

物質の内部に隠れたトポロジーの直接観測に成功 ～「物質のトポロジー」は見かけより中身が大事～

1. 発表者：

黒田 健太（東京大学物性研究所 極限コヒーレント光科学研究センター 助教）
越智 正之（大阪大学大学院理学研究科 物理学専攻 助教）
北澤 英明（物質・材料研究機構 先端材料解析研究拠点 副拠点長）
室 隆桂之（高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 主幹研究員）
芳賀 芳範（日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター 研究主幹）
辛 埴（東京大学物性研究所 極限コヒーレント光科学研究センター 教授）
有田亮太郎（理化学研究所 計算物質科学研究チーム 計算物質科学研究チーム チームリーダー）
近藤 猛（東京大学物性研究所 極限コヒーレント光科学研究センター 准教授）

2. 発表のポイント：

- ◆これまで物質内部に潜在するトポロジー（注1）は、物質の表面という「見かけ」だけの観測で非直接的に判断されてきました。
- ◆本研究で、「見かけ」の観測を必要としない、物質の内部に隠れたトポロジーの直接的な観測に世界で初めて成功しました。
- ◆今回確立した実験手法は、物質本来のトポロジーを曖昧なく決定することができるため、多彩なトポロジカル電子相の発見に繋がるのが期待されます。

3. 発表概要：

東京大学物性研究所（所長 瀧川仁）の黒田健太助教、近藤猛准教授を中心とする研究グループは、理化学研究所創設物性科学研究センターの有田亮太郎チームリーダー、大阪大学大学院理学研究科の越智正之助教、高輝度光科学研究センターの室隆桂之主幹研究員、物質・材料研究機構の北澤英明副拠点長、日本原子力研究開発機構の芳賀芳範研究主幹らの協力のもと、セリウムモノプニクタイト（注2）と呼ばれる物質群において、物質内部に隠れたトポロジーの決定に世界で初めて成功しました。

2016年ノーベル物理学賞の対象となった物質に潜在するトポロジーによって区別されたトポロジカル電子相の研究は世界中で爆発的に行われています。トポロジカル電子相では、物質の内部（中身）に隠れたトポロジーを反映して、物質表面（見かけ）にトポロジカル電子相特有な電子状態が発生します。そのため、物質が持つトポロジーは見かけだけで判断されてきました。

同研究グループは、物質のトポロジーを見かけでなく中身で判断するのに適した光である軟X線を用いることで、物質がトポロジカル電子相へ変化していくトポロジカル相転移の観測に成功しました。本研究結果により、見かけに頼らず物質内部に隠れた本質的なトポロジーを直接的に決定することが可能となるため、今後この手法を用いることで、さらに多彩なトポロジカル電子相発見に繋がるのが期待されます。

この研究成果は、Physical Review Letters 誌 オンライン 2月13日版（米国東部時間）に掲載される予定です。

4. 発表内容：

① 研究の背景

物質に潜在するトポロジーによって区別されたトポロジカル電子相の研究は、近年のトポロジカル絶縁体（注3）と呼ばれるトポロジカル電子相の発見に繋がるなど、物性物理の新たな潮流となっています。トポロジカル電子相では光速で運動する（質量がゼロになる）相対論的な粒子が実現しているため、トポロジカル電子相の研究はその性質を利用したデバイス応用だけでなく宇宙創成の解明に繋がるのが期待されています。この幅広い可能性から、トポロジカル電子相の研究は物性物理学で現在最もホットなテーマとなっており世界中で爆発的に行われています。トポロジカル電子相の特徴として、物質のトポロジーを反映して、物質表面でトポロジカル電子相特有の電子状態が発生します。これを原則として、物質表面という見かけだけで物質中に潜在するトポロジーの決定が行われてきました（図1）。しかし、物質の表面は試料が原子レベルで均一であることなどの極めて厳しい制約があり、見かけが実際のトポロジーを反映しない場合があります。そのため、外見だけで判断したトポロジーには曖昧さがありました。そこで、見かけでなく物質内部の中身を直接的に観測して明確にトポロジーを決定できる実験手法が長く望まれていましたが、これまで実現していませんでした。

② 研究内容

今回、東京大学物性研究所の黒田健太助教、近藤猛准教授らを中心とする研究グループは、大型放射光施設 SPring-8（注4）から得られる高輝度の軟 X 線領域の光と角度分解光電子分光（注5）を組み合わせた軟 X 線固体分光ビームライン BL25SU を用いて、セリウムモノプニクタイトと呼ばれる物質群の電子構造を詳細に調べることで、物質が通常物質相（非トポロジカル電子相）からトポロジカル電子相へ転移するトポロジカル相転移の直接観測に成功しました。その結果、物質中に埋もれた本質的なトポロジーの直接的な決定に世界で初めて成功しました。

トポロジカル相転移の発現機構は理論的にはスピン軌道相互作用（注6）と呼ばれる相対論効果によって記述されます。相対論効果が弱く、かつ物質が非トポロジカル電子相である状態から、相対論効果を強くすると電子構造が変化して、ある瞬間にトポロジカル電子相へ移ります（図1）。一般に元素の原子番号が大きくなるにつれて、スピン軌道相互作用は強くなるため、この現象は原子番号の大きな元素を含んだ物質で発生します。

そこで、同研究グループは、プニクトゲン元素をリン (P) からビスマス (Bi) まで含んだ、セリウムモノプニクタイト CeX (X: P, As, Sb, Bi) 物質群の系統的な電子構造の観測を行ってプニクトゲン元素による相対論効果に着目しました。今回、SPring-8 にある軟 X 線固体分光ビームライン BL25SU で新たに導入された極めて高効率に物質内の電子状態を観測可能な角度分解光電子分光装置を用いるとともに、高融点・高蒸気圧の CeX 物質群の試料については物質・材料研究機構、および日本原子力研究開発機構で育成された純良単結晶を用いることで、この研究が可能となりました。その結果、プニクトゲン元素の相対論効果が強くなることによりトポロジカル電子相へ移り変わるトポロジカル相転移の観測に成功しました（図2）。これにより、CeSb から CeBi の間でトポロジカル相転移が発生しており、CeBi がトポロジカル電子相にある物質だということを発見しました。特に、表面（見かけ）の観測では CeSb はトポロジカル電子相として予想されておりましたが、今回行った中身の観測により非トポロジカル電子相であると決定されました。従来の測定では、トポロジカル

電子相を反映した表面という見かけに頼った間接的な手法に限られていました。これに対して、本研究で軟 X 線を利用して捉えたトポロジカル相転移は物質内部で発現する機構です。これにより、物質の見かけに頼らず中身を直接見ることで物質中に潜在する本質的なトポロジーを決定することが可能になるため、極めて重要な結果であると言えます。

③ 社会的意義・今後の予定など

トポロジカル電子相の研究は、物性物理の中で現在最も注目されている研究テーマです。トポロジカル絶縁体だけにとどまらず、質量ゼロの粒子を発現させる新たなトポロジカル電子相が発見されてきています。本研究で観測した相対論効果によるトポロジカル相転移は、トポロジカル物質の最も根底にある機構です。この機構の直接観測を可能にした本研究成果は、これらすべてのトポロジカル物質群に適用することができます。これにより、今までにない新たなトポロジカル電子相の発見や本質的な振る舞いに近づくことで革新的な進展が期待されます。

なお、本研究は、文部科学省の光・量子融合連携研究開発プログラム「光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発」（研究代表者：東京大学物性研究所 辛埴教授）の支援を受けて実施されました。

また日本学術振興会の科学研究費である、若手研究 B（課題番号 17K14319）、若手研究 A（課題番号 16H06013）、新学術領域（研究領域提案型）「トポロジーが紡ぐ物性科学のフロンティア」課題番号 15H05852（研究代表：川上則雄）における研究計画班「A01: 強相関物質のトポロジカル相」課題番号 15H05883（研究代表者：前野悦輝）と公募研究「直接バンド観察で開拓する新奇強相関トポロジカル量子相」課題番号 16H00979（公募研究代表者：近藤猛）の一環として行われました。

5. 発表雑誌：

雑誌名：「*Physical Review Letters*」

論文タイトル：Experimental determination of topological phase diagram in Cerium monopnictides

著者：Kenta Kuroda*, M. Ochi, H. S. Suzuki, M. Hirayama, M. Nakayama, R. Noguchi, C. Bareille, S. Akebi, S. Kunisada, T. Muro, M. D. Watson, H. Kitazawa, Y. Haga, T. K. Kim, M. Hoesch, S. Shin, R. Arita, and Takeshi Kondo (*:責任著者) (2018/2/28, 著者名追記)

6. 問い合わせ先：

【研究内容に関すること】

国立大学法人 東京大学物性研究所 極限コヒーレント光科学研究センター

助教 黒田 健太 (くろだ けんた)

TEL: 04-7136-3367

E-mail: kuroken224@issp.u-tokyo.ac.jp

【報道に関すること】

国立大学法人 東京大学物性研究所 広報室

TEL: 04-7136-3207

E-mail: press@issp.u-tokyo.ac.jp

国立大学法人 大阪大学理学研究科 庶務係
TEL : 06-6850-5280 E-mail : ri-syomu@office.osaka-u.ac.jp

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

公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用推進部 普及情報課
TEL : 0791-58-2785 FAX : 0791-58-2786
E-mail : kouhou@spring8.or.jp

国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構 広報部報道課
TEL : 03-3592-2346 FAX : 03-5157-1950
E-mail : sato.yoshiaki@jaea.go.jp

7. 用語解説 :

(注1) トポロジー :

連続的に変形できるか否かにより形を分類する数学の学問。一例としてよく挙げられるのがドーナツとマグカップである。これらはいずれも穴の数が1つであり、連続的に変形させたときに互いに行き来することができるので同じ分類になる。一方で、みかんには穴が無いためマグカップやドーナツへと連続的に変形することはできず、異なる分類になる。

(注2) セリウムモノプニクタイト :

セリウム (Ce) と周期表で第15族元素に対応するプニクトゲン (リン : P、ヒ素 : As、アンチモン : Sb、ビスマス : Bi) との化合物の種類の一つである。特に、プニクトゲンを X と表記した場合に、CeX として表記するものを指す。

(注3) トポロジカル絶縁体 :

物質中の電子状態のトポロジーを反映して、中身は電気を通さない絶縁体であるが、表面では電気を通す金属となる特殊な物質のこと。

(注4) 大型放射光施設 SPring-8 :

兵庫県の播磨科学公園都市にある世界最高性能の放射光を生み出す理化学研究所の施設。SPring-8 の名前は Super Photon ring-8 GeV (ギガ電子ボルト) に由来。電子を光とほぼ等しい速度まで加速し、電磁石によって進行方向を曲げた時に発生する、強力な電磁波 (放射光) を用いて幅広い研究が行われている。

(注5) 角度分解光電子分光 :

物質に光を照射して飛び出す電子 (光電子) を観察することで、物質内の電子状態を観察する実験手法。光が伝搬する波であると同時に粒の集合体であるとして、光の概念を覆したアインシュタインの発想 (1921 年のノーベル賞受賞理由) に基づいている。その光電子の

運動エネルギー、および脱出角度を調べることによって、物質中の電子のエネルギーと運動量を直接観測できる。

英語表記 Angle-resolved photoemission spectroscopy の頭文字から ARPES とも呼ばれる。

(注6) スピン軌道相互作用:

原子核の周りを回転運動する電子は軌道角運動量を持つ。また、電子は自転に対応する固有の角運動量を持っており、それをスピンと呼ぶ。電子の回転運動により磁場が発生して、この磁場がスピンと結合する事が出てくる軌道角運動量とスピンの内積で比例するエネルギー項。

8. 添付資料 :

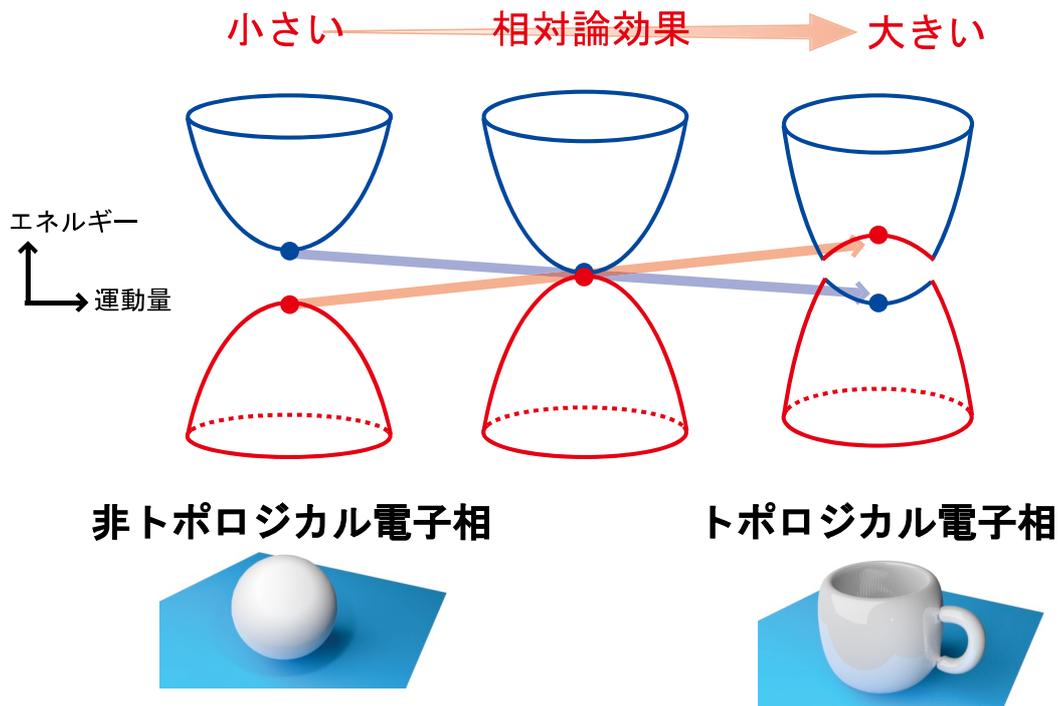


図1 : 本研究で観測された相対論効果によるトポロジカル相転移。

相対論効果の大きさに依存した電子構造の変化。相対論効果が充分大きくなると電子構造の反転が発生する。この反転が起源となり、物質内部のトポロジーが変化して非トポロジカル電子相からトポロジカル電子相へ転移する。通常、相対論効果が小さく反転が起こる前が非トポロジカル電子相となり、相対論が大きくなり反転が起こったあとがトポロジカル電子相となる。

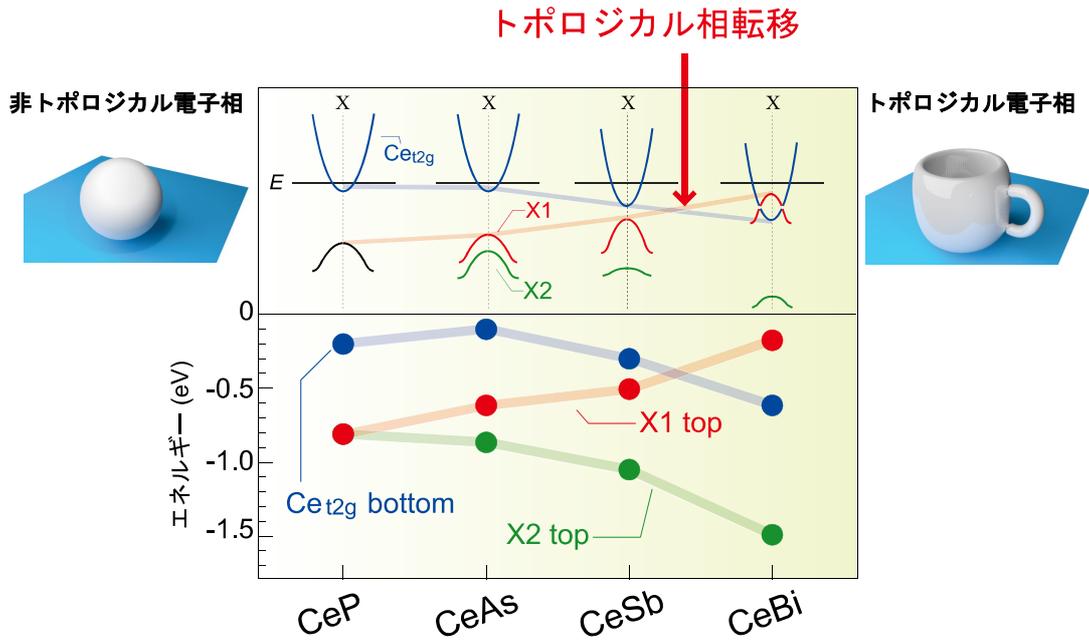
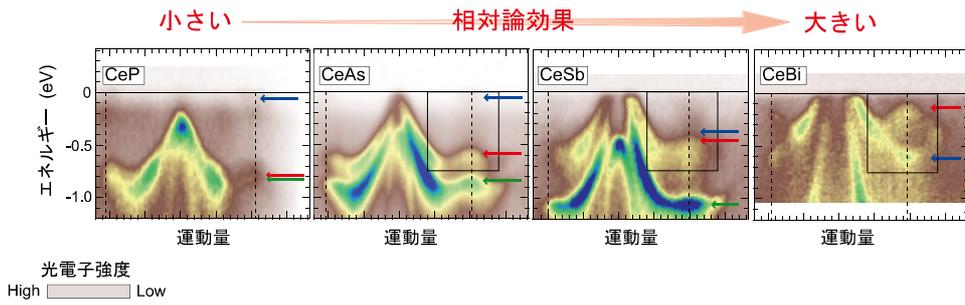


図2：軟 X 線を用いた光電子分光で観測されたセリウムモノプникタイトの物質群の電子構造とトポロジカル相転移。プникトゲン元素がリン (P) からビスマス (Bi) になるにつれて相対論効果が大きくなる。CeP から CeBi まで系統的に電子構造を観測する事で、その相対論効果による電子構造の変化に注目した。その結果、CeSb から CeBi になるとバンドの反転がおりトポロジカル相転移が発生していることがわかった。この物質群で最も相対論効果の大きい CeBi がトポロジカル電子相であることがわかった。