

量子物質のトポロジカル相

東京理科大学 先進工学部 物理工学科 助教 おくがわ りょう 奥川 亮

1. はじめに

物理学においては、「相」という用語は物質の性質を特徴づけるためによく登場します。最も有名な例は、固相・液相・気相といった物質の三態と呼ばれるものだと思います。これらの相は温度や圧力などによって、互いに变化して大きく性質を変えます。例えば、冷凍庫に液体の水を入れたら固体の水になることは誰しもが知る事実です。科学的には、こうした相の変化を相転移と呼びます。このように相が変わると、物質の性質は大きく変化します。物理学では多くの場合、身の回りの物質の性質は相を通じて分類されます。よく知るところで言えば、金属や絶縁体も相です。金属は電流を通す物質であり、絶縁体は電気を通さない物質ですが、これらはそれぞれ物質が金属相や絶縁体相にあるとも捉えることができます。実際、同一の物質でも状況が変われば、金属相から絶縁体相（あるいはその逆）へ相転移することだってありえます。こうした物質の様々な性質を捉えるためには、相というものを理解することが重要です。特に、金属相や絶縁体相を量子力学的に見ることで、トポロジカル相と呼ばれる相が存在することが近年わかってきました。本稿では、その「トポロジカル相」にある物質、すなわちトポロジカル物質についていくつか紹介します。

2. トポロジカル絶縁体

それでは、トポロジカル相とは何でしょうか。もしかすると2016年のノーベル物理学賞がトポロジカル相の理論的発見に与えられていることから、耳にしたことがあるかもしれません。現在では、理論的・実験的進展により、トポロジカル相といっても様々な種類があることがわかっています。ここでは、まず「トポロジカル絶縁体」と呼ばれるものから始めましょう。一旦「トポロジカル」という言葉は置いておいて、トポロジカル絶縁体自体の興味深い性質を紹介します。

トポロジカル絶縁体とは、物質内部では絶縁体的であり、物質表面では金属的である物質のことです。こ

れだけを聞くと、単に絶縁体の表面に金属を張り付けたものかと思われそうですが、そうではありません。いまトポロジカル絶縁体を半分に切ることを考えましょう。そうすると、その断面は新しい表面になります。奇妙なことに、断面は元々物質内部で絶縁体的であったのにも関わらず、そこから生じた表面は金属になるのです。

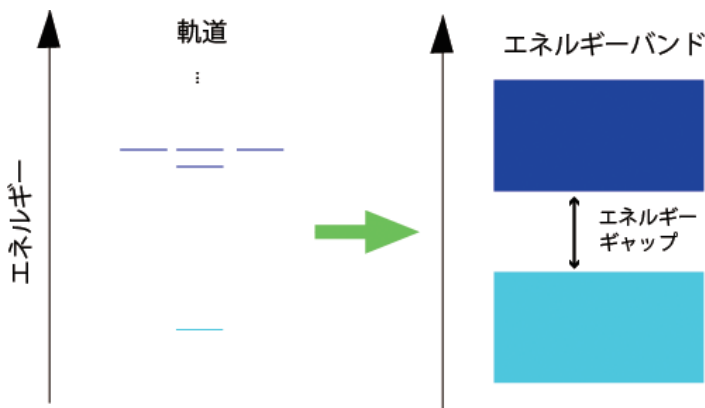
それでは、トポロジカル絶縁体の表面における金属的な性質というのは通常の金属とはどう違うのでしょうか。一般に電流の担い手は物質中の電子です。興味深いことに、トポロジカル絶縁体表面の電子は質量ゼロの粒子として振る舞うのです。これはディラック粒子ともよばれます。この不思議な性質を利用して、トポロジカル絶縁体は高周波デバイスや熱電変換素子など数多くの応用が期待されています。トポロジカル絶縁体に限らず、他のトポロジカル相でも表面の電子が奇妙な振る舞いを示すことが知られています。そのため、トポロジカル物質は通常の絶縁体とも金属とも異なる特性を持ち、近年精力的に研究が行われています。

3. バンド理論

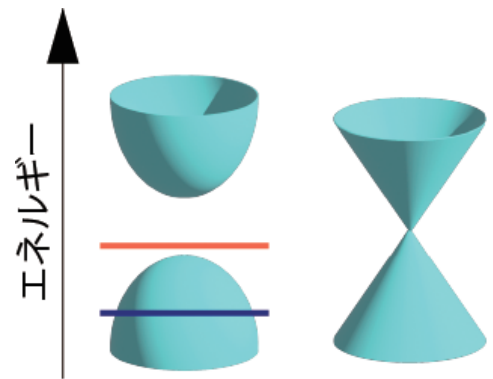
物質が金属的か絶縁体的であるかはどのように決まるのでしょうか。ここでは、トポロジカル絶縁体を理解するための理論としてバンド理論というものを紹介しましょう。

物質が金属であるとは、電流を流せるということですから。電流は電子が物質中を動くことで生じます。つまり、電子が物質中を動き回れる状態であることが重要になってきます。そうした固体中の電子の状態を量子力学から記述するのがバンド理論です。

最初に、物質を構成する原子1つについて考えてみましょう。原子は原子核と電子からなり、電子は(原子)軌道と呼ばれるところに入っています。入る軌道ごとに電子のエネルギーが変わり、これらは運動エネルギーと電子や原子核の電荷に由来した位置エネルギーで決まります。**【図1】**の左のようにこれらのエネルギーは量子力学から計算され、とりうるエネル



【図1】 軌道のエネルギーとエネルギーバンド



【図2】 通常の物質とトポロジカル絶縁体表面のバンド構造の例

ぎは離散的になります。一つの軌道に入れる電子の数は決まっています、一般にエネルギーの低い順に軌道は占有されます。

次に、複数の原子が集まるとどうなるでしょうか。原子同士が近づくことで軌道同士が重なり合い、新しい軌道が生じます。新しくできた軌道のエネルギーは元のものとは異なり、再びエネルギーの低い軌道から順番に電子が入っていくことになります。このとき、電子は空いている軌道を通じて移動することができます。しかしながら、エネルギーの低い電子は、エネルギーの離れた高い軌道には簡単には移動しません。これは、1階にいる人が10階に上がるのと同じように、動くための何らかの労力が必要であることを考えれば想像しやすいと思います。

固体中にはアボガドロ数以上の原子が存在します。すると【図1】の右のように、数多くの軌道が集まったエネルギー領域が現れます。それらは帯（バンド）のような形をなし、エネルギーバンドまたは単にバンドと呼ばれます。ちなみに、バンドの間の電子が入る状態が無い領域をエネルギーギャップと呼びます。前に述べたように、軌道に入れる電子の数が決まっていることから、あるエネルギーバンドに入れる電子の数も決まっています。そのため、エネルギーバンドの中に空いている状態があるかどうかで電子が移動できるかが決まります。それが、金属か絶縁体を決めるキーなのです。

いまから金属と絶縁体の違いについて、バンド理論の観点から説明します。【図2】の左のようなエネルギーバンドを有する物質があるとしましょう。このとき、電子がエネルギーの低い順からバンドに入っていく、青線の下まで占有されるとします。そして、それよりも上は空いているとします。【図2】の左の場合、エネルギーバンドが途中まで占有されています。

いま物質中に電界（電場）がかかったとしましょう。このとき、すぐ上のエネルギー領域が空いている電子は、そちらにたやすく移動することができます。したがって、電流を流すことができるので、このような物質は金属ということになります。一方で、赤線より下が占有されているという場合には話が変わります。エネルギーの低いバンドが完全に占有されており、空いているバンドともエネルギーギャップによって離れています。ゆえに、電子は簡単には移動できません。結果として、この物質は絶縁体なのです。絶縁体では、全て占有されているバンドを価電子バンド、空いているバンドを伝導バンドと言います。

バンド理論を説明したので、トポロジカル絶縁体のエネルギーバンドを考えてみましょう。実際、トポロジカル絶縁体の内部は、【図2】の左のようなバンド構造をもつ絶縁体となっています。一方、金属的な表面はどうでしょうか。実は、【図2】の右のようなエネルギーギャップの無い構造を持っているのです。このようなエネルギーバンドの場合、電子がバンドの空いている領域にたやすく移動できます。このバンド構造がトポロジカル絶縁体の表面の特徴なのです。

4. トポロジーとトポロジカル相

ここまでは、トポロジカル絶縁体のエネルギーバンドの構造について見てきました。そもそも「トポロジカル」という名前の由来は何なのでしょう。そして、なぜ物質内部では絶縁体で、表面では金属なのでしょう。これについて考えていくことにしましょう。

4.1. トポロジカルとは？

「トポロジカル」という言葉は、数学のトポロジー

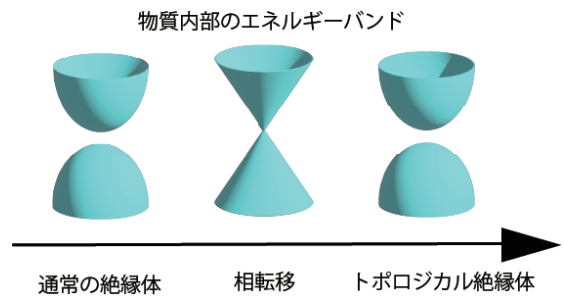


【図3】トポロジーを用いた形状の区別

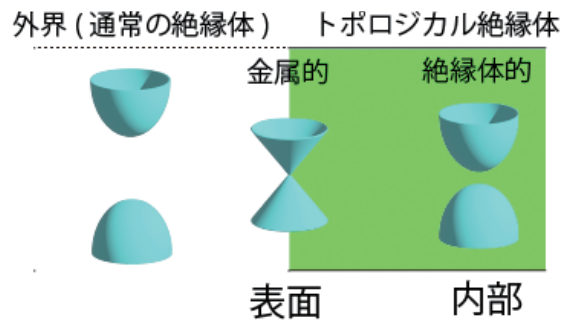
(位相幾何学) から名付けられています。トポロジーとは、伸び縮みのみで互いに変形できる図形は同じものとみなす、幾何学の一分野です。もし2つの図形を切り張りせずに互いに変形しあえないならば、それらを異なる図形として区別します。有名な例をあげましょう。トポロジーの考え方では、コーヒーカップとドーナツは同じものとしてみなせます。しかしながら、ボールとドーナツは異なる図形として区別します【図3】。これは穴の数をえるには切ったり張ったりする変形が必要だからです。このトポロジーの考え方を使って「相」を区別するのが、トポロジカル相の基本的なアイデアなのです。

4.2. トポロジカル絶縁体のバンドとトポロジー

ではトポロジカル絶縁体に戻って考えましょう。実は、トポロジカル絶縁体とは、通常の絶縁体とトポロジーの考え方の下で同じものとみなすことができない絶縁体のことです。ただし、ここでの変形対象は基本的に物質そのものの形状ではありません。いまの場合、エネルギーバンドの構造の変形が重要なのです。それでは、バンドの構造を切ったり張ったりするとは何でしょうか。簡単に言えば、エネルギーギャップを閉じたり開けたりすることです。すなわち、トポロジカル絶縁体相とは、皆さんの身の回りの通常の絶縁体のエネルギーバンドの構造を伸び縮みするだけでは実現できない相のことです。つまり、【図4】のようにエネルギーギャップを閉じて伝導バンドと価電子バンドをくっつけなければ、通常の絶縁体をトポロジカル絶縁体には変えられないことを意味します。ここでいう変形とは物理的には何をしているのかと思われたかもしれませんが、実際には物質に圧力や磁場(磁界)をかけることでエネルギーバンドの形を変えることができます。あるいは、物質の組成を変えてもエネルギーバンドの形は変わります。特に、バンドの構造が変形し、エネルギーギャップが閉じて通常の絶縁体からトポロジカル絶縁体が変わるときが相転移となります。兎に



【図4】バンド構造の変形を通じた相転移



【図5】トポロジカル絶縁体内部と表面および外界のバンド構造

も角にも、このようなアイデアの下でトポロジカル相を研究者たちは探しているのです。

ここまで来たら、なぜ表面が金属になるかがわかります。表面は物質内部が外界にさらされたものとみなすことができます。空気などの外界は電気を通さず、通常の絶縁体です。いまトポロジカル絶縁体と外界が接しており、エネルギーバンドもそれを反映した構造のはずです。しかしながら、トポロジカル絶縁体内部のバンドの構造は、通常の絶縁体のバンドを伸び縮みだけで変形することはできないのが特徴でした。したがって、トポロジカル絶縁体と外界の境界、つまりトポロジカル絶縁体の表面ではエネルギーギャップが閉じなければならないことがわかります【図5】。結果として、トポロジカル物質の表面は必ず金属になるのです。

4.3. トポロジカル超伝導体

絶縁体の特徴づけているのはエネルギーギャップの存在でした。トポロジカル絶縁体は、物質内部の価電子バンドと伝導バンドの間のエネルギーギャップを閉じたり開けたりすることで、物質の性質が変化したといえます。このことから、エネルギーギャップが存在する物質に対しては、同様にしてトポロジカル相が定義できることに気がきます。このようなエネルギーギャップで特徴づけられる物質として、他に超伝導体と

いうものも知られています。超伝導は、低温にて物質の電気抵抗がなくなった状態のことで、これも物質の相の一種です。数学的な帰結として、トポロジカル超伝導体という相が存在してもいいことが知られています。

トポロジカル超伝導体の特徴は表面にマヨラナ粒子と呼ばれるものが現れることです。マヨラナ粒子は自身もマヨラナ粒子の反粒子になっている不思議な粒子で、もともとは素粒子物理学の分野から提案されたものです。最近では、マヨラナ粒子が量子コンピュータに応用できる可能性があるとして注目を集めています。そのため、トポロジカル超伝導体の実現に向けて世界中の大学や企業の研究所が現在も探索を進めています。

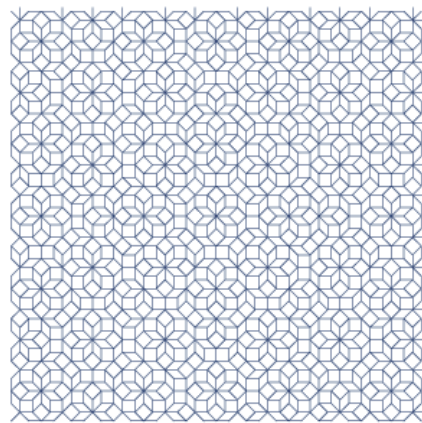
5. 準結晶におけるトポロジカル相

最後に、私の所属する遠山研究室で行っている準結晶でのトポロジカル相の理論研究について触れます。身の回りの多くの物質では、原子の配列は通常周期的です。一方、準結晶は、【図6】の頂点のように原子の配列に周期性はないにもかかわらず、構造に何らかのパターンを有する構造を持つ物質です。（ちなみに、準結晶の発見には2011年にノーベル化学賞が授与されています。）この周期性の欠如によって、準結晶における電子の状態は通常の固体とは異なることが知られています。このような変わった構造を持つ物質でもトポロジカル相が存在するのでしょうか。

近年我々の研究室では、多層構造を持つ準結晶でトポロジカル超伝導相が実現可能であることを理論的に見出しました¹⁾。最近、2次元準結晶が無数に重なった積層の準結晶が、非常に低温で超伝導になることが実験的に確認されました²⁾。我々は、そのような積層構造の準結晶超伝導体が、磁場によってワイル超伝導相と呼ばれるトポロジカル超伝導相に変わりうることを理論的に示しました。この超伝導体内部にはワイル粒子と呼ばれる質量ゼロの粒子が存在し、表面にはマヨラナ粒子が出現します。準結晶におけるワイル超伝導の発現条件はこれまでわかっていませんでしたが、本研究ではその存在を理論的に明らかにしました。この結果は、準結晶においても多様なトポロジカル超伝導相が現れることを示唆しています。

6. さいごに

ここまでトポロジカル物質の概要について述べてき



【図6】 準結晶の例

ました。しかしながら、ここ10数年でのトポロジカル相の分野の進展はすさまじく、ここでは紹介できなかった数多くのトポロジカル相も理論的に予言されています。例えば、高次トポロジカル相や非エルミートトポロジカル相というものもあり、これらは現実の物質中では実験的にはまだ十分に実現されておらず、現在も活発に研究が進められています。一方、量子コンピューティングや様々なデバイスの応用に向けて、トポロジカル絶縁体やトポロジカル超伝導体も研究が続けられています。このようにして、トポロジカル相はいまだ未知の宝庫である一方、基礎物理から応用まで幅広い可能性を秘めています。今後の益々の分野の発展に期待して、締めたいと思います。

【参考文献】

- 1) M. Hori, R. Okugawa, K. Tanaka, and T. Tohyama, Phys. Rev. Res. **6**, 033088 (2024).
- 2) Y. Tokumoto *et al.*, Nat. Commun. **15**, 1529 (2024).