

有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ の光誘起トポロジカル相転移の理論研究

[1] 要旨

近年のレーザー技術の著しい進展により、光誘起相転移の研究が理論と実験の両面で大きな展開を見せている。特に、Floquet 理論を用いた光誘起トポロジカル相転移の理論研究は、グラフェンやカルコゲナイド化合物などを対象に、世界中の研究者を巻き込んで精力的に行われている。このような状況の中、本分野の新たな発展のために、理論サイドからの新奇な対象物質の提案や、興味深い物理現象の予言が期待されている。本論文は、Floquet 理論を用いてバンド構造やチャーン数、ホール伝導度を計算することにより、楕円偏光レーザーを照射した有機化合物 α -(BEDT-TTF)₂I₃ において、トポロジカルに非自明な光誘起チャーン絶縁体相が発現することを明らかにしている。さらに、楕円偏光の振幅の x 成分と y 成分の平面に相図を構築することで、光誘起チャーン絶縁体相だけでなく、非トポロジカル絶縁体相や半金属相を含む豊かな相図が得られることを明らかにしている。これらの成果は、光誘起トポロジカル相転移研究の対象物質の範囲を大きく拡大するとともに、物質の電子状態を光で操作する研究の発展に大きく貢献するものである。

[2] 本文

位相幾何学 (トポロジー) は古く 17 世紀から研究されてきた数学の重要な一分野である。近年、固体中の電子の性質をトポロジーの概念から理解しようとする試みが盛んに行われていることから、その重要度がますます高まっている。こうした試みの源流は、磁場下の 2 次元半導体においてホール伝導度が素電荷 e とプランク定数 h のみを含む定数 e^2/h の整数倍に量子化される「量子ホール効果」の研究にさかのぼる。量子化されたホール伝導度に現れる整数がチャーン数と呼ばれるトポロジカル不変量であることが線形応答理論を用いて示された。物質中のトポロジーに関する研究は、この量子ホール効果の理論的解明を皮切りに、トポロジカル絶縁体やトポロジカル磁性体など、多角的な視点から発展してきた。その一つの重要な成果は、1988 年の Haldane による「ゼロ磁場で起こる量子ホール効果 (量子異常ホール効果) を発現する理論模型」の提案である。しかし、原論文でも指摘されている通り、この模型には、現実には実現が難しい状況を仮定しているという問題点があった。一方、2009 年 Oka らはグラフェンに円偏光を照射する方法により量子ホール効果状の状態が実現することを理論的に提案・予言した。その後、この状態が、Haldane が提唱した量子異常ホール効果を実現していることが明らかになった。実験的にも、2019 年に McIver らによって光誘起ホール電流の測定が行われ、円偏光誘起トポロジカル状態との関連が議論されている。この研究以降、光誘起トポロジカル相転移の研究は、グラフェンやカルコゲナイド化合物などを対象に、世界中の研究者を巻き込んで行われている。そのような中、この分野をさらに飛躍させるために、理論による新しい対象物質の開拓や興味深い物理現象の予言に期待が集まっている。

最近、早稲田大学先進理工学研究科及び東京大学大学院理学系研究科のメンバーは、傾斜したギャップのないディラックコーン型バンド分散をもつ有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ が、光誘起トポロジカル相転移研究の有望な対象であることに気づき、一連の研究で光照射した α -(BEDT-TTF)₂I₃ のバンド構造やチャーン数を、Floquet 理論を用いて詳細に調べている。本研究では、楕円偏光を照射した場合 α -(BEDT-TTF)₂I₃ [図 1 (a)]において非ゼロのチャーン数を持つ「光誘起チャーン絶縁体相」が発現することを予言した。さらに楕円偏光の振幅の x 成分と y 成分の平面に相図を構築し、光誘起チャーン絶縁体相以外にも非トポロジカル絶縁体相や半金属相が発現し得ることを明らかにし

た [図 1 (b)]. この成果は, Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ)の 2021 年 10 月号に掲載された.

本研究で扱った光誘起チャーン絶縁体は, ゼロでないチャーン数を持つため, 量子ホール効果の発現が期待される. 本論文では, 実際に楕円偏光レーザーを照射した α -(BEDT-TTF)₂I₃ の光誘起チャーン絶縁体相におけるホール伝導度を計算し, 低温でホール伝導度が量子化されることを明らかにしている. また驚くべきことに, チャーン絶縁体相だけでなく, **非**トポロジカル絶縁体相においてもホール伝導度の量子化を予言し, この現象が光駆動下の非平衡定常状態におけるベリー曲率と非平衡電子分布を考えることで理解できることを明らかにしている. さらに, チャーン絶縁体のもう一つの特徴である「試料端に局在するギャップレス状態」が, 光誘起チャーン絶縁体相でも存在することを, 計算により示している. 本研究が明らかにした「光が誘起する量子化ホール伝導度」や「エッジ状態に起因する電流」は, 今後の実験で観測されることが期待されている.

本論文は, 有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ が光誘起トポロジカル相転移と, それに伴う興味深い物理現象の宝庫であることを理論的に明らかにしており, 光誘起トポロジカル相転移研究の対象物質群を大きく広げると同時に, 物質の電子状態を光で操作する研究の発展に資する重要な成果である.

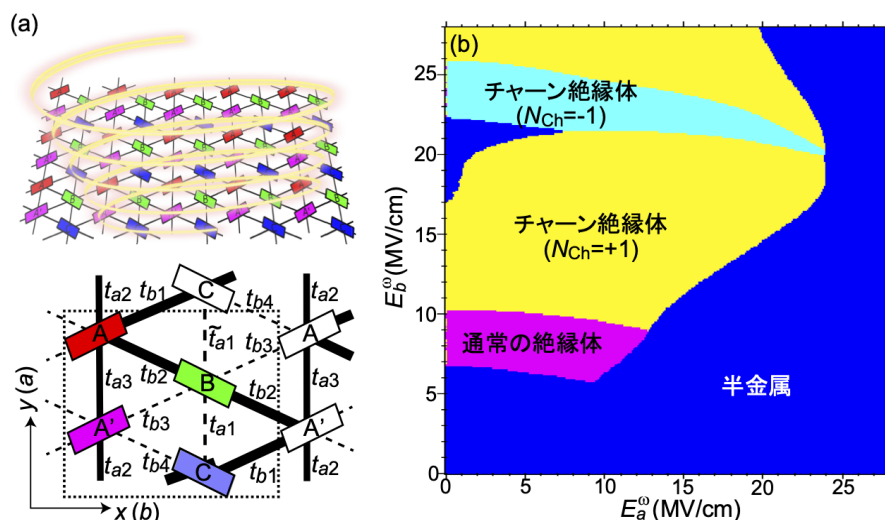


図 1. (a) 楕円偏光を照射した α -(BEDT-TTF)₂I₃ の模式図 (上) と 2 次元 BEDT-TTF 層の結晶構造 (下). (b) 楕円偏光の振幅の x 成分と y 成分の平面に構築した光照射 α -(BEDT-TTF)₂I₃ の相図.

原論文(9月15日公開済)

Floquet Theory of Photoinduced Topological Phase Transitions in the Organic Salt α -(BEDT-TTF)₂I₃ Irradiated with Elliptically Polarized Light

K. Kitayama, Y. Tanaka, M. Ogata, and M. Mochizuki, J. Phys. Soc. Jpn. **90**, 104705 (2021).

< 情報提供 : 北山圭亮 (東京大学大学院理学系研究科)
 田中康寛 (早稲田大学先進理工学研究科)
 小形正男 (東京大学大学院理学系研究科)
 望月維人 (早稲田大学先進理工学研究科) >