同時発表：
筑波研究学園都市記者会（資料配布）
文部科学記者会（資料配布）
科学記者会（資料配布）

# 室温でゼロ抵抗電流を運ぶ量子物質の理論設計に成功

## －新規トポロジカル物性現象と量子機能の発見－

平成２５年６月２６日

独立行政法人 物質・材料研究機構


**概要**

１．独立行政法人　物質・材料研究機構（理事長：潮田 資勝）国際ナノアーキテクトニクス研究拠点（WPI-MANA）（拠点長：青野 正和）の古月 暁主任研究者、梁 奇鋒（リャン チフォン）MANA リサーチアソシエート、呉 龍華（ウー　ロンファ）NIMS ジュニア研究員らのグループは、室温を超える高温でもゼロ抵抗電流[1)] を運ぶことが可能な物質の設計に成功した。この物質は大きなスピン軌道相互作用[2)] を持ち、スピン偏極[3)] したエッジ量子状態[4)] に特徴づけられる新しいトポロジカル状態[5)] を示す。スピン偏極は電場調整で制御でき、スピントロニクス[6)] にも役立つ。

２．トポロジカル絶縁体[7)] はスピン軌道相互作用がもたらす新しい量子状態であり、近年その物質探索が物性物理及び物質科学の最先端になっている。この物質はサンプルのバルク部分では絶縁的であるが、サンプルのエッジに抵抗の伴わない電流を運ぶ量子状態が存在し、新規量子機能が期待されている。しかし、これまでは極低温でしか見つかっていない。また、エッジ電流の中でスピン上向きと下向きの電子が混在して、このままではスピントロニクスに応用できないという問題があった。

３．研究グループは、電子系の対称性[8)] 解析や第一原理計算[9)] により、ペロフスカイト構造[10)] を持つ反強磁性絶縁体に金の化合物一原子層を挿入し（図１参照）、垂直方向にゲート電圧[11)] を印加することによって、新しいトポロジカル状態が実現できることを理論的に明らかにした。トポロジカル物質の探索及び新規量子機能開発の新しい方向を示す研究成果である。

４．本研究成果は６月２１日に物理学協会（英国）の論文誌 New Journal of Physics （オンライン版）に掲載された。


**研究の背景**

現在のパソコンには主に半導体技術が使われている。一回の演算にはおおよそ十万個程度の電子を狭い集積回路の中で速く駆動する必要があり、これに伴い大きな発熱が生じ、エネルギーの消費に繋がる。小型化が進めば発熱問題はより深刻になるため、新しいテクノロジーの開発が喫緊な研究課題である。

トポロジカル絶縁体と呼ばれる量子状態の発見は、この分野で大きなブレイクスルーをもたらす可能性を秘めている。この新規量子状態では、スピン軌道相互作用が重要な役割を果たし、電子の波動関数は普通の半導体とは異なるトポロジカルな性質を示す。その結果、サンプルのバルク部分は絶縁体として振る舞うが、サンプルのエッジに量子化された状態が現れ、抵抗のない電流を運ぶことができる。この量子状態を示す新規物質の探索は、物性物理と物質科学の新しいフロンティアになっている。しかし、今までは極低温でしか実現されていない。また、エッジ電流の中で上向き

と下向きのスピンを持つ電子が混在して、このままではスピントロニクスに応用できない。

## 成果の内容

古月らのグループが着目したのは、蜂の巣構造をもつ層状物質である。図２（a）にあるように、蜂の巣は六角形を示し、正方形や三角形と同じように、あるユニットの繰り返しで平面を埋め尽くすことができるが、実は結晶学的に非常にユニークである。つまり、蜂の巣格子には等価ではない二つの副格子[12]が存在する。このため、その上で動く電子は普通の固体中の電子とは異なる振る舞いを示す。特にフェルミエネルギー[13]近傍では、エネルギーと運動量の関係が線形的になり、見掛け上質量のない、相対論に従うディラック電子[14]になっている。この線形形状のためディラック・コーン[15]と呼ばれる分散関係（図２（b）参照）から派生する特異な電子物性はグラフェン[16]の発見で脚光を浴び、2010 年の Geim 博士と Novoselov 博士のノーベル物理学賞に繋がっている。

光が円偏光を持つと同じように、ディラック電子はカイラリティ[17]という特性を持つ。蜂の巣格子上では、二つの異なるディラック・コーン（谷とも呼ばれる）の周りの電子は正と負のカイラリティを示すことが判明している。普通の状態では、二つのカイラリティが相殺してしまい、マクロなスケールでは露わにその効果を観測することができない。しかし、何らかの方法で谷を操作して、カイラリティを揃えることができれば、電子の波動関数が系全体に亘ってメビウスの帯[18]のようにねじれた構造をとり、トポロジカル状態になる。揃い方には数通りの可能性があり、2005 年に発見された有名な量子スピンホール効果[19]はその一例になっている。

古月らのグループはペロフスカイト金属酸化物が示すバックルした蜂の巣構造[20]を巧妙に利用して、スピン軌道相互作用、反強磁性交換場[21]、及び交代電気ポテンシャル[22]という三つの“外場”による、電子の副格子、谷とスピンという三つの自由度の操作を考案した。その結果、量子スピンホール効果とは異なるカイラリティの揃い方を実現し、強靭なトポロジカル状態の設計に成功した（図３参照）。

この新しい量子状態にある物質はサンプルのバルク部分では絶縁的であるが、サンプルのエッジにスピンが揃った量子状態が現れ、抵抗のないホール電流[23]を運ぶことができる（図４参照）。エッジ電流のスピンの向きは、磁場ではなくて、電場で逆転することが可能である。興味深いことに、この物質全体の磁化はゼロになっている。フェルミエネルギー近傍に他の状態がないため、電子の散乱が強く抑制され、欠陥や有限温度による揺らぎからの影響を受けにくく、非常に安定な電流輸送が可能である。

この理論的指針の下に、物質設計も行われた。例えば分子線エピタキシー法[24]を用いてペロフスカイト構造を持つ反強磁性モット絶縁体[25] $LaCrO_3$ を結晶[111]方向に成長させ、その上に $La_2Au_2O_6$ を一原子層挿入した後に、また $LaCrO_3$ のバルクを成長させ、図１（a）にあるサンドイッチ構造を作る。バックルした蜂の巣面(図１（b）)に載っている金原子のｄ電子はディラック電子として振る舞い、上下にある $LaCrO_3$ 基盤から、反強磁性交換場を受ける。さらに、金原子のｄ電子はペロフスカイト結晶の[111]面で動くため、原子軌道の混成が起き、大きなスピン軌道相互作用が生まれる。この状態で[111]方向に電場を掛ければ、バックルした蜂の巣構造により交代電気ポテンシャルが生じ、理論モデルで要求されている三つの外場が得られる。図５（a）の構造の第一原理計算から、反強磁性交換場とスピン軌道相互作用によって、谷のところでエネルギーギャップが開く（図５（b））ことが示された。この結果から温度に換算して 600 ケルビンに当たる、大きなトポロジカルなエネルギーギャップが見積もられ、室温を超える高温でも機能する強靭なトポロジカル状態が実現できることが明らかになった。

**波及効果と今後の展開**

この研究成果によって、室温でゼロ抵抗電流を運ぶ物質が実現可能であることが判明した。エッジ電流はスピン偏極を示し、スピンの向きが電場で制御できるので、この新しい物質及びそれから派生する電子物性は、斬新な量子機能をもたらすと期待される。この研究で示された処方箋に基づいた物質合成、類似構造からの物質探索が成功すれば、基礎研究のみならず多くの応用分野にも大きなインパクトを与える。

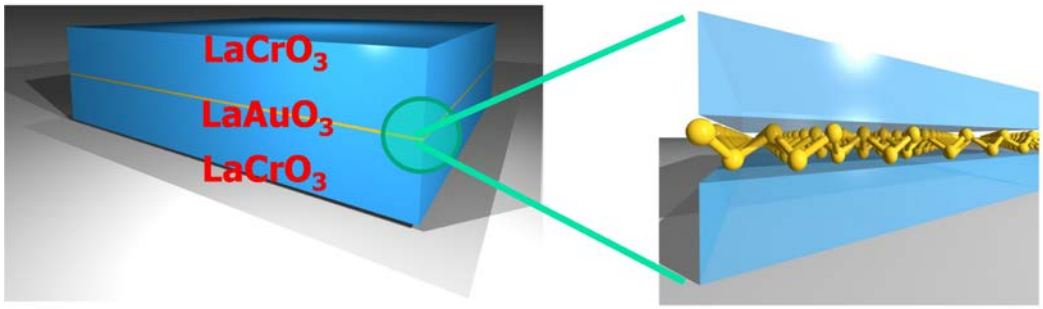


図１：新規トポロジカル絶縁体の模式図。母物質は結晶[111]方向に成長させたペロフスカイト酸化物 $LaCrO_3$ である。クローム原子同士は全ての隣接するものとは逆向きに配列する G 型反強磁性秩序を持つ。挿入された金原子はバックルした蜂の巣層に位置し、垂直方向に電圧を掛けることで新規トポロジカル量子状態が得られる。

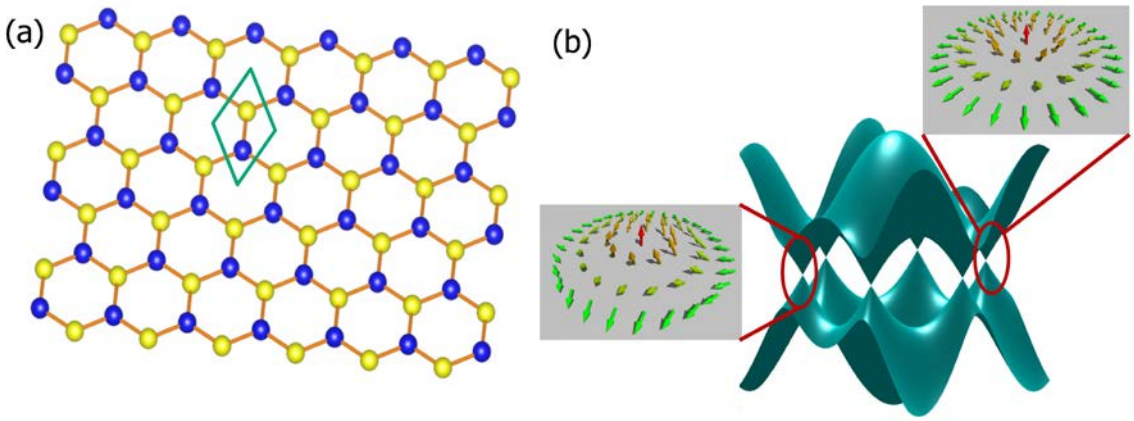


図２：(a)蜂の巣構造。二つの副格子（青と黄色）を持ち、繰り返しで平面を埋め尽くすことができる最小ユニット（緑菱形）の中に二つのサイトがある。(b)フェルミエネルギーにおけるエネルギーの運動量依存性が線形的になり、見掛け上質量のない、相対性理論に従うディラック電子になる。三つ一組の谷で、電子の波動関数が渦と反渦に似た構造を持ち、二組（計六つ）の谷で正と負のカイラリティを示す。

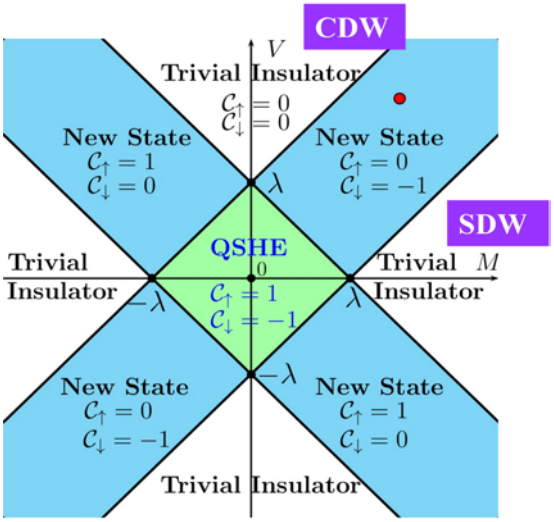


図３：反強磁性交換場と交代電気ポテンシャルによるトポロジカル絶縁体の相図、但しエネルギー単位はスピン軌道相互作用の強度。青は新規トポロジカル相、緑は量子スピンホール効果、白はスピン密度波と電荷密度波に対応するトポロジカル的に自明な絶縁相。

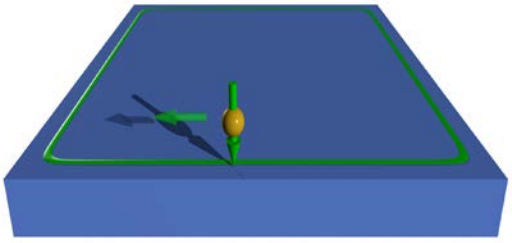

図４：新規トポロジカル絶縁体のエッジ量子状態。スピン下向きの電子のみが寄与し、欠陥と熱揺らぎに強く、抵抗を伴わない電流が流れる。

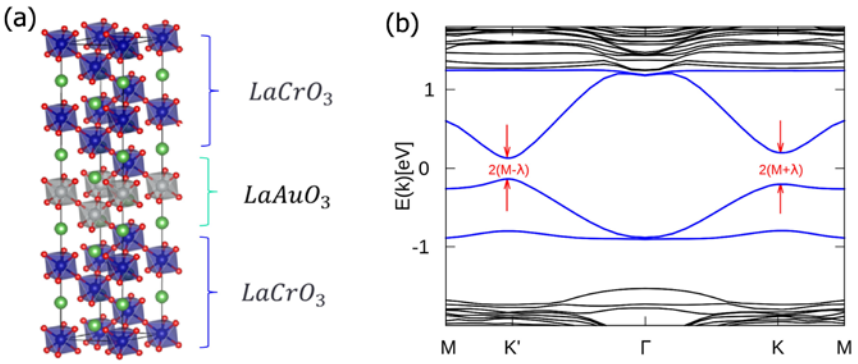


図５：(a)第一原理計算に用いるユニットセル：$[LaCrO_3]_5$ $[LaAuO_3]_2$ $[LaCrO_3]_5$。(b)ゼロ電場での第一原理計算によるバンド構造。黒曲線は母物質からの寄与で、青曲線は金の d 電子からの寄与である。

**掲載論文**

題目: Electrically tunable topological state in [111] perovskite materials with antiferromagnetic exchange field

著者: Q. -F. Liang, L.-H. Wu and X. Hu

雑誌: New Journal of Physics

**用語解説**

１）ゼロ抵抗電流

抵抗や発熱がなく流れる電流のこと。超伝導体は電子対を作ることで、抵抗のない電流を運ぶことができる。その他に、量子状態にある単一の電子も磁場の中で抵抗を伴わない電流を運ぶことができる。電子の運動方向が磁場から受けるローレンツ力と直交しているため、エネルギーの受渡しがない。

２）スピン軌道相互作用

電子の持つスピンが波動関数の空間分布で決まったある特定の方向に偏った方が、全体としてエネルギーが低くなる現象。

３）スピン偏極

電子の持つスピンが空間的にある特定の方向に偏ること。鉄、コバルト、ニッケル等の強磁性体の元としてよく知られている。

４）エッジ量子状態

波動関数がサンプルの縁に局在する量子状態。

５）トポロジカル状態

電子状態がスピン軌道相互作用等によって、その波動関数が特異な位相幾何学的性質を示す物質状態。

６）スピントロニクス

現在使われているエレクトロニクスに対比して、さらに電子のスピン特性を生かして、小型化や新規機能を可能にする次世代テクノロジーのこと。

７）トポロジカル絶縁体

トポロジカル物質の一種。スピン軌道相互作用等によって、電子の波動関数が特異な位相幾何学的特性を持つもの。サンプルの内部は絶縁的で、その表面は量子特性の一つとして金属的になっており、抵抗ゼロ電流を運ぶことができる。

８）対称性

結晶中の電子がイオンの配列等によって等価な方角や平行移動の周期性を持つこと。これによって、電子の性質を分類することができる。

９）第一原理計算
物質の電気的、磁気的特性を、密度汎関数理論に基づいて、特定の仮定を用いることなく解明する理論的手法。

１０）ペロフスカイト構造
結晶構造の一種である。ペロフスカイト（灰チタン石）と同じ結晶構造をペロフスカイト構造と呼ぶ。例えば、$BaTiO_3$（チタン酸バリウム）のように、RMO3 という 3 元系から成る遷移金属酸化物などが、この結晶構造をとる。理想的には、立方晶系の単位格子をもち、立方晶の各頂点に金属 R が、体心に金属 M が、そして金属 M を中心として、酸素 O は立方晶の各面心に配置している。

１１）ゲート電圧
電気回路に入っていない電極に電圧を掛け、それに近い回路部分の電界により電子の流れに関門（ゲート）を設けることができる。このゲートに掛ける電圧のこと。

１２）副格子
結晶格子の中で、位置的に同じ性質を持つもの同士が形成する部分的な格子のこと。

１３）フェルミエネルギー
結晶中の電子は、パウリの排他原理に従って、ゼロエネルギーから順番に詰めていく。結晶単位胞にある原子がもつ全ての電子を詰め終わるエネルギーのこと。

１４）ディラック電子
ディラックが見出した、相対論的量子力学の基礎方程式に従う電子のこと。

１５）ディラック・コーン
グラフェンやトポロジカル絶縁体系では、特殊な運動量の値の近傍において、そこから計った運動量に線形的に比例するエネルギーが見られることがある。この線形形状から生まれた言葉。しばしば谷とも呼ばれる。

１６）グラフェン
1 原子の厚さの sp2 結合炭素原子のシート。炭素原子とその結合からできた蜂の巣のような六角形格子構造をとっている。

１７）カイラリティ

電子の波動関数が示す左巻きと右巻きのこと。

１８）メビウスの帯
帯状の長方形の片方の端を 180°ひねり、他方の端に貼り合わせた形状の図形（曲面）。

１９）量子スピンホール効果
グラフェンや HgTe 等、特殊な二次元半導体で存在する量子状態で、量子化されたスピンホール伝導率を持ち、電荷ホール伝導率はゼロである。

２０）バックルした蜂の巣構造
蜂の巣格子で二つの副格子に属する格子点の位置がそれぞれ格子面の上と下にずれることによってできた、凹凸構造のこと。単純立方体によって作られる三次元結晶は結晶[111]方向から見れば、バックルした蜂の巣格子の積み重ねになっている。

２１）反強磁性交換場
反強磁性とは、隣り合うスピンがそれぞれ反対方向を向いて整列し、全体として磁気モーメントを持たない物質の磁性を指す。この場合、隣り合うスピン同士が及ぼす相互作用のことを、反強磁性交換場と呼ぶ。

２２）交代電気ポテンシャル
隣り合うサイトの電子が感じる絶対値が同じで、符号が反対になっている電位のこと。

２３）ホール電流
電流の流れているものに対し、電流に垂直に磁場をかけると、電流と磁場の両方に直交する方向に起電力が現れる現象はホール効果と呼ばれる。ホール電流は電場（起電力）に垂直な電流のこと。

２４）分子線エピタキシー法
半導体の結晶成長に使われている手法の一つである。真空蒸着法に分類され、物理吸着を利用する。高真空のために、原料供給機構より放たれた分子が他の気体分子にぶつかることなく直進し、ビーム状の分子線となるのが名称の由来である。

２５）反強磁性モット絶縁体
バンド理論では金属的と予想されるにもかかわらず、電子間斥力の効果（電子相関効果）によって

実現している絶縁体状態のことである。現実の「モット絶縁体」では反強磁性を示すなど磁性状態になる。

本件に関するお問い合わせ先
（研究内容に関すること）
独立行政法人物質・材料研究機構　国際ナノアーキテクトニクス研究拠点(WPI-MANA)
主任研究者　古月 暁
E-mail: HU.Xiao@nims.go.jp
TEL: 029-860-4897

（報道担当）
独立行政法人物質・材料研究機構
企画部門　広報室
〒305-0047　茨城県つくば市千現 1-2-1
TEL: 029-859-2026、FAX: 029-859-2017