

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 16 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2010～2014

課題番号：22540327

研究課題名(和文)量子スピンホール効果の新奇物性探索とデザイン

研究課題名(英文)Theoretical study and design of novel properties of topological insulators

研究代表者

村上 修一 (Murakami, Shuichi)

東京工業大学・理工学研究科・教授

研究者番号：30282685

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：3次元トポロジカル絶縁体の結晶転位上の1次元状態が熱電変換性能指数を低温で増大させることを見いだした。またトポロジカル絶縁体同士の界面では、表面状態の混成で界面状態を形成するが、通常と異なり、表面ディラックコーンのカイラリティに依存してギャップレスになることを見いだした。また「界面对称性」という特異な対称性がある場合には、界面状態のギャップが線上で閉じる特異なバンド構造を示すことを見出した。またワイル半金属相について、そのアーク状の表面状態が示すバンド分散、その系のパラメタ変化に対する変化、表面終端依存性を理論的に見いだした。

研究成果の概要(英文)：We found that metallic 1D states on dislocations in three-dimensional topological insulators enhance the thermoelectric figure of merit at low temperature. We also found that the interface states between two topological insulators depends on the chiralities of surface Dirac cones. In particular, when the "interfacial symmetry" is preserved at the interface, we find that the band structure of the interface states closes its gap on a loop, which is unexpected for usual interface states. Finally, we studied the Weyl semimetals from the viewpoint of the topology. We calculated the general form of the band dispersion of its surface Fermi arcs, and the change of the Fermi arcs upon change of some parameter, and their dependence on the surface terminations.

研究分野：物性理論

キーワード：トポロジカル絶縁体 表面状態 輸送現象 熱電変換 量子ホール系

1. 研究開始当初の背景

量子スピンホール系(トポロジカル絶縁体)(Kane, Mele, Phys. Rev. Lett. 95, 146803 & 226801(2005))は、2次元及び3次元系で実現する新しい相である。バルクでは非磁性バンド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りスピンを運ぶ。これらは通常の表面状態・エッジ状態とはかなり異なる特異な性質を持つ。HgTe 量子井戸でのコンダクタンス測定による2次元量子スピンホール系の観測や、 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 での表面状態の測定による3次元量子スピンホール系の観測など、近年引き続いて重要な実験結果が主要な学術誌に発表され、関心が急速に高まっている。本研究代表者は量子スピンホール系の研究に2005年当初より携わっており、数々の論文を発表している。例えば2006年には2原子層ピスマス薄膜が量子スピンホール系となることを理論的に見出した(S. Murakami, Phys. Rev. Lett. 97, 236805 (2006))。これは実際の物質での量子スピンホール効果の提案を行った世界で初めての論文である。この論文は、 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ での3次元量子スピンホール効果の実験による観測への契機ともなった。このように本研究代表者は量子スピンホール系についてリードして研究を行っており、この研究をさらに発展させて大きな成果につなげようというのが、本研究課題の目指すところである。

2. 研究の目的

本研究では量子スピンホール系について、その示す物性を多角的に探索しデザインすることを目的としている。具体的には

(1) 新奇な物性現象の予言・観測方法の提案

(2) 量子スピンホール系(トポロジカル絶縁体)の候補の系の探索とデザイン

の2項目を柱とする。この項目に沿って研究成果を出し知見を蓄積することにより、量子スピンホール系において室温でも観測できるような物性現象、マクロな系でも観測できる現象、新奇で興味深い現象等が実際の物質で起こる可能性を探る。

3. 研究の方法

研究目的で述べた2つの方針に分けて述べる。

(1) 新奇な物性現象の予言・観測方法の提案
これにはトポロジカル保護、強いスピン軌道相互作用、表面ディラック電子、などの要素に起因する現象を追究する。

「トポロジカル保護」について、2次元量子スピンホール系では、エッジ状態はトポロジカルに保護されており、非磁性の不純物等があっても後方散乱を受けずギャップレスであり続けるため、量子的にコヒーレントな伝導が保たれる。この性質により出てくる新しい性質について調べる。例えば熱輸送・スピン輸送などである。熱輸送については、本研

究代表者らが最近2次元量子スピンホール系での熱電輸送(熱輸送、電気伝導、熱起電力)の計算の簡単な見積もりを行っている。これをさらに発展させ、熱輸送、スピン輸送等はこの系の特異性がどのように出てくるか考察する。関連して不純物効果についての理論的理解を進めて、トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体との相転移における不純物効果について調べる。さらには特異的なスピン輸送などの可能性を探る。

なおこのトポロジカル保護は主に弾性散乱のものであり、有限温度で非弾性散乱が顕著になってくるとその特徴が次第に失われるため、これに起因した効果はある程度低い温度で現れると考えられる。

(2) 量子スピンホール系(トポロジカル絶縁体)の候補の系の探索とデザイン

トポロジカル絶縁体の研究から派生して、トポロジカルに起因したバンドエンジニアリングの方向性を探る。具体的には、

トポロジカル絶縁体の表面状態の混成による新規物性・新奇状態の探索を多角的におこなう。これはスピン軌道相互作用のある系を念頭においているが、関連した系としてグラフェンなどのディラックコーンの系があり、それらの系についての新規物性・新奇状態の探索も並行して行うことができる。

トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体との間の相転移に関する理論の構築を行う。

以前より研究代表者が行っている、トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体との間の相転移についての研究をさらに発展させることにより、トポロジカル絶縁体や関連したトポロジカルな金属系(ワイル半金属やディラック半金属など)の新奇性質の理論的探索をするとともに、候補物質の探索の道を探る。

4. 研究成果

トポロジカル絶縁体およびその関連した系のエッジ・表面の輸送現象について、以下に挙げる成果を得た。

(1) トポロジカル絶縁体の熱電輸送に関する研究を行った。2次元トポロジカル絶縁体のエッジ状態や、3次元トポロジカル絶縁体の結晶転位上の1次元状態は純スピン流を運ぶ特殊な状態であり、後方散乱を受けないため、輸送に関しては特殊な性質をもつと期待される。以前のエッジ状態の研究に引き続いて、本研究では結晶転位上の1次元状態について計算し、結晶転位が密になるに従って熱電変換性能指数 ZT が低温で増大することが理論的に見出された。この計算においては結晶転位が導入されるにつれて乱れが増し、移動度端がバンドの底から次第に離れていくことを考慮しており、このことは ZT の増大傾向をさらに強める働きをすることが分かった。この転移上の状態は全てのトポロジカル絶縁体にあるわけではなく、例えばピスマ

ス-アンチモン合金など限られたクラスのトポロジカル絶縁体でのみ見られる。

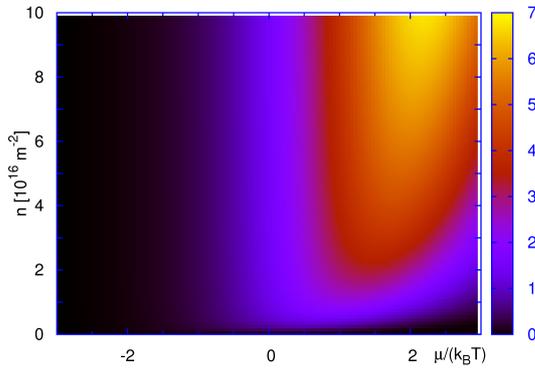


図1：3次元トポロジカル絶縁体でのZTの計算結果。

(2) 3次元トポロジカル絶縁体での不純物効果について研究を行った。トポロジカル絶縁体を表わす4バンド模型に不純物を導入した時、トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体との間の相転移がどのように変わるかを計算した。その結果トポロジカルな相転移は乱れが導入されても残り、最終的には価電子帯および伝導帯にある非局在状態が互いに近接してくるによりギャップが閉じて相転移が起こることが分った。この相転移は、トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体との相転移に一般的に適用されると考えられる。

(3) トポロジカル絶縁体などのスピン軌道相互作用系におけるスピントルクについて、スピン軌道相互作用が空間的に一様でない場合にスピントルクが誘起される現象を理論的に計算した。たとえばゲートが試料の一部にのみかかっている場合などは、ゲート電圧によるラッシュバスピ軌道相互作用も場所依存性が生まれる。その非一様性からスピントルクが誘起されることを見だし、その分布を計算した。

(4) トポロジカル絶縁体の表面状態の混成による新規物性・新奇状態の探索を行った。特に、トポロジカル絶縁体同士の界面では、それぞれのトポロジカル絶縁体由来の表面状態同士が混成するが、その際の混成の仕方は通常の物質系とは大きく異なる特異なものであることを見いだした。

まず、異なるトポロジカル絶縁体を2種類接合したときの界面を考えると、通常は2種のトポロジカル絶縁体由来の表面状態の混成により界面状態はギャップが開いて絶縁的になると考えられているが、本研究で必ずしもそうではない場合があることが分った。トポロジカル絶縁体の表面状態はディラックコーンと呼ばれる特徴的なエネルギー分散を持ち、それぞれの状態のスピンの向きはカイラリティを持つ。そのカイラリティが異符号のもの同士を接合すると、かならず

界面状態がギャップレス(金属的)に残ることが分った。有効模型を用いた考察と、トポロジカル不変量を用いた議論を用いてこうした結果を示した。この界面状態は一般にディラックコーンが偶数個の集まりになり、結晶の対称性により例えば2個、6個などになる。これらはグラフェン同様の谷の自由度とみなせて、“valleytronics”への応用が期待される。

通常この界面状態は一般に、偶数個のディラックコーンの集まりになる。界面での粒子正孔対称性がある場合はこのギャップが閉じる点が線状に並ぶという特異なバンド構造を示すことを見出した。さらにこれがパフィアンと呼ばれる量の符号で特徴づけられることを見出した。このパフィアンで特徴づけられる特異な界面状態は質的に新しい状態と考えられる。

(5) さらに(4)の研究から派生した研究課題として、スピン軌道相互作用のない蜂の巣格子やダイヤモンド格子上の模型での、分散のない平坦バンドをなすエッジ状態・表面状態の振る舞いを研究した。

等方的模型の場合、平坦バンドはブリルアンゾーンの一部を覆っているが、ここに異方性を導入した場合のフラットバンドの変化を調べた。異方性を強くしていくとフラットバンドが次第にブリルアンゾーンの広い範囲を占めるようになり、ある値以上に強くなるとフラットバンドはブリルアンゾーン全体を覆うようになることを理論的に示した。

またこのときにはバルクのバンド構造はギャップを持ち、フェルミエネルギー上にはブリルアンゾーン全体を覆う平坦なバンドフラットバンド表面状態のみがあるようになる。これを利用して、3次元方向全てに完全に局在した状態の構成を行った。またこの表面状態の存在は、先行研究での、グラフェンなど2次元系でのフラットバンドエッジ状態のトポロジカルな特徴づけを今回の3次元系に拡張することで理解できることがわかった。

(6) トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体との間の相転移が一般にどのように起こるかを解明し、その際にどのように表面状態が発展していくかを示した。

バルクでディラックコーンが見られるワイル半金属相について、そのフェルミアークと呼ばれる表面状態の分散と系のパラメータ変化に対する変化を理論的に計算した。ワイルノードを2個持つ有効模型をたてて、それからバルクと表面状態を計算し、フェルミアーク表面状態がバルクのディラックコーンに接することを見いだした。次に系のパラメータ変化でワイル半金属相がトポロジカル絶縁体に相転移すると、それに応じて表面フェルミアーク同士がくっついて表面ディラック

クコーンになることを見いだした。

ワイルノード2個の組がフェルミアークを形成するが、その組み合わせは表面の終端の仕方に依存することを格子模型で確かめ、それをトポロジカル絶縁体での表面終端に関する理論と関連づけて議論した。

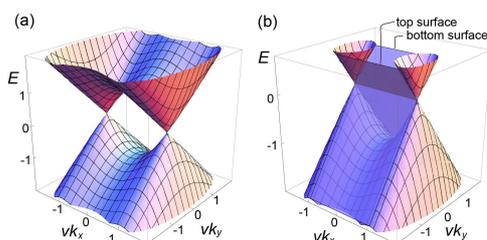


図2：ワイル半金属のバンド構造。(a)バルク、および(b)バルクと表面状態。

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 11 件)

R. Okugawa and S. Murakami, Dispersion of Fermi arcs in Weyl semimetals and their evolutions to Dirac cones, Phys. Rev. B 89, 235315-1-235315-8, 2014, 査読有, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.235315>

R. Takahashi and S. Murakami, Completely flat bands and fully localized states on surfaces of anisotropic diamond-lattice models, Physical Review B 88, 235303-1-10, 2013, 査読有, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.88.235303>

R. Takahashi and S. Murakami, Thermoelectric transport in topological insulators, Semicond. Sci. Technol. 27, 124005-1-8, 2012, 査読有, DOI: 10.1088/0268-1242/27/12/124005

K. Tsutsui and S. Murakami, Spin-torque efficiency enhanced by Rashba spin splitting in three dimensions, Phys. Rev. B 86, 115201-1-7, 2012, 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevB.86.115201

R. Takahashi and S. Murakami, Gapless Interface States between Topological Insulators with Opposite Dirac Velocities, Phys. Rev. Lett. 107, 166805-1-4, 2011, 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.166805

K. Tsutsui, A. Takeuchi, G. Tatara, and S. Murakami, Spin Currents Induced by Nonuniform Rashba-Type Spin-Orbit Field, J. Phys. Soc. Jpn. 80, 084701-1--084701-4, 2011, 査読有, DOI: 10.1143/JPSJ.80.084701

R. Takahashi and S. Murakami, Thermoelectric figure of merit in topological insulators, Journal of Physics: Conference Series 302, 2011, 査読有, DOI: 10.1088/1742-6596/302/1/012026

S. Murakami, R. Takahashi, O. A. Tretiakov, Ar. Abanov and J. Sinova, Thermoelectric transport of perfectly conducting channels in two- and three-dimensional topological insulators, Journal of Physics: Conference Series 334, 012013-1--012013-9, 2011, 査読有, DOI: 10.1088/1742-6596/334/1/012013

村上修一, 隠れた位相 ホール効果と幾何学的位相, 数理科学 577 巻, pp.53-58, 2011 年, 査読有 http://www.saiensu.co.jp/?page=book_details&ISBN=4910054690712&YEAR=2011

R. Shindou, R. Nakai and S. Murakami, Disordered topological quantum critical points in three-dimensional systems, New Journal of Physics 12, 065008-1--065008-20, 2010, 査読有, DOI: 10.1088/1367-2630/12/6/065008

O. A. Tretiakov, Ar. Abanov, S. Murakami, and J. Sinova, Large thermoelectric figure of merit for three-dimensional topological Anderson insulators via line dislocation engineering, Applied Physics Letters 97, 073108-1-073108-3, 2010, 査読有, <http://dx.doi.org/10.1063/1.3481382>

[学会発表](計 30 件)

S. Murakami, Topological spin transport in metals and ferromagnetic insulators, Gordon Godfrey Workshop on Strong Electron Correlations 2013, 2013 年 11 月 25 日, Sydney, Australia, 招待講演

S. Murakami, Spin-orbit Coupling in Topological Insulators, International

Symposium on Computational Science 2013, 2013年02月18日, 金沢大学(石川県金沢市), 招待講演

S. Murakami, Topological spin currents in solids, 12th Japanese-German Symposium: Emergent Phenomena in Novel Quantum Phases of Condensed Matter, 2012年07月15日, ラフォーレ修善寺(静岡県伊豆市), 招待講演

S. Murakami and R. Takahashi, Gapless Interface States between Topological Insulators with Opposite Signs of Dirac Velocities, 2012 MRS Spring Meeting, 2012年04月10日, San Francisco, USA, 招待講演

S. Murakami, Spin Hall effect of electron and light, International Conference "Spins & Photonic Beams at Interface", 2011年9月25日, Minsk, BELARUS, 招待講演

S. Murakami and R. Matsumoto, Semiclassical Dynamics of Magnon Wavepacket and Magnon Hall Effect in Ferromagnets, PIERS2011, 2011年9月12日, Suzhou, China

S. Murakami, Surface and interface gapless states of topological insulators, the 3rd International Workshop on Quantum Condensation (QC11), 2011年7月14日, Hong Kong, China

村上修一, 和田真樹, 三澤哲郎, トポロジカル絶縁体のエッジ状態・表面状態による輸送現象, 第15回半導体スピン工学の基礎と応用/PASPS15, 2010年12月21日, 筑波大学計算科学研究センター(茨城県つくば市)

村上修一, トポロジカル絶縁体での特異な熱電輸送の理論的探索, 第5回KEK連携研究会「熱電変換材料と新規機能物質」, 2010年12月18日, 筑波大学(茨城県つくば市)

〔図書〕(計 2 件)

齊藤 英治, 村上修一, 共立出版, スピン流とトポロジカル絶縁体 量子物性とスピントロニクス の発展, 176 (73-139), 2013年

S. Murakami and Takehito Yokoyama,

Oxford University Press, "Quantum spin Hall effect and topological insulators", Spin Current (Series on Semiconductor Science and Technology 17), 442 (272-295), 2012年

〔産業財産権〕
出願状況(計0件)
取得状況(計0件)

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

村上修一 (Murakami, Shuichi)
東京工業大学・大学院理工学研究科・教授
研究者番号: 30282685