

光制御されたトポロジカル半金属状態の創成 ～結晶端の特異な電子状態を理論的に予見～

原子は原子核と電子で構成されています。そして、電子がとることのできるエネルギーは、飛び飛びの値を持ちます。これをエネルギー準位と呼びます。そして、結晶中の電子の振る舞いは、非常に多数のエネルギー準位が束になった帯（バンド）状のエネルギー構造に基づいて理解されてきました。近年、相異なるバンドが交差・反転して捻じれているトポロジカル物質という結晶群が発見され、その物理的起源を探る基礎研究や電気抵抗が極めて小さい新機能デバイスなどへの応用研究が、世界レベルで精力的に行われています。

本研究では、トポロジカル物質を構成する新規な素材そのものを探索するのではなく、結晶にレーザーを照射して電子の状態を変調することでバンド構造の交差・反転を誘起し、その結果生じる新奇な物理現象を追究しました。レーザーの照射で誘起された動的な状態や励起状態におけるトポロジカル物質の研究は、未開拓ゆえに様々な潜在的な可能性を秘めています。

具体的には、量子井戸という2次元半導体（一種の絶縁体）に強いレーザーを照射して光と電子が一体化した量子状態を創成し、ある特定のレーザー強度のとき異なるバンド同士が円錐交差し得ることを理論的に示しました。これはレーザーによって絶縁体が半金属に相転移したことに対応します。この際、微小なバンドギャップで隔てられた近似的な円錐交差も付随して発現することが分かりました。さらに、このような半金属相の結晶端に現れる1次元バンド間のギャップ内に、平坦な線分状の特異なエネルギー準位が現れることを見出しました。

この研究は、未開拓である非平衡状態・励起状態におけるトポロジカル物質の物性解明に向けた探究に資することができるかと期待されます。

研究代表者

筑波大学数理物質系

日野 健一 教授

研究の背景

結晶は非常に多くの原子や分子で構成されています。これを反映して非常にたくさんのエネルギー準位が狭い間隔で束になった帯状のエネルギー構造を持っています。これをエネルギーバンド（エネルギー帯または単にバンド）といいます。さらに、バンド同士はあるエネルギーの間隙（バンドギャップ）で隔てられて並んでいます（参考図 1 a）。

バンドのエネルギー値は結晶内の電子の運動量（速さに相当する物理量）によって決まります。運動量の変化に対してエネルギーバンドが部分的に反転した捻じれ構造を有する物質群はトポロジカル絶縁体^{注1)}と呼ばれます。この物質にはトポロジカル秩序^{注2)}という特異性が内在し、通常の絶縁体とは明確に区別されます。さらに、これに伴い結晶表面の境界（エッジ）上には円錐交差（参考図 1 b）するバンド構造（ディラック交差）が現れます。ディラック交差する電子状態はエッジに局在し、不純物や他の電子との散乱などによる擾乱に対して頑強な特異な状態であるため、通常の固体中の電子では不可能な物性の発現が可能になります。最近、ディラック交差が結晶内部に生じるディラック半金属^{注3)}（参考図 1 b）といわれる新規なトポロジカル物質が発見され、基礎物理の解明ならびに新機能の探索に向けた広範な研究が活発に行われています。

これまでのトポロジカル物質研究の対象は主として基底状態^{注4)}であり、励起状態^{注4)}および非平衡状態^{注4)}におけるトポロジカル物性は依然未開拓な研究領域です。これらの状態を生成するための最も有効な手段は「光」であり、レーザー照射によって電子状態を制御することによって新奇なトポロジカル状態を創成する研究が行われています。

本研究では、理論物理ならびに計算物理の観点から、光制御によるディラック半金属状態の創成の可能性を追求しました。具体的には、通常の物質である半導体量子井戸^{注5)}に強いレーザーを照射して、光と電子が強く結合して一体化するフロケ状態^{注6)}といわれる量子状態を誘起し、レーザー電場の強度を制御することによってディラック半金属（フロケディラック半金属）相を創成し得る条件を調べました。さらに、これに伴って量子井戸のエッジに特異な電子状態が発現するか否かを調べました。

研究内容と成果

本研究では、強束縛近似という結晶の電子状態を表すモデルを基に、数値計算を行いました。その結果、半導体量子井戸に直線偏光した連続波レーザー^{注7)}を照射し、ac シュタルク効果^{注8)}という量子力学的効果を利用することで、エネルギーバンド構造に円錐交差を有するフロケディラック半金属相が形成されることを見出しました（参考図 2）。計算結果は、数学的に導出した円錐交差を形成するための条件と整合しました。この際、バンド構造に（1meV 程度の）微小なバンドギャップを有して反転する近似的な円錐交差が付随して発現することも分かりました（参考図 2）。この近似的な円錐交差は、レーザー照射によって当該系の空間反転対称性（パリティ対称性）^{注9)}が破れることに起因して現れ、レーザー強度がある一定の領域内で安定に存在することが分かりました。さらに、結晶内にこのような円錐交差もしくは近似的な円錐交差が現れる場合のエッジの電子状態のエネルギーバンドを計算すると、明確な境界条件依存性（すなわち、レーザー電場の方向に対するエッジの方向依存性）があることが判明しました。具体的には、両者の方向が平行である場合、円錐交差点および近似的な円錐交差点を接続する線分状の特異なエネルギー準位がバンドギャップ内に現れました（参考図 3a）。一方、垂直な場合、エネルギー準位は生じませんでした（参考図 3b）。

このような円錐交差ならびに近似的な円錐交差、さらにエッジのエネルギー準位が現れるか否かの詳細を理解するために、レーザーによって物質内に誘起される電気分極^{注10)}を導入し電子運動量に対する分布を計算しました。電気分極の分布は、空間反転対称性の破れによる電子状態のパリティ混合^{注9)}の程

度に対応します。レーザー強度に対する電気分極の正負の分布の変化が、フロケ状態におけるトポロジカル秩序の変化に一致することを示すことができました。さらに、電気分極がゼロになる軌跡を調べると、このエッジ方向への射影がまさにエッジの特異なエネルギー準位の発現領域に一致し、上記の境界条件依存性の起因を説明することができました。

以上のように、本研究では、レーザーによる電子状態の量子制御によるフロケディラック半金属相創成の可能性を理論的に示し、これに関連するエッジの特異な電子状態の存在を予見しました。さらに、レーザー誘起による電気分極を導入して、当該系のトポロジカルな物性を統一的に理解することに成功しました。

今後の展開

今回の研究結果は、光制御によって2次元系である半導体量子井戸内にトポロジカルな半金属相を創成することができる可能性を示したのですが、同様な枠組みを3次元系半導体に拡張することもできます。当該系に比べて電子の運動の自由度が増えるため、光制御によって、ディラック半金属のみならず、ワイル半金属^{注3)}や線ノード半金属^{注3)}など多様性に富んだトポロジカル半金属を創成できると考えられます。さらに、結晶のエッジにも新規な電子状態が発現する可能性があります。一方、フロケディラック半金属相創成のためには高強度レーザー照射が必要になります。実験による検証を行ううえでも、高密度で励起された電子間の多体相互作用を考慮した量子ダイナミクス^{注11)}理論模型の構築と、より定量的なレベルでの評価が要求されます。理論と実験の緊密な連携によって、フロケ状態を介したトポロジカル物性に関してさらに豊穡な物理的知見が開拓されることが期待されます。

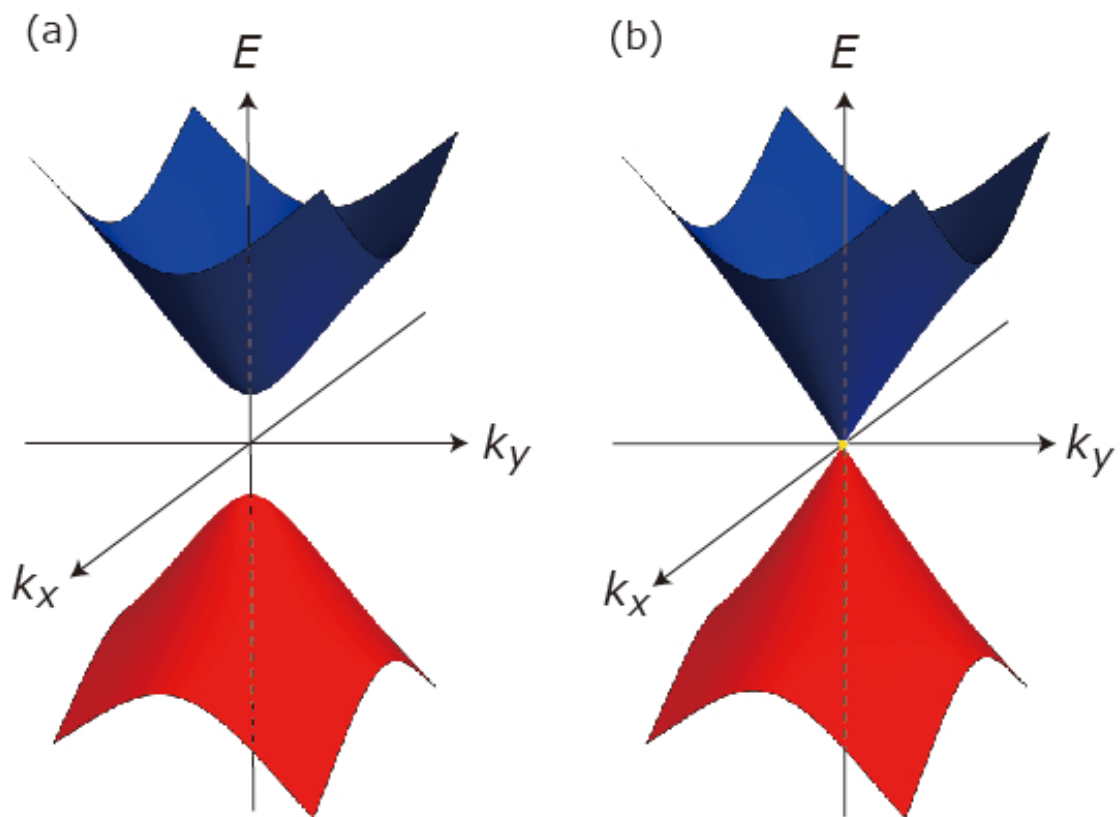


図1. 2次元における運動量(k_x , k_y)に対するエネルギーバンド E の模式図。
 (a) 絶縁体のバンド図。バンドギャップを隔てて二葉のバンドが存在する。
 (b) 円錐交差するバンド図。二葉のバンドは原点(黄色の丸点)で円錐交差します。ディラック半金属は結晶内部でこのようなエネルギーバンド構造を持つ。

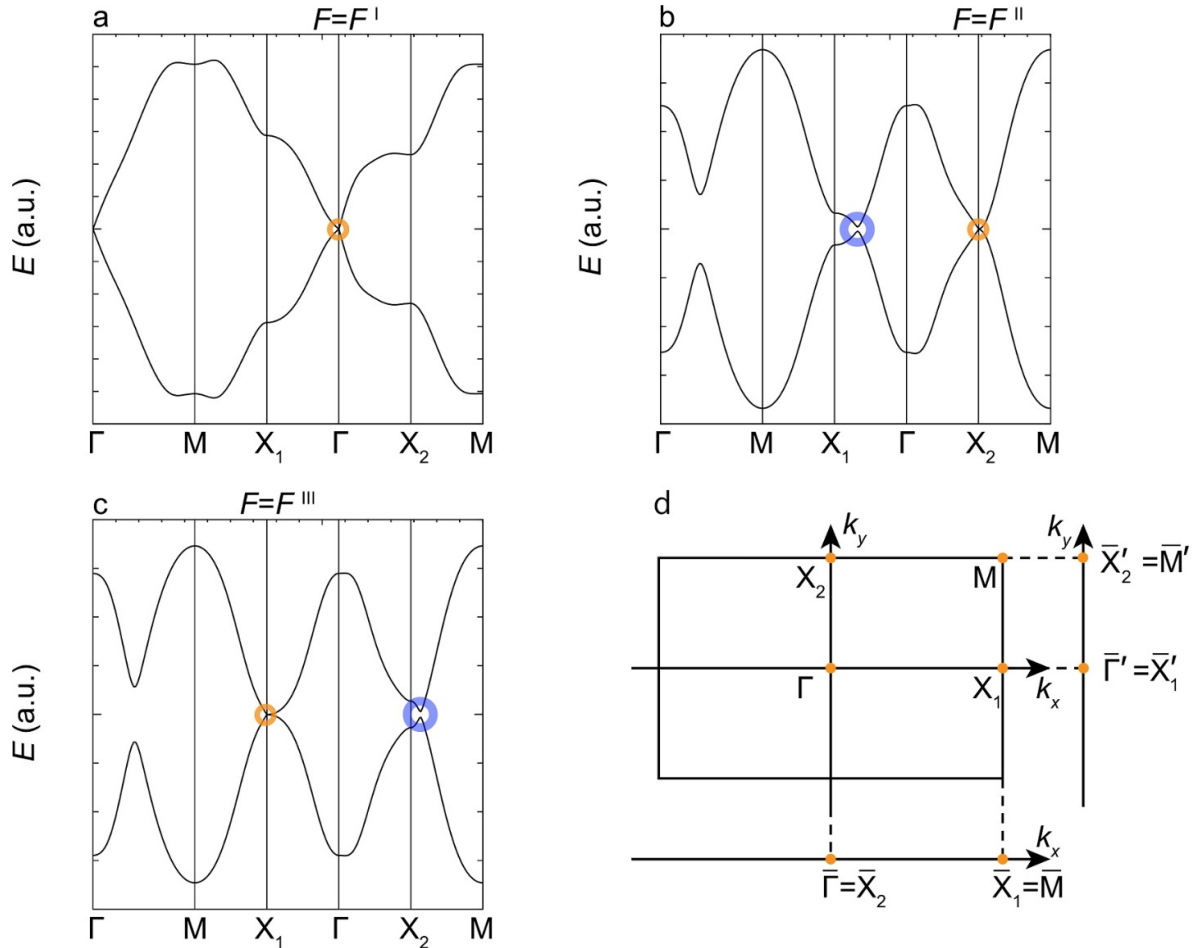


図 2. 電子の 2 次元運動量(k_x , k_y)に対する半導体量子井戸のフロケ状態のエネルギーバンド E (理論計算値)。

- (a) レーザー電場の振幅 $F=1.92\text{MV/cm}$ 場合のエネルギーバンド。伝導帯および価電子帯という二葉のバンドに由来するエネルギーバンドが、運動量が Γ 点にあるとき円錐交差 (オレンジリングで表示) することが示されている。運動量が Γ 点などの対称性の高い点にある位置に関してはパネル(d)を参照。
- (b) パネル(a)と同様。ただし、 $F=1.05\text{MV/cm}$ 。運動量が X_2 点にあるとき円錐交差 (オレンジリングで表示) が生成される。また、運動量が X_1 点と Γ 点の間に近似的な円錐交差 (ブルーリングで表示) が形成されることが分かる。
- (c) パネル(a)と同様。ただし $F=0.927\text{MV/cm}$ 。運動量が X_1 点にあるとき円錐交差 (オレンジリングで表示) が生成される。また、運動量が X_2 点と M 点の間に近似的な円錐交差 (ブルーリングで表示) が形成されることが分かる。
- (d) 結晶の対称性が高い点 X_2 , Γ , M および X_1 の 2 次元運動量空間での位置。 k_x 軸上への射影は、 $\bar{\Gamma} = \bar{X}_2$ および $\bar{X}_1 = \bar{M}$ として表示。 k_y 軸への射影は、 $\bar{\Gamma}' = \bar{X}_1'$ および $\bar{X}_2' = \bar{M}'$ として表示。

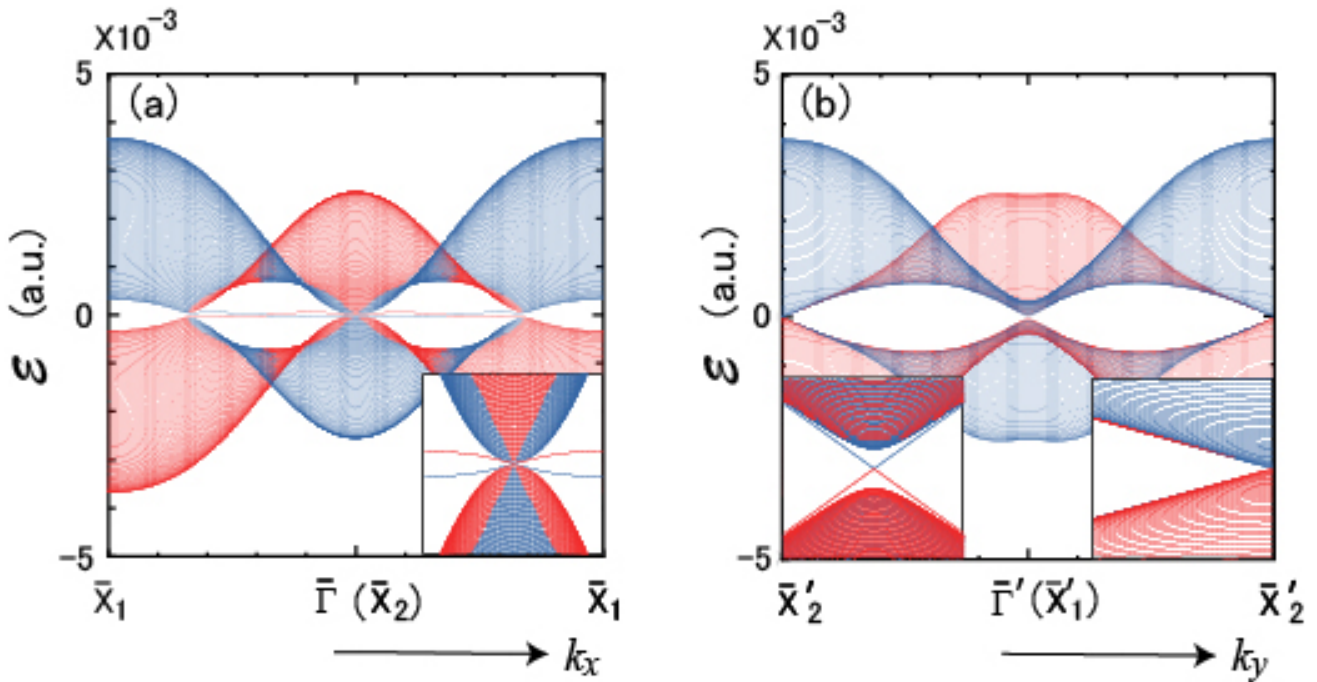


図3. $F=1.05\text{MV/cm}$ におけるエッジのフロケ状態のエネルギーバンド。

- (a) x 軸方向（レーザー電場の印加方向と平行な方向）のエッジにおけるエネルギーバンド。青および赤のエネルギー帯はそれぞれ伝導帯および価電子帯由来のバンド構造を表す。両バンド間のエネルギーギャップ内のエネルギー値 0 近傍に、円錐交差点および近似的な円錐交差点を接続する直線状のエネルギー準位が現れていることが分かる。インセットは $\bar{\Gamma}(\bar{X}_2)$ 点近傍の拡大図。
- (b) y 軸方向（レーザー電場の印加方向と垂直な方向）のエッジにおけるエネルギーバンド。エネルギーギャップ内の $\bar{\Gamma}'(\bar{X}'_1)$ 点近傍に微細なディラック交差を有するエネルギー準位のみがわずかに確認でき、そのほかの領域では準位が生じていないことが分かる。左および右のインセットはそれぞれ $\bar{\Gamma}'(\bar{X}'_1)$ 点近傍および $\bar{X}'_2(\bar{M}')$ 点近傍の拡大図。

用語解説

注1) トポロジカル絶縁体

エネルギーバンドがバンドギャップで隔てられていて電子が自由に運動できない物質群を絶縁体と言う。一方、エネルギーバンドが電子の運動量のある領域で反転することにより、結晶内部はバンドギャップで隔てられた絶縁体相を示すが、結晶表面には電気伝導が可能な金属的な振る舞いを示す特異な電子状態が発現する物質群をトポロジカル絶縁体という（参照：注2）トポロジカル秩序）。

注2) トポロジカル秩序

数学に位相幾何学（トポロジー）という分野があり、何らかの空間を連続変形（伸ばしたり縮めたり曲げたりはするが、切ったり貼り付けたりはしない変形）したときの不変的な性質（位相不変性、トポロジカル不変性）を研究対象とする。例えば、メビウスの輪は一つの面と一つの辺から成るので、二つの辺と表裏二つの面から成る通常のリボンとはトポロジーでは区別される。また、空間内に穴が一つあるコーヒークップはドーナツ状に連続変形できるので、両者はトポロジーでは同等な空間となる。エネルギーバンドを電子の運動量の空間とみなすと、バンド反転に起因して運動量の変化に対する特異な振る舞いが現れる。この特異性は位相不変性を表示するトポロジカル指数という整数で表すことができる。この指数に対応して現れる物性をトポロジカル秩序と言う。通常の絶縁体のト

ポロジカル指数は0だが、トポロジカル絶縁体では1となり、明確に区別化されて理解される。

注3) ディラック半金属、ワイル半金属、線ノード半金属

バンドギャップはないが、交差しないエネルギーバンドを結晶内部に持つ物質群を半金属と言う。一方、結晶内部にエネルギーバンドの交差が現れる物質群をトポロジカル半金属と総称する。結晶の様々な対称性（物質構造に由来する幾何学的な対称性の他に時間的ならびに空間的な対称性など）に応じてバンド交差の様子が異なり、ディラック半金属、ワイル半金属、線ノード半金属と区別される。ディラック半金属は上記の対称性が高い物質で、現れるバンドは円錐交差するが、時間的にもしくは空間的な対称性が低下するとワイル半金属に転移してバンドは複数の円錐交差に分裂する。線ノード半金属はバンドが点交差ではなく線上に交差する。

注4) 基底状態、励起状態、非平衡状態

エネルギー的に最も安定な量子力学的な状態を基底状態と言う。それ以外のエネルギー的に高い状態を励起状態といいます。基底状態にある物質に光や電子線などを照射して励起状態への遷移を誘起すると、系は再び基底状態に戻るまで様々な過渡的な時間的変化を示します。このような動的な状態を非平衡状態といいます。

注5) 半導体量子井戸

半導体をバンドギャップが異なる別の半導体でサンドウィッチ状に接合したヘテロ構造を半導体量子井戸と言う。両サイドが挟まれた井戸層にある半導体中の電子は擬2次元的に閉じ込められるため、元の3次元半導体とは際立って異なる物性を示す。例えば、GaAs/AlAs や HgTe/CdTe は半導体量子井戸の典型的な物質である。

注6) フロケ状態

時間的に変動する外場（例えば、レーザーや変動磁場など）下で運動する粒子のエネルギーは保存されないが、この外場が時間的な周期性を有している場合、エネルギーに替わって擬エネルギーといわれる物理量が保存することが知られている（フロケの定理）。このような系における量子力学的な状態をフロケ状態と呼ぶ。このような時間的周期性を有する外場の一例として、連続波レーザー（参照：下記注7）がある。レーザー強度が大きい時、光と電子は強く結合することによって一体化し、電子はあたかも光の衣を纏った状態（このようなフロケ状態を（光）着衣状態と言う）として振舞う。

注7) 連続波レーザー

レーザーはパルス幅（電磁波の包絡線の振幅が有限な時間幅）によって連続波レーザーとパルスレーザーに大別される。連続波レーザーは一般にはパルス幅が数ピコ秒（1ピコ秒は 10^{-12} 秒）より長い場合で、単色の周波数をもった電磁波が文字通り連続して伝搬する。それ以外の数フェムト秒（1フェムト秒は 10^{-15} 秒）から数ピコ秒程度の短いパルス幅をもつレーザーをパルスレーザーと言う。

注8) ac シュタルク効果

連続波レーザーのような時間により変動する電場を印加すると、電子は一定の時間周期で基底状態と励起状態との間の遷移を繰り返す（この現象はラビ振動と呼ばれ、電場振幅に比例するラビ振動数という特性振動数を有する）。このような振動パターンに対応する擬エネルギー（参照：注6）フロケ状態）は電場印加前のエネルギーに対してラビ振動数分だけ二重に分裂（ac シュタルク分裂）する。これを ac シュタルク効果と言う。

注9) 空間反転対称性（パリティ対称性）

粒子の空間の座標 x を $-x$ へ反転する操作を空間反転といいます。この操作によって運動量も反転する。エネルギーはこのような座標と運動量の関数になるので、これに空間反転操作を行ったとき、エネルギーが不変の場合を空間反転対称性（パリティ対称性）不変と言う。この時、量子状態は偶数も

しくは奇数によって区別化され、対応するパリティという量子数 (+1 もしくは-1)が存在する。空間反転対称性が破れる場合、その量子状態ではパリティはもはや保存されず、混合 (パリティ混合) されたものになる。

注10) 電気分極

電氣的に中性な物質に電場を印加すると電氣的な特性が変化して、電子の空間分布はイオン殻に対して電場の逆方向にずれて電気双極子モーメントというものを形成する。これを結晶全体に平均した物理量を電気分極と呼び、印加電場の大きさに比例する。

注11) 量子ダイナミクス

平衡状態 (定常状態) に時間的に変動する外場が印加されるとき、系の量子力学的状態 (非平衡状態) は励起過程や緩和過程などを経由して時間変化する (参照: 注 4) 基底状態、励起状態、非平衡状態)。このような系の時間変化を記述する理論的枠組みを量子ダイナミクス (量子動力学) と言う。

研究資金

本研究は、科研費プロジェクト (Grant No. JP19K03695) の一環として実施されました。

掲載論文

【題 名】 Edge states of Floquet–Dirac semimetal in a laser-driven semiconductor quantum-well.

(レーザー駆動半導体量子井戸におけるフロケディラック半金属のエッジ状態)

【著者名】 Zhang, B., Maeshima, N. & Hino, Ki.

【掲載誌】 Scientific Reports

【掲載日】 2021 年 2 月 3 日

【DOI】 10.1038/s41598-021-82230-3

問い合わせ先

【研究に関すること】

日野 健一 (ひの けんいち)

筑波大学数理物質系 教授

URL: https://www.ims.tsukuba.ac.jp/~hino_lab/index.html

【取材・報道に関すること】

筑波大学広報室

TEL: 029-853-2040

E-mail: kohositu@un.tsukuba.ac.jp