

## グラフェン系材料でトポロジカル状態が発現する新原理を解明

～ハニカム格子最近接格子点間の電子ホッピングエネルギーの調整で実現～

配布日時：平成28年4月14日14時

解禁日時：平成28年4月14日19時

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

### 概要

1. 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 (WPI-MANA) の古月 暁主任研究者のグループは、グラフェン等のように、ハニカム格子上を電子がホップする<sup>1)</sup>系において、トポロジカル状態<sup>2)</sup>を実現する新しい原理を発見しました。最近接格子点間のホッピングエネルギーの強弱を一定のルールに従って調整すれば、バルクでは絶縁的で、サンプルの縁では散乱が抑制された電流が流れます。今後、新しい指針によるトポロジカル物質の探索が行われ、新規量子機能とデバイスの開発に繋がることが期待されます。
2. 近年、ハニカム格子上の電子系のトポロジカル特性に関する研究が活発に行われています。これまでの研究で、ハニカム格子の次近接格子点間の電子ホッピングに伴うスピン軌道相互作用<sup>3)</sup>によって、トポロジカル状態が発現することが判明しています。しかし、グラフェン等の材料ではスピン軌道相互作用が非常に弱いため、トポロジカル状態の観測が困難です。他の物質や結晶構造も精力的に調べられていますが、現状では非常に低い温度でしかトポロジカル特性が実現されていません。
3. 本研究グループは、ハニカム格子の最近接格子点の間における電子ホッピングエネルギーの強弱に着目しました。全ての格子点を6員環に分割して、6員環の内部に比べて、6員環同士間のホッピングエネルギーを強くするだけで、トポロジカル状態が実現されることを理論的に解明しました。ホッピングエネルギーは原子間の化学結合エネルギーに比例するため、この方法で得られるトポロジカル状態は、スピン軌道相互作用によるものと比べて非常に安定になり、高温でも機能するトポロジカル特性が実現可能になると考えられます。
4. 今回解明された方法は、構成元素の特殊な性質や外部磁場の印加等を必要としないうえ、今までに盛んに研究されてきたグラフェン及びその類似材料に適用できるため、新規のトポロジカル物質の探索や、それを用いた量子機能とナノデバイスの研究開発において、新しい展開が期待されます。
5. 本研究成果は、英科学誌 Scientific Reports (オンライン版) にて2016年4月14日午前10時 (現地時間) に掲載される予定です。

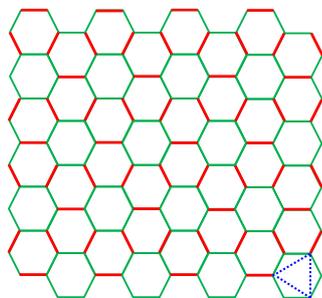


図1：トポロジカル状態を示すハニカム格子の模式図。最近接格子点は実線で結ばれ、緑と赤のボンドはそれぞれホッピングエネルギーの小さい箇所と大きい箇所を表している。次近接格子点は点線で示されている。緑ボンドで囲まれる6員環が人工原子と見なすことができ、反時計回りと時計回りのp原子軌道とd原子軌道を持つ。

## 研究の背景

表面や縁で散乱されない電流やスピンを持つトポロジカル絶縁体の探索が物性物理及び物質科学の最先端の一つになっており、斬新なスピントロニクスが開発が期待されています。その中で、ハニカム格子は非常に重要な役割を担ってきました。1988年、Haldaneがハニカム格子の最近接格子間の電子ホッピングに加えて、次近接格子間の電子ホッピングも考慮に入れば、外部磁場がなくてもトポロジカル電子状態の実現が可能であることを解明しました。2005年、Kane-Meleがグラフェンにおける量子スピンホール効果<sup>4)</sup>を発見し、トポロジカル絶縁体の研究の大きなきっかけを作りました。しかし、この場合、スピン軌道相互作用が非常に小さく、トポロジカル状態が弱いため、その実験観測が極めて困難です。大きなスピン軌道相互作用を示す様々な元素や結晶構造について精力的な探索が続いていますが、非常に低い温度でしかトポロジカル特性が観測されていません。

## 研究内容と成果

本研究では、原子間距離の変化等で最近接格子点間の電子ホッピングエネルギーが場所的に異なるハニカム格子を考えました。図1に緑線で囲んでいるように、ハニカム格子の全ての格子点を6員環にグループ分けして、6員環の内部と6員環間の電子ホッピングエネルギーをそれぞれ一定にして、二者の大小関係を調整しました。電子ホッピングエネルギーは、隣接原子の波動関数の重ね合わせ積分によって決まるもので、その値が大きければ、電子のホッピングによる運動エネルギーの利得が大きく、電子がより簡単に原子間を飛び移ります。

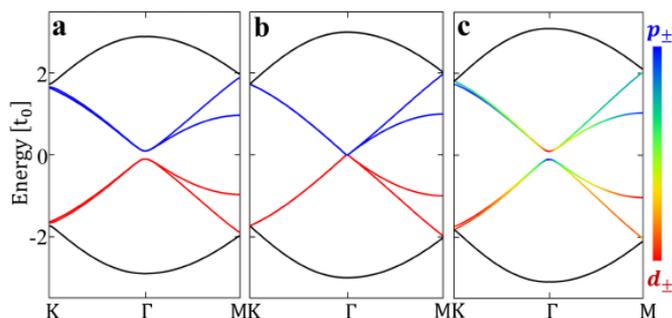


図2：ハニカム格子上の電子系の強束縛モデルによって計算されるエネルギー分散関係、但し単位胞は6員環を含む六角形である。(a)  $t_1 = 0.9t_0$ 、(b)  $t_1 = t_0$ 、(c)  $t_1 = 1.1t_0$ 、但し  $t_0$  と  $t_1$  はそれぞれ6員環内と6員環間の電子ホッピングエネルギーである。 $p_{\pm}$  と  $d_{\pm}$  はそれぞれ反時計回りと時計回りのp軌道とd軌道を表す。

6員環内部を電子がホップする場合、ひとまわりで電子の位相が  $2\pi$  変わるp波原子軌道と、 $4\pi$  変わるd波原子軌道があります。p波とd波では、電子波動関数の変化が異なるので、エネルギーが異なります。一方で、電子は時計回りにも反時計回りにもホップでき、二つの状態は同じエネルギーを持ちます。図2(a)において、バンドギャップの下側はd波に、上側がp波になっており、 $\Gamma$ 点でそれぞれ2本のエネルギー分散曲線が重なっているのはこのためです。

6員環間のホッピングエネルギーを徐々に大きくしていくと、電子はある程度他の6員環に飛び移れますが、系全体に行き渡ることができません。この結果、系は絶縁状態になり、大局的には孤立した6員環の集まりと同等になります。しかし、p波とd波のエネルギーが近づきます。6員環間の電子遷移エネルギーが6員環内のものと同程度の場合、図2(b)にあるように、 $\Gamma$ 点でp波とd波のエネルギーが等しくなり、ディラック型線形エネルギー分散関係が見られます。

6員環間のホッピングエネルギーが6員環内のものより大きい場合、再びエネルギーギャップが開き、系が絶縁状態になります。しかし、 $\Gamma$ 点の近傍において、d波とp波のエネルギーの大小関係が逆転して

います。このため、図2(c)に見られるように、ギャップの上下にあるバンドにおいてp波とd波が混在してしまいます。この結果、系はトポロジカル特性をもつ絶縁体になります。

このことを確認するために、長いリボン型のトポロジカル絶縁体を、両側からトポロジカル的に自明な絶縁体で囲む状況について電子状態の計算を行いました。図3(a)の赤い曲線に示されているように、バルクでは見られない新しいエネルギー分散曲線が現れます。図中の1と2で指定されているエネルギーと運動量での電子状態波動関数の実空間分布は、図3(b)、(c)、(d)に示されています。電子状態は境界に集中し、時計回りと反時計回りに動く電子が境界に沿って逆向きに流れていることが分かります。

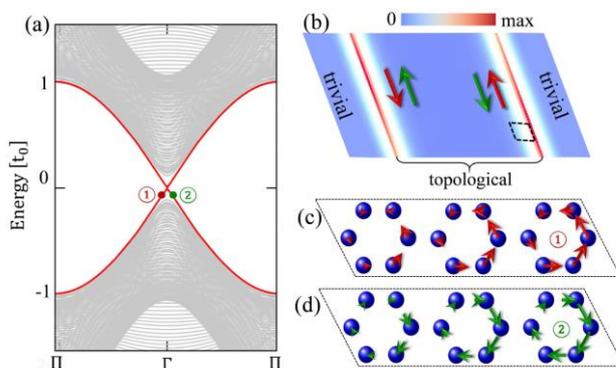


図3：(a)リボン形状をもつトポロジカル絶縁体のエネルギー分散関係。(b)、(c)、(d) 図(a)中1と2で示されるエネルギーと運動量の電子状態密度、反時計回りと時計回りの電子が運ぶ電流の実空間分布。

最近接格子点間の電子ホッピングに加えて、グラフェンの次近接格子点間の電子ホッピングに伴うスピン軌道相互作用によって、量子スピンホール効果が発現することはKane-Meleの研究で分かっています。しかし、スピン軌道相互作用は相対論効果の一種で、炭素等の軽い元素ではそれが非常に弱く、グラフェンにおける量子スピンホール効果の実験観測は困難です。これに対して、今回の研究では、6員環における時計回りと反時計回りの電子ホッピングがスピンの役割を果たします。6員環内部と6員環間の最近接格子点間遷移エネルギーの差が、有効なスピン軌道相互作用になり、トポロジカルなバンドギャップの大きさを決めています。電子のホッピングエネルギーは電気的な相互作用に起因しているので、相対論的効果と比べて非常に大きくなります。このため、電子のホッピングエネルギーの大小の調整によって、大きなバンドギャップを持つ強靱なトポロジカル状態の実現が可能になります。また、この現象は電子の軌道自由度だけから発現しているため、今までに研究されてきた量子スピンホール効果との対比で、量子軌道ホール効果<sup>4)</sup>と呼ぶことができます。

## 今後の展開

本研究で明らかになった原理は、グラフェンや類似の二次元材料のみならず、ディラック型エネルギー分散関係を持つ二次元電子ガスや量子ドット系等にも適用できます。そのため、今後この新しい指針に従った物質探索が期待されます。また、同じ考え方は冷却原子、表面プラズモン、エキシトン、ポラリトン、光子や音波系におけるトポロジカル状態の実現にも役立ちます。トポロジカル特性の実現は、外部磁場に頼る第一ステージから、物質元素の原子軌道を利用する第二ステージを経て、構造の組織化によって新規自由度を創成して活用する第三ステージに進み、より応用に役立つ量子機能の研究開発が期待されます。

## 掲載論文

題目： Topological Properties of Electrons on Honeycomb Lattice with Detuned Hopping Energy

著者： Longhua Wu and Xiao Hu

雑誌： Scientific Reports

掲載日時： 2016年4月14日午前10時(現地時間) オンライン掲載予定

## 用語解説

### (1) 格子点間の電子ホッピング、ホッピングエネルギー

結晶中では、電子はクーロン引力によって、イオンに束縛されているが、隣接する二つのイオンを中心にもつ電子の波動関数の裾が重なっているため、電子が隣のイオンに飛び移る(=ホップする)ことができる。この現象を理論的に表現するのは電子の強束縛モデルである。電子のホッピングに伴って、運動エネルギーの分だけ、系全体の全エネルギーが下がる。その大きさは波動関数の重ね合わせの程度及びクーロン相互作用の大きさで決まり、強束縛モデルのホッピングエネルギーになっている。

### (2) トポロジカル状態

電子の量子力学波動関数をもつ特異な位相幾何学的(=トポロジカル)位相によって、結晶内部では普通の絶縁体と変わらないが、表面や縁に散乱されない電流やスピン流が流れる状態。

### (3) スピン軌道相互作用

電子のスピンと軌道角運動量の相互作用のこと。相対論効果の一種であり、電子の量子力学振る舞いを記述するディラック方程式から導出される。古典的には、イオンの周りを電子が円運動することは、電子の周りにイオンが円運動することと等価である。このため、電子のいる場所に磁場が作られ、電子のスピン向きによってエネルギーが異なる状態が現れる。

### (4) 量子スピンホール効果、量子軌道ホール効果

量子スピンホール効果はトポロジカル特性の一種で、時間反転対称性が保たれている。系の表面や縁ではスピン上向きの電子とスピン下向きの電子が逆方向に運動する。原子の間に時計回りと反時計回りにホップする電子軌道がスピンの役割を果たしている場合、現象の類似性から量子軌道ホール効果と呼ぶ。

## 本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

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ニクス研究拠点(WPI-MANA)

主任研究者 古月 暁

TEL: 029-860-4897

E-mail: HU.Xiao@nims.go.jp

(報道・広報に関すること)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 経営企画部門 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

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp