励起後の原子ダイナミクスを解析した。図3(b)に400nmの光励起に対応した電子状態を示している。左側の状態から右側の状態へ電子を励起させ、時間依存型密度汎関数法に基づいた遷移確率によって電子遷移を起こしながら第一原理 MD を行う surface hopping 法を用いた計算を行った。

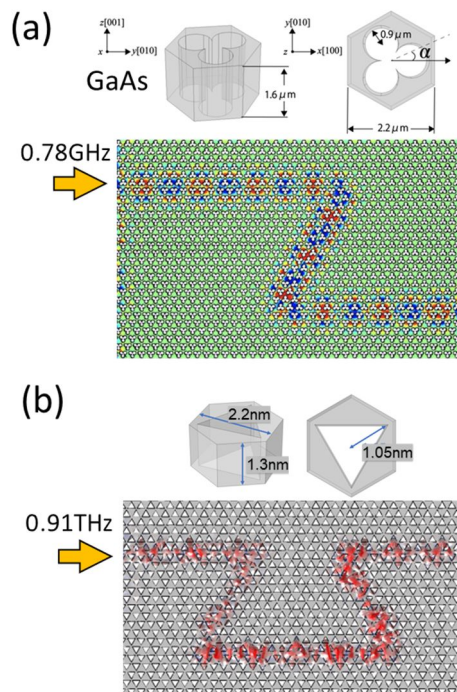


図1：有限要素法によるトポロジカル・薄膜フォニック導波路における(a) GHz 帯、(b)THz 帯の弾性波伝搬シミュレーション

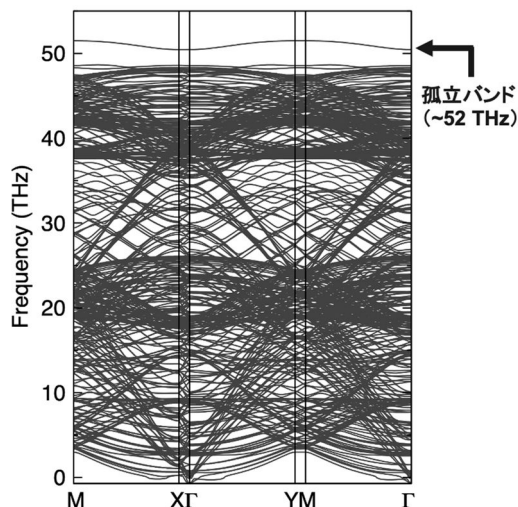


図2：第一原理計算によるh-BN上のグラフェン粒界構造のフォノンバンド図

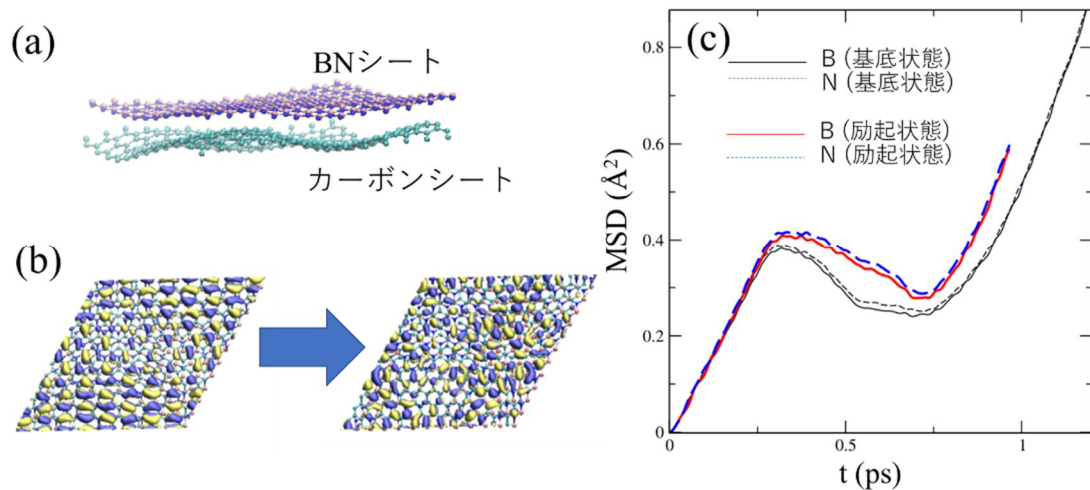


図3：カーボン/BNヘテロナノシート接合の励起状態の原子ダイナミクスに対する時間依存密度汎関数解析

図3(c)にシミュレーションから得られた励起状態におけるBNシートを構成するホウ素と窒素の平均二乗変位を示す。この手法は確率的に遷移を起こすため、3回計算した平均をとっている。比較のため、励起状態と同じ初期条件の基底状態における平均二乗変位も示している(黒線)。400 nmの光励起は、主にカーボンシート内の励起であるが、この図から、0.25 ps以降、励起状態におけるホウ素と窒素が、基底状態時に比べ大きく動いていることが分かる。これは、光励起によって結合状態を含む電子状態が変調を受け、その後、ホウ素と窒素の原子ダイナミクスが変化したことを示している。また、その時間スケール(光励起による電子状態の変化がホウ素と窒素の原子系の変化として現れる時間スケール)がサブピコ秒であることが明らかとなった。

CNTにBNNTを接合した1次元ヘテロ構造体を作製し、超高速時間分解電子線回折法を用いて、近紫外光パルスを照射した際に生じる1次元ヘテロ構造体の構造ダイナミクスを計測した。

1次元ヘテロ構造体のCNT部分のみを近紫外線の光パルスで励起し、電子線パルスを用いてCNTとBNNT全体のナノチューブの径方向のフォノンを観測した。CNTが励起され、生じた径方向のフォノンがBNNTとカップリングし、振動エネルギーが移ると考えられた。つまり、CNT/BNNTの1次元ヘテロ構造体では、二段階の構造変化が生じると考えられた。しかし、実際は一段階の構造変化が生じただけでなく、CNTだけのときに比べて早く径方向のフォノンが生じることを見出した。これは、励起されたCNTからBNNTへ何らかのエネルギーが高速で移動していることを示している。そこでCNTからBNNTへのエネルギー輸送の詳細を調べるために、近紫外光ポンプ、深紫外光プローブによる光学ポンプ・プローブ実験を行った。CNT励起直後にBNNTに電荷移動が生じており、これは上記の第一原理計算で得られた結果と一致する。このBNNT中の電子がフォノンを介して、CNTのホールと再結合をするため、CNT/BNNTの1次元ヘテロ構造体では、より高速でフォノンが生じたと考えられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Hiroaki Takeshita , Masaaki Misawa , and Kenji Tsuruta	4. 巻 42
2. 論文標題 Design of topological phononic structure for multi mode propagation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics (USE2021)	6. 最初と最後の頁 3Pb1-2-1 ~ -2
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
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 Motoki Kataoka, Masaaki Misawa, and Kenji Tsuruta	4. 巻 14
2. 論文標題 Design and Robustness Evaluation of Valley Topological Elastic Wave Propagation in a Thin Plate with Phononic Structure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Symmetry	6. 最初と最後の頁 2133 ~ 2133
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/sym14102133	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 Md. Shuzon Ali, Motoki Kataoka, Masaaki Misawa and Kenji Tsuruta	4. 巻 62
2. 論文標題 Reconfigurable waveguide based on valley topological phononic crystals with local symmetry inversion via continuous translation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SJ1002 ~ SJ1002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/acae63	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 Kenji Tsuruta	4. 巻 62
2. 論文標題 Acoustic metasurfaces and topological phononics for acoustic/elastic device design	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SJ0803 ~ SJ0803
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/acc6da	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 Yuito Ohashi, Motoki Kataoka, Hiroaki Takeshita, Masaaki Misawa, Kenji Tsuruta	4. 巻 43
2. 論文標題 Higher-order Band Control and Topological Elastic Waveguide Design using Resonant-type Phononic Crystals	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics (USE2022)	6. 最初と最後の頁 3Pb1-1-1~-2
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
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 Motoki Kataoka, Yuito Ohashi, Masaaki Misawa, Kenji Tsuruta	4. 巻 43
2. 論文標題 Design of Topological Phononic Structure and Application to Thin Plate Elastic Wave	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics (USE2022)	6. 最初と最後の頁 3Pa1-3-1~-2
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
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 Md. Shuzon Ali, Motoki Kataoka, Masaaki Misawa, Kenji Tsuruta	4. 巻 43
2. 論文標題 Reconfigurable Waveguide Design in Valley-Topological Phononic Crystal	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics (USE2022)	6. 最初と最後の頁 1Pa1-3-1~-2
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
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15件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 竹下 弘朗、三澤 賢明、鶴田 健二
2. 発表標題 C3v対称性をもつトポロジカルフォノンニック結晶による 弾性波導波路の構造設計
3. 学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hiroaki Takeshita , Masaaki Misawa , Kenji Tsuruta
2. 発表標題 Design of topological phononic structure for multi mode propagation
3. 学会等名 The 42nd Symposium on Ultrasonics Electronics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 四方諒、岸淵美咲、矢嶋渉、鈴木弘朗、大村訓史、林靖彦、羽田真毅
2. 発表標題 カーボンナノチューブ・窒化ホウ素ナノチューブヘテロ接合に生じる超高速エネルギー移動
3. 学会等名 第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Md. Shuzon Ali, Motoki Kataoka, Masaaki Misawa, Kenji Tsuruta
2. 発表標題 Reconfigurable Waveguide Design in Valley-Topological Phononic Crystal
3. 学会等名 The 43rd Symposium on Ultrasonic Electronics (USE 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kenji Tsuruta
2. 発表標題 Metamaterial and Topological Physics Approaches for Designing Efficient Acoustic/Elastic Devices
3. 学会等名 The 43rd Symposium on Ultrasonic Electronics (USE 2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuito Ohashi, Motoki Kataoka, Hiroaki Takeshita, Masaaki Misawa, Kenji Tsuruta
2. 発表標題 Higher-order Band Control and Topological Elastic Waveguide Design using Resonant-type Phononic Crystals
3. 学会等名 The 43rd Symposium on Ultrasonic Electronics (USE 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Motoki Kataoka, Yuito Ohashi, Masaaki Misawa, Kenji Tsuruta
2. 発表標題 Design of Topological Phononic Structure and Application to Thin Plate Elastic wave
3. 学会等名 The 43rd Symposium on Ultrasonic Electronics (USE 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Satoshi Ohmura
2. 発表標題 Properties of liquid Fe-O-Light-Element ternary systems under high pressure : molecular dynamics simulations
3. 学会等名 INTERNATIONAL CONFERENCE ON HIGH ENERGY DENSITY SCIENCES 2022 (HEDS2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Satoshi Ohmura
2. 発表標題 Bonding and structure of liquid iron-light-element-oxygen ternary alloys under high pressure: molecular dynamics simulations
3. 学会等名 The 18th International Conference on Liquid and Amorphous Metals (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大橋 唯人, 片岡 源樹, 竹下 弘明, 三澤 賢明, 鶴田 健二
2. 発表標題 欠損付Y形楕円構造トポロジカルフォノンニック結晶を用いた音響導波路設計
3. 学会等名 第83回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 羽田真毅
2. 発表標題 超高速時間分解構造ダイナミクス計測のナノカーボン材料への展開
3. 学会等名 第11回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン若手研究会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 羽田真毅
2. 発表標題 超高速時間分解電子線回折法を用いた炭素材料の構造ダイナミクス計測
3. 学会等名 第59回炭素材料夏季セミナー (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鶴田 健二
2. 発表標題 音響メタマテリアル/トポロジカルフォノンクス: 音波・弾性波制御への物性科学的アプローチ
3. 学会等名 第61回日本セラミックス協会セラミックス基礎科学討論会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 秦 佑介, 三澤 賢明, 鶴田 健二
2. 発表標題 カゴメ格子積層型の3次元フォノンニック結晶における高次トポロジカルヒンジモード
3. 学会等名 第70回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Masaki Hada
2. 発表標題 Multiscale time-resolved electron diffraction measurements for nanocarbon materials
3. 学会等名 第64回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

Multiscale Device Design Laboratory: NEWS http://www.cc.okayama-u.ac.jp/~eng_mdd/
--

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	三澤 賢明 (Misawa Masaaki) (00823791)	岡山大学・自然科学学域・助教 (15301)	

6. 研究組織（つづき）

	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	大村 訓史 (Ohmura Satoshi) (90729352)	広島工業大学・工学部・准教授 (35403)	
研究分担者	羽田 真毅 (Hada Masaki) (70636365)	筑波大学・数理物質系・准教授 (12102)	

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			
フランス	レンヌ第一大学			