

注目の新材料「トポロジカル絶縁体・超伝導体」：その概念と研究の進展

安藤 陽一 (大阪大学 産業科学研究所 教授)

【はじめに】物質の性質を理解することを目的とする物性物理学では、物質は「金属」と「絶縁体」のどちらかに分類される、というのが従来の常識であった。しかし2005年に、中身（バルク）は絶縁体なのに切った表面が必ず金属になるという、このどちらにも分類できない物質が存在することが理論的に発見された。その後実験でも確認されたこの奇妙な性質は、物質の状態を量子力学的に記述する**波動関数**に、トポロジーという数学的な概念を適用することで理解される。そのため、この新しい種類の物質は「トポロジカル絶縁体」と呼ばれるようになり、波動関数のトポロジーに起因する物質の新奇な性質を探索しようという、物性物理学の新しい潮流を生み出した。

【トポロジーと量子力学】トポロジーは形（かたち）を分類する学問である。形は数学的には関数で表されるので、ある関数を連続的に変形したときに別の関数に帰着できれば、それら2つの関数はトポロジカルに同じ、と定義される。量子力学における波動関数も、この考え方によってトポロジカルに分類することができる。トポロジカルな分類方法には様々なものがあるが、例えばドーナツとアンパンの違いは、開いている穴の数で判断される(図1左)。またメビウスの輪と普通の輪の違いは、表裏が区別できるか否かで判断される(図1右)。ドーナツがアンパンとは異なるトポロジーを持つように、普通でない形と対応付けられるような波動関数をもつ状態のことを、一般に「トポロジカルな量子状態」と呼ぶ。もう少し正確に言うと、ある状態を記述する波動関数がゼロでない**トポロジカル不変量**を持つとき、その状態はトポロジカルな量子状態と考えることができる。このトポロジカル不変量とは、関数を連続的に変形させても変わらない何らかの整数値であり、例えばドーナツのような形を記述する関数であれば、穴の数がトポロジカル不変量となる(図1)。

【絶縁体とトポロジー】絶縁体はバルクにエネルギーギャップを持っているため、電圧をかけて電子を動かそう（励起しよう）としても動かすことが出来ず、電流は流れない。しかし絶縁体がトポロジカルな量子状態にあると、その表面ではギャップが消失し、電流を流すことが出来る。これは次のようなトポロジカルな原理で理解される。

絶縁体のトポロジカル不変量 ν はエネルギーギャップの存在によって守られており、ギャップを保ったまま波動関数を連続的に変形させてもトポロジカル不変量は変化し



図1：トポロジカルな分類とトポロジカル不変量

ない。真空は励起エネルギーにギャップを持った絶縁体と考えることができ、その v は 0 である。一方、トポロジカル絶縁体は $v=1$ となるトポロジカルな量子状態を持っている。従ってトポロジカル絶縁体が真空と接しているとき、その境界で v が 1 から 0 に変化するためには、必ず一旦、ギャップが閉じなければならない（これはメビウスの輪を普通の輪に変形するとき、必ず一旦、切って繋ぎ直す、つまり輪ではなくなる過程を経る必要があるのと同様である）。これはつまり、境界には必ずギャップレスの伝導状態が現れることを意味する。

【トポロジカル絶縁体の特徴】 このトポロジカル絶縁体の境界に必然的に現れる伝導状態は、2つの重要な特徴を持っている。一つは、その中の電子が独特のスピンの偏極を持っていることである（図2左）。そのスピンの向きは電子の運動方向に依存して変化し、常に運動方向に対して垂直になっており、ヘリカルスピン偏極と呼ばれている。このとき平衡状態では電子には平均としての動きはないので、スピン偏極も外からは見えない。しかしひとたび電流を流して特定の方向に動く電子の数を増やせば、それに応じてスピン偏極が現れる。このためトポロジカル絶縁体を用いると、新しい原理でスピンの制御ができるスピントロニクス・デバイスが実現できると期待されている。

もう一つの重要な特徴は、境界における伝導状態のエネルギー分散が円錐型になっており（図2右）、電子がディラック粒子のように振舞うことである。量子力学では、電子の運動は波動方程式に従う。与えられた波動方程式の解としてエネルギー固有値が得られるが、これが電子の運動量に対して変化する様子がエネルギー分散である。シュレーディンガーの波動方程式がすり鉢型のエネルギー分散を与えるのに対して、ディラックの波動方程式は質量がゼロの粒子に対して円錐型のエネルギー分散を与えることが知られており、これは逆に言うと、エネルギー分散が円錐型になるような系は、有効的に質量ゼロの粒子に対するディラックの波動方程式で記述できることを意味する。このため、トポロジカル絶縁体の表面状態中の電子は、質量ゼロのディラック粒子と見なすことができ、その分散をディラック錐と呼ぶ。この性質は、従来よりも高速で動作するトランジスタの実現などに役立つと期待されている。

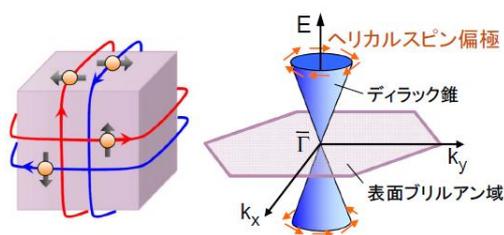


図2：トポロジカル絶縁体の表面状態

【トポロジカル超伝導体】 超伝導体にもトポロジーの概念を適用することができ、トポロジカル超伝導体はトポロジカル絶縁体とのアナロジーで理解することができる。つまり、バルクの波動関数には超伝導ギャップが開いているのに、表面にギャップレスの準粒子状態が現れるのがトポロジカル超伝導体である。トポロジカル超伝導体で特に注目を集めているのが、表面にマヨラナ粒子の出現を伴うタイプのものである。

【マヨラナ粒子】 マヨラナ粒子とは、粒子がそれ自身の反粒子でもあるという特殊な粒子である。素粒子としてのマヨラナ粒子はまだ確認されていないが、超伝導体にお

ける準粒子は、電子と正孔（これは一種の反粒子とみなせる）の線形結合になっているので、これがマヨラナ粒子として振舞うことが起こり得る。これを直観的に言うと、超伝導体中でクーパー対を壊したときにできる励起状態は、電子が1個できた状態と正孔が1個できた状態の重ね合わせであり、このとき電子と正孔は量子力学的に一見区別できなくなっている（図3）。しかしスピンを考えると両者は区別できるので、準粒子がスピンの自由度を持っている限りマヨラナ粒子とは見なせない。従って準粒子がマヨラナ粒子になるためには、スピンの自由度を取り去らなければならない。それを実現するのがトポロジカル超伝導体である。例えば、トポロジカル絶縁体の表面と同じようにトポロジカル超伝導体の表面にヘリカルスピン偏極があれば、その中の準粒子はスピンの自由度を失っているのでマヨラナ粒子として振舞う。

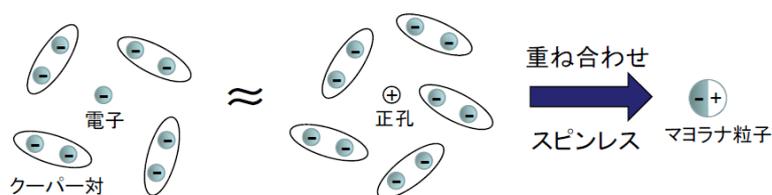


図3：トポロジカル超伝導体におけるマヨラナ粒子

【非可換粒子】 マヨラナ粒子が磁束の芯などに閉じ込められると、エネルギーゼロで励起できる「ゼロモード」となるが、この局在したマヨラナゼロモードは非可換統計に従うと考えられている。いま非可換統計に従う粒子が2個あるとすると、それらの場所を入れ替えた状態はエネルギー的には縮退しているが、波動関数としては直交した独立の状態となる。この性質を使うと、4個以上のマヨラナ粒子を一定の順番で交換する「組み紐操作」をおこなうことによって、擾乱で量子情報が失われることがないトポロジカル量子計算が実現できると提案されている。これは実用的量子コンピュータ実現のための有望な戦略として注目を集めている。しかしこれまで自然界で非可換統計に従う粒子が発見されたことはないので、非可換マヨラナ粒子の実証は物理学における重要なフロンティアとなっている。

【業績1：表面支配伝導の達成】 上記のような特徴を持つトポロジカル絶縁体・超伝導体であるが、その具体的な実験研究が始まってからまだ日が浅い。初期の頃のトポロジカル絶縁体研究で問題だったのが、現実のトポロジカル絶縁体物質では、バルクが本当に絶縁体になっている（つまりバルクには電気が流れない）材料が得られず、トポロジカル絶縁体に特有の表面状態の特長を調べるのが困難、ということだった。

我々は $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ という物質の化学的特性に着目し、その高品質単結晶を作製して調べた結果、この物質が格段に高いバルク絶縁性を持つトポロジカル絶縁体新物質である

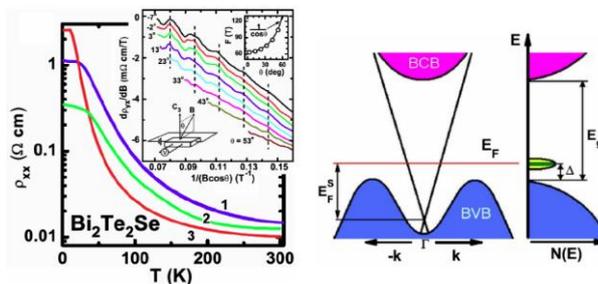


図4：トポロジカル絶縁体 $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ が示す絶縁体的な抵抗率の振る舞いと表面伝導の証拠である量子振動効果（左）。右はこの系におけるエネルギーバンド構造の概念図。

ことを 2010 年に発見した。翌 2011 年にはこれをベースに $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ という物質でさらにバルク絶縁性を高めることに成功した。中でも $\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}\text{Te}_{1.7}\text{Se}_{1.3}$ という組成の材料において、表面伝導度がバルク伝導度を上回る「表面支配伝導」の実現と言うマイルストーンを世界で初めて達成した。この物質は現在、トポロジカル絶縁体の表面状態を観測する舞台として世界中で研究に用いられている。

【業績 2：トポロジカル結晶絶縁体の実証】2012 年までに発見されたトポロジカル絶縁体はすべて、時間反転対称性が規定するトポロジーを持つものであった。これに対して、時間反転対称性以外にも結晶の鏡面对称性によってトポロジカルな性質が発現する可能性があることが 2012 年に理論的に示され、さらに半導体の錫テルル (SnTe) がその具体例であることが予想された。そこで我々はいち早くトポロジカル性の検証に適した高品質 SbTe 単結晶を育成し、この予想を世界に先駆けて実証することに成功した。この SnTe でもトポロジカルに保護された表面状態が観測されるが、通常のトポロジカル絶縁体とは異なり、2つのディラック錐がずれて重なった形のエネルギー状態を持つ事が実験的に明らかになった (図 5)。この特殊な状態は、表面金属電子状態が結晶の鏡面对称性によって保護されて初めて実現することから、 SnTe が新種のトポロジカル物質「トポロジカル結晶絶縁体」であることが結論された。これはトポロジカル物質の概念大きく広げる重要な発見であった。

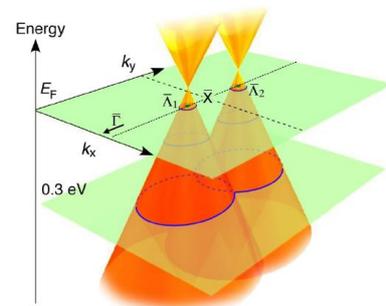


図 5：トポロジカル結晶絶縁体 SnTe の表面状態における二重ディラック錐。

【業績 3：マヨラナ粒子の間接的検出】電子ドーパされたトポロジカル絶縁体である $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 超伝導体 (図 6 左) は表面にマヨラナ粒子を伴うトポロジカル超伝導体である可能性が理論的に指摘され、大きな注目を集めている。受賞者は $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 単結晶試料の劈開面にポイントコンタクトを作製し、表面の局所的電子状態を反映する微分コンダクタンスの測定によって表面にギャップレスの準粒子状態が存在することを強く示唆するピークを観測することに成功した (図 6 右)。この材料はもともとトポロジカル絶縁体なので、表面状態はヘリカルスピンの偏極を持つはずであり、このギャップレスの準粒子状態はすなわちマヨラナ粒子である。従って $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ のポイントコンタクト分光におけるギャップ内状態の観測は、マヨラナ粒子が作る表面電子状態を実験的に捉えた初めての成果である。

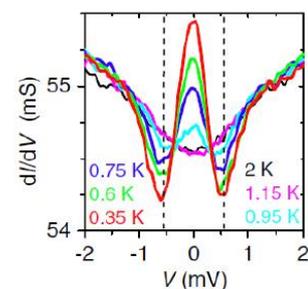
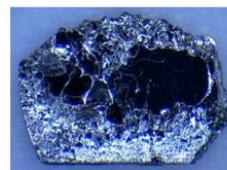


図 6： $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 超伝導体の写真 (左) とポイントコンタクト分光実験で観測された微分コンダクタンスのゼロエネルギーピーク (右)。

用語集

トポロジカル絶縁体：

その内部電子状態を量子力学的に記述する波動関数が持つトポロジカルな性質のために、表面に伝導状態が自然に現れる絶縁体。具体的には「時間反転対称性」という性質で規定されるトポロジが表面伝導状態を保証する。その表面状態中の電子は、スピンの向きが運動量の方向と常に直交する「ヘリカルスピン偏極」という特殊な性質を持つ。

トポロジカル超伝導体：

超伝導体の内部電子状態は「超伝導ギャップ」と呼ばれるエネルギーギャップを持つが、トポロジカル超伝導体においては、そのギャップで守られた内部電子状態を記述する波動関数が持つトポロジカルな性質のために、表面にギャップを持たない準粒子状態が現れる。

準粒子：

絶対零度の固体中では電子が一番エネルギーの低い「基底状態」に落ち込んでいるが、有限温度では熱エネルギーによってエネルギーの高い状態に励起される。この時、励起された電子の振舞いは固体中の状況によって規定され、真空中の電子とは異なるので、これを「準粒子」と呼んで区別する。

マヨラナ粒子：

粒子がそれ自身の反粒子でもあるという特殊な粒子。もともとは素粒子のニュートリノに対して提唱された概念だが、トポロジカル超伝導体中の準粒子がマヨラナ粒子として振舞う可能性のあることが2000年に理論的に提唱され、物理学者の間で大きな関心を集めている。

量子コンピュータ：

量子力学的に独立な2つの状態が同じエネルギーにあることを「縮退」というが、量子コンピュータは、縮退した状態の重ね合わせを用いて、通常のコンピュータで行うと膨大な時間がかかる演算を一瞬で行ってしまう。現在研究が進められている量子コンピュータ用の量子状態はノイズなどの擾乱ですぐに壊れてしまうのが問題だが、マヨラナ粒子を用いると簡単には壊すことができない量子状態を実現でき、量子コンピュータの実現可能性が一気に高まると期待されている。

表面支配伝導：

表面の伝導チャンネルを流れる電気伝導度が、それをショートする形になっているバルク伝導チャンネルを流れる電気伝導度を上回った状態のこと。このとき、試料を流れる電流の半分以上が表面を流れることになる。

トポロジカル結晶絶縁体：

これまでのトポロジカル絶縁体が「時間反転対称性」に基づくトポロジで守られているのに対して、結晶が持つ対称性（例えば鏡映対称性）に基づく新規なトポロジで守られた表面伝導状態をもつ絶縁体。これまでのトポロジカル絶縁体よりも表面状態を制御する自由度が大きく、よりデバイス応用に向いていると考えられている。