

PRESS RELEASE

2017年11月28日
東京大学
理化学研究所
東京工業大学
科学技術振興機構
セント・アンドルーズ大学

トポロジカル電子状態の設計・制御に新たな道

－ 遷移金属ダイカルコゲナイドで一般原理を発見 －

要旨

東京大学大学院工学系研究科付属量子相エレクトロニクス研究センターのバハラミー・モハマド・サイド特任講師(理化学研究所創発物性科学研究センター創発計算物理研究ユニット・ユニットリーダーも兼任)と東京工業大学科学技術創成研究院フロンティア材料研究所の笹川崇男准教授らの研究グループは、英国のセント・アンドルーズ大学(フィリップ・キング准教授ら)やダイヤモンドライトソース軌道放射光施設などの海外10研究機関との国際共同研究^{*}により、物性の宝庫として近年注目を集めている遷移金属ダイカルコゲナイド(TMD)[1]において、物質表面にスピン偏極したトポロジカルな電子状態[2]や、物質内部全体にグラフェンと同様な質量ゼロのディラック電子状態[3]が発現する際の、一般的な原理を発見しました。

経験や実験データを必要としない第一原理計算[4]で求めたTMDの電子状態をもとに一般原理を理論的に構築し、スピン状態までの詳細な電子構造を直接観察できる角度分解光電子分光法[5]によって実験的な検証を行いました。提唱した一般原理による理論予測が正しいことを示す結果として、6つの異なる組成をもつTMDについて、トポロジカル表面電子状態や3次元ディラック電子状態が存在していることの実験実証に成功しました。

以上の成果は、昨年のノーベル物理学賞で活気づいているトポロジカル電子物質の研究分野に普遍的な基礎学理を与えるとともに、トポロジカル電子状態の制御や物質設計への重要で新たな指針になります。

本研究成果は、国際科学雑誌『Nature Materials』(11月27日付:日本時間11月28日午前1時)に掲載されました。

なお、本研究は、科学技術振興機構(JST)戦略的創造研究推進事業(CREST)「トポロジカル絶縁体ヘテロ接合による量子技術の基盤創成(JPMJCR16F1、研究代表:川崎雅司)」および「トポロジカル量子計算の基盤技術構築(JPMJCR16F2、研究代表:笹川崇男)」の一環として行われました。

※国内共同研究者

バハラミー・モハマド・サイド (Bahramy Mohammad Saeed)

東京大学大学院工学系研究科附属量子相エレクトロニクス研究センター 特任講師
理化学研究所 創発物性科学研究センター
創発計算物理研究ユニット ユニットリーダー

笹川 崇男 (ささがわ たかお)

東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所 准教授

大川 顕次郎 (おおかわ けんじろう)

東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所 大学院生 (研究当時)

浅川 瑞生 (あさかわ みずお)

東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所 大学院生 (研究当時)

※海外共同研究グループ

研究機関

(英国) University of St. Andrews (Dr. Philip King's Group)

(韓国) Seoul National University

(韓国) Institute for Basic Science

(独国) Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids

(ノルウェー) Norwegian University of Science and Technology

(スウェーデン) Lund University

(タイ) Suranaree University of Technology

放射光施設

(英国) Diamond Light Source

(伊国) Istituto Officina dei Materiali (IOM)-CNR, Laboratorio TASC

(仏国) Synchrotron SOLEIL

1. 背景

昨年のノーベル物理学賞の対象となったことで、固体物質中におけるトポロジカルな電子状態と、それら状態間の相転移に大きな注目が集まっています。トポロジー(位相幾何学)の本質は、穴の数やねじれの数などといった連続変形させても消えない特徴で分類を行うと、その分類に従った共通の性質が素材の寸法や形などの詳細には依らずに現れるというものです。電子状態を決める波動関数についてこれを当てはめることで、「トポロジカル絶縁体」や「トポロジカル半金属」、「トポロジカル超伝導体」などが理論提唱され、実験による検証が進んできました(詳しくは、トポロジカルな電子状態[2]を参照して下さい)。これらの固体物質中に現れる特殊な相対論的・量子力学的な粒子状態は、次世代の高性能な電子デバイスを実現するものとして注目されています。一方でこれまでは、個々の物質について構成する種々の元素間や種々の電子軌道間における運動量とエネルギーの関係を解析することにより、トポロジカルな電子状態が出現する原因がケースバイケースで理解されてはいましたが、戦略的にトポロジカル物質を創製するための一般化された方法論や明確な指針はありませんでした。

2. 研究手法と成果

今回、バルクあるいは表面、または両者に共存した形で、質量ゼロのディラック電子状態を単一種類の電子軌道のみを使って創製できる一般的な原理を提唱しました。これは、ひっくり返しても同じ結晶構造となる空間反転対称性と、ある角度で回転させても同じ結晶構造となる回転対称性との両方をもつ物質において適用できます。結晶中の電子は、運動量(運動する速度と方向)によってエネルギー状態が変化します。適切な元素を選んで適切な原子配置を行うと、相対論の効果を見捨てた場合には、回転対称軸に沿った運動量のどこかにおいて、同じ種類の電子軌道から作られる複数の電子状態を交差させる(2つの電子状態に同じ運動量とエネルギー状態をとらせる)ことが原理的に可能であることに注目しました。異なる対称性に分類される波動関数同士の場合には、これに相対論効果が加わっても交差状態が維持できるので、結晶全体でグラフェンと同様な質量をもたないディラック電子[3]を生成することができます。一方で、同じ種類の対称性をもつ波動関数同士の場合には、相対論効果によって交差するはずだった運動量の点において2つの電子状態にエネルギー差(ギャップ)が生じます。このバルクに生じているエネルギーギャップを境に偶関数か奇関数かという波動関数の性質が入れ替わるために、この場合にはトポロジカル絶縁体と同様にスピン偏極した電子状態が表面のみに出現することになります。

この一般原理を満たす現実の物質として、遷移金属ダイカルコゲナイド(TMD)[1]が理想的な条件を持っていることを発見しました。TMDは、遷移金属層を2つのカルコゲン(硫黄、セレン、テルル)層が上下に挟む層状構造で、面内に120度の回転対称性を持ちます。そして、カルコゲンに由来するp軌道が、上下の層間で結合性や反結合性の電子状態を作っています。これらの電子状態が、回転対称軸である積層方向の運動量において、上記のルールに従って相対論効果の存在下で交差を維持したりギャップを生成したりすることによって、バルクや表面にディラック電子状態を発生させることになります。

図に示したのはパラジウムとテルルからなるTMD(PdTe_2)についての第一原理計算[4]の結果で、積層の垂直方向(k_z)と平行方向(k_y)に運動量を変化させたときの波動関数がもつエネルギー状態を3次元的に描写しています。テルルp軌道から発生している電子状態は3つあります。低いエネルギーの電子状態は、 k_z 軸上で中間エネルギーの電子状態と交差してバルクでディラック電子状態を発生します。一方で、高いエネルギーの電子状態は相対論効果によって中間エネルギーの電子状態との間にエネルギーギャップを形成し、表面にはトポロジカルなスピン偏極したディラック電子状態を発生していることが確認できます。バルクのディラック電子と表面のトポロジカルなディラック電子が同時に発生するという点において、 PdTe_2 は大変興味深い物質であると言えます。そして、角度分解光電子分光[5]実験によってバルクおよび表面の電子構造を実際に観察したところ、この理論予言が正しいことを確認することにも成功しました。更に、この一般原理が、トポロジカル電子状態の制御や物質設計への指針になることの実証として、6つの異なる組成をもつTMDについて第一原理計算で電子状態を理論予測し、角度分解光電子分光で結果が正しいことも確認しました。

Topological surface states

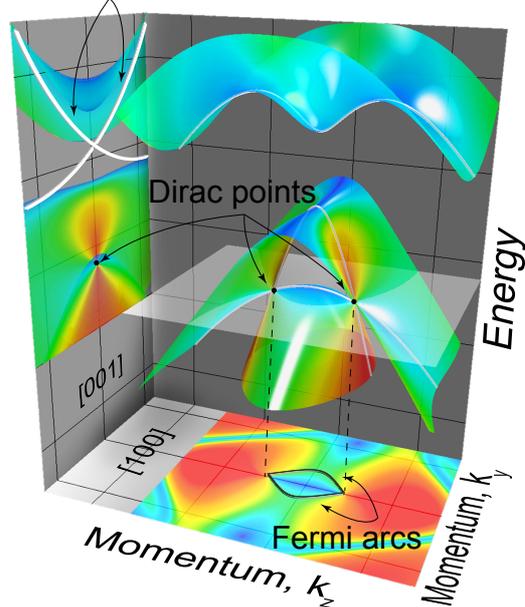


図. パラジウム-テルルの遷移金属ジカルコゲナイド(PdTe_2)におけるバルクおよび表面の運動量とエネルギーの関係を第一原理計算で求めた結果

3. 今後の期待

TMDは、遷移金属(周期表の第3~11族に属する元素)とカルコゲン(硫黄、セレン、テルル)の組合せによって30種類以上の化合物が安定に存在することが知られており、組成によって絶縁体から金属、超伝導体までの様々な物性を示すことが分かっています。このような多様性と応用可能性の高い物質群について、トポロジカルな電子状態を系統的に開拓する道筋を与えるものとして、今回提唱した一般原理は大きな波及効果を持つことが予想されます。これにより、ナノエレクトロニクスをはじめとするTMDを電子デバイスに応用しようとする研究に弾みがつくことが期待されます。また、物質を限定せずに原子軌道の種類と対称性をもとに一般原理を構築したという点においても、トポロジカル電子物質について普遍的な基礎学理を与えるものとして今回の成果は重要な意味をもちます。

4. 論文情報

<タイトル>

Ubiquitous Formation of Bulk Dirac Cones and Topological Surface States from a Single Orbital Manifold in Transition-metal Dichalcogenides

(遷移金属ジカルコゲナイドの単一種の電子軌道から普遍的に生成するバルクのディラック分散とトポロジカル表面状態)

<著者名>

M.S. Bahramy, O.J. Clark, B.-J. Yang, J. Feng, L. Bawden, J. M. Riley, I. Markovic, F. Mazzola, V. Sunko, D. Biswas, S. P. Cooil, M. Jorge, J.W.Wells, M. Leandersson, T.

Balasubramanian, J. Fujii, I. Vobornik, J. Rault, T. K. Kim, M. Hoesch, K. Okawa, M. Asakawa, T. Sasagawa, T. Eknapakul, W. Meevasana, and P.D.C. King

<雑誌>

Nature Materials (published online: November 27, 2017)

<DOI>

DOI: 10.1038/NMAT5031

5. 補足説明

[1] 遷移金属ダイカルコゲナイド (TMD)

タングステン(W)、パラジウム(Pd)、白金(Pt)などの遷移金属元素Mと、硫黄(S)、セレン(Se)、テルル(Te)のいずれかのカルコゲン元素Xとが結合し、 MX_2 の化学組成で表される層状構造をもつ化合物。英語では Transition Metal Dichalcogenides のため、TMDの略称が使われる。組成によって絶縁体から半導体、金属、超伝導体まで幅広く電子状態が変化する。加えて、層状結晶をバラバラにした原子レベルの厚さのシートにしても安定であり、積層時とは異なる次世代の電子素子として有望な電子状態が発現するケースもあり、機能の宝庫として注目されている。

[2] トポロジカルな電子状態

物質の組成や構造の詳細によらず、電子波動関数をもつ特徴によって分類した際に、同じ分類の物質では類似した性質を持つ電子状態が必ず出現する場合がある。「トポロジカル絶縁体」がその典型例で、重元素由来の強い相対論効果によって波動関数をもつエネルギー状態の順番が逆転してしまっているという特徴から、物質内部は電子が動けない絶縁体状態でありながら、その表面には必ず特殊な金属状態(2次元のディラック電子[3]で、運動方向で決まる向きにスピンも揃っており、高速でかつ散乱されにくいという特徴ももつ)が出現する。「トポロジカル半金属」の場合は、ディラック電子状態が物質内部(バルク)全体で生じることから、3次元版のグラフェンと見なすことができる。更に「トポロジカル超伝導体」では、粒子と反粒子とが同一になった電子状態が出現し、これを利用することで新しい原理に基づくエラーに強い量子計算が可能になると言われている。

[3] ディラック電子状態

グラフェン(炭素が六角形の網の目状につながった原子1層のシート)やトポロジカル絶縁体の表面、トポロジカル半金属のバルク(物質内部全体)などで存在が確認されている電子状態。通常の実験中電子状態を記述するシュレーディンガー方程式ではなく、相対論的量子力学のディラック方程式に従い、質量をもたない粒子として振舞う。電子の移動度が大きいため、電子デバイスへの応用が期待されている電子状態。

[4] 第一原理計算

量子力学の基本原則に基づいて、経験的なパラメータや実験データに頼らないで、物質の電子構造や電子物性などを計算できる方法。固体内部だけでなくモデルを構築することで表面の電子状態も計算可能であり、電子状態を作っている各元素の軌道成分や、スピン状態なども解析できる。

[5] 角度分解光電子分光法

真空中に置かれた単結晶試料の表面に、エネルギーの揃った強力な光を照射すると、電子が結晶から飛び出してくる(アインシュタインの光電効果)。飛び出した電子の運動方向とエネルギーを精密に分析することで、固体中と表面の電子構造を直接観察することができる。最近では、検出器の工夫によってスピン方向まで分析できるようになってきている。

6. 発表者・機関窓口

<発表者> ※研究内容については発表者にお問い合わせ下さい

東京大学大学院工学系研究科付属量子相エレクトロニクス研究センター
特任講師 バハラミー・モハマド・サイド (Bahramy Mohammad Saeed)
(理化学研究所 創発物性科学研究センター 創発計算物理研究ユニット ユニットリーダー
も兼任)

TEL: 03-5841-6840 FAX: 03-5841-6840

E-mail: bahramy@ap.t.u-tokyo.ac.jp

東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所
准教授 笹川 崇男(ささがわ たかお)

TEL: 045-924-5366 FAX: 045-924-5366

E-mail: sasagawa@mssl.titech.ac.jp

University of St. Andrews, SUPA, School of Physics and Astronomy

Royal Society Research Fellow and Reader in Physics

Philip King

TEL: +44 (0)1334 463067

E-mail: Philip.King@st-andrews.ac.uk