

#### 4. 外国人特別研究員との共同研究の概要

近年、電子エネルギーバンド構造の位相幾何学（トポロジー）的な性質から、電子材料を区別し、新しい電子相を有する物質を探索する研究が、世界中で爆発的に行われています。特に、トポロジカル絶縁体と呼ばれる物質では、物質の表面やエッジなどの境界面において、無散逸なスピン流が現れることが知られています。この特性を利用することで、超低消費電力の電子デバイスや量子計算素子への応用が期待されています。

従来から知られているトポロジカル絶縁体では、スピン軌道相互作用が重要な役割を果たしています。しかし、Feng Liu 博士 (JSPS 外国人特別研究員)との共同研究によって、スピン軌道相互作用を導入せずに、トポロジカル相を有する物質群の設計指針を提示することに成功しました[業績 1-2]。さらに、C3N や BC3といった二次元物質におけるトポロジカル状態の発見[業績 3]、トポロジカル状態を有するフォトニック結晶の理論設計[業績 2, 5]、トポロジカルコーナー状態の理論設計[業績 4]と実験との共同研究[業績 6]など、幅広い研究を展開することに成功しました。

##### [1] 二次元 SSH 模型のトポロジカル相転移の理論

現在、トポロジカル絶縁体や量子ホール絶縁体、ワイル半金属といったトポジカル物質の研究が全世界的に活発に行われています。これら従来のトポロジカル物質では、波数空間における波動関数を解析すると、ベリー曲率とよばれるトポロジカル量が有限になる必要があります。このベリー曲率が有限になるためには、スピン軌道相互作用が存在することが本質的な役割を果たしていました。また、スピン軌道相互作用は重元素系では容易に実現されるものの炭素材料などの軽元素系では実現しづらいという問題点がありました。そこで、Liu 博士との共同研究の出発点として、たとえスピン軌道相互作用がなくても、トポロジカル状態を実現できる可能性があるかという学術的な問を立て、研究を開始しました。

原理検証のため、最近節格子間の電子ホッピングエネルギーが空間的に異なる格子模型を出発点として考えました。これらの模型は、物性物理学の領域では、Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型あるいは Shockley 模型として知られていました。しかし、これらの理論模型は、一次元格子系には詳細な解析がなされていたものの、トポロジーの観点からの解析はほとんどなされていない状況でした。

我々は、SSH 模型を 2 次元正方格子系へと拡張し、そのトポロジカルな性質を解析しました。結果、ベリー曲率がゼロでもあるにも関わらず、ザック位相と呼ばれる別のトポロジカル量を評価することで、トポロジカル相転移が起きることを発見しました。言い換えると、たとえスpin軌道相互作用がなくても、適切な格子パラメーターを設計すれば、トポロジカル状態を実現できることとなります。

この成果を踏まえ、我々は、グラフェンのエッジ状態がザック位相によって理解できることを示し[業績 7]、さらに、C3N や BC3 といった二次元物質が、ザック位相に起因するトポロジカルエッジ状態を有することを理論モデル計算と第一原理電子状態計算によって解明しました[業績 3]。

##### [2] トポロジカルフォトニック結晶の理論設計

固体中の電子の動力学はシュレーディンガー方程式によって記述される一方、光などの電磁場の動力学はマックスウェル方程式によって記述されます。異なるように見えるこれら二つの基礎方程式は、数学的な構造は極めて近いことが分かっています。つまり、電子も光も波動しての性質をもつため、これらの基礎方程式からは、ともに波動方程式が導き出され、電子もしくは光の運動を記述することができることになります。光は真空中を自由に伝搬できるものの、異なる誘電率をもつ誘電体を周期的にならべた人工超格子（フォトニック結晶）の中では、光の伝搬を阻害したり、光の速度を変調することができます。

そこで、我々、ザック位相を利用した物質設計と並行して、ザック位相を有するフォトニック結晶の設計を試みました。実際に、異なる誘電率をもつ誘電体を二次元面内で周期的に配置させることで、ザック位相が有限になるトポロジカルフォトニック結晶の設計を行い、電磁場の無散逸エッジ伝搬を理論数値解析によって提示しました[業績 2, 5]。

##### [3] 高次トポロジカル・コーナー状態の発見と実験実証

二次元 SSH 模型を六角格子系に拡張することで、スピン軌道相互作用や付加的な量子磁束を加えなくとも、高次のトポロジカル状態を実現できることを理論的に示しました。また、高次トポロジカル状態がザック位相と関係付けられることを理論的に証明しました[業績 4]。さらに、エッジに沿って電流が散逸をせずに完全に伝導する機構があるだけでなく、その逆の極限である電子をコーナーに強く局在させる機構も併存させることができることを見出しました。この研究成果を用いることで、超低消費電力で光や電子を伝搬させる光・電子デバイスへの応用へと期待されます。また、コーナー状態を利用することで、光や電子を空間的に閉じ込める量子ドットや光共振器を設計することが可能になります。

また、本成果に関連して、東京大学生産技術研究所のグループと共同研究を実施し、フォトニック結晶によって、コーナー状態を実現し、観測することに成功しました[業績6]。

## 5. 外国人特別研究員との共同研究の成果とその評価

Feng Liu 博士（JSPS 外国人特別研究員）との共同研究によって、スピン軌道相互作用を必要としないトポロジカル相の設計指針を提示することができました。これは、学術的なインパクトが大きいだけでなく、固体物理学の分野にとどまらず、フォトニック結晶分野への波及も期待できる応用展開可能性を秘めた研究成果であると期待されます。今後高く評価される研究成果になると考えられます。したがって、Liu 氏は、2年間という限られた時間の中で、非常に大きな成果を残したと言えます。また、非常に日本文化に対して理解もあり、研究室の中で良好な人間関係を築き上げ、研究室の学生とも3報の共著論文を出版するなど、大きな成果を残しました。私がこれまで受け入れた JSPS 外国人特別研究員の中でも、最も重要な研究成果を残した一人と言えます。

### 外国人特別研究員採用期間中の主たる業績

- [1] Feng Liu, Minori Yamamoto, Katsunori Wakabayashi, Topological Edge States of Honeycomb Lattice with Zero Berry Curvature, *J. Phys. Soc. Jpn. (Letters)*, **86**, 123707 (2017).doi: [10.7566/JPSJ.86.123707](https://doi.org/10.7566/JPSJ.86.123707)
- [2] Feng Liu, Hai-Yao Deng, Katsunori Wakabayashi, Topological photonic crystals with zero Berry curvature, *Phys. Rev. B* **97**, 035442 (2018).doi: [10.1103/PhysRevB.97.035442](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.035442)
- [3] Tomoaki Kameda, Feng Liu, Sudipta Dutta, and Katsunori Wakabayashi, Topological edge states induced by the Zak phase in A3B monolayers, *Phys. Rev. B* **99**, 075426 (2019).doi: [10.1103/PhysRevB.99.075426](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.075426)
- [4] Feng Liu, Hai-Yao Deng, and Katsunori Wakabayashi, Helical Topological Edge States in a Quadrupole Phase, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 086804 (2019).doi: [10.1103/PhysRevLett.122.086804](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.086804)
- [5] Feng Liu, Katsunori Wakabayashi, Photonic Weyl semimetals in two-dimensional dielectric arrays, *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, SDDD01 (2019). doi: [10.7567/1347-4065](https://doi.org/10.7567/1347-4065)
- [6] Yasutomo Ota, Feng Liu, Ryota Katsumi, Katsuyuki Watanabe, Katsunori Wakabayashi, Yasuhiko Arakawa, and Satoshi Iwamoto, Photonic crystal nanocavity based on a topological corner state, *Optica*, Vol. 6, Issue 6, pp. 786-789 (2019).doi: [10.1364/OPTICA.6.000786](https://doi.org/10.1364/OPTICA.6.000786)
- [7] Daichi Obana, Feng Liu, and Katsunori Wakabayashi, Topological edge states in the Su-Schrieffer-Heeger model, *Phys. Rev. B* **100**, 075437 (2019).doi: [10.1103/PhysRevB.100.075437](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.075437)