

# フォノンは結晶カイラリティを見るか？

## [1] 要旨

空間反転や鏡映の対称性を一切持たないカイラル結晶は、電子のスピン軌道相互作用に由来して電気と磁気さらには熱の自由度が絡んだ多彩な交差物性を発現することに興味を持たれ、精力的に研究されている。本研究では、カイラルな結晶構造に起因する電子物性以外の最も基本的な物性として格子振動、すなわちカイラル結晶特有のフォノン物性の微視的起源の解明がなされた。特にフォノンのエネルギー分散が理論的に調べられた。その結果、微視的有効模型が満たすべき条件が示され、横波フォノンの円偏光の向きによるエネルギー分裂の特徴が明らかにされた。

## [2] 本文

考える系の鏡像が空間並進や回転で重ねることができない場合はカイラルと呼ばれ、そのような系に特有な現象は、化学、生物、素粒子物理、固体物理、宇宙物理などの広い領域で研究されている。固体物理においても、水晶や単体金属 Te に代表される、空間反転や鏡映対称性を持たない多くのカイラル結晶がある。カイラル結晶においては、その低い対称性のために極性ベクトルと軸性ベクトルが結合するため、電気と磁気に関する交差応答が発生し、さらには熱自由度も含めたマルチフェロ物性が発現する。その多彩な物性を探求する研究が実験、理論の両面で活発に進められている。交差電磁応答の場合にはその微視的な起源は電子のスピン軌道相互作用であり、その具体的な形がカイラルな結晶構造によって決定されることがポイントである。実際に電子のエネルギーバンドのスピン縮退は結晶のカイラル対称性に依拠して分裂している。電子物性以外の最も基本的な物性として格子振動、すなわちフォノン物性がある。電子物性におけるスピン軌道相互作用に対応する、フォノンのエネルギーバンドの分裂を引き起こしカイラル結晶特有のフォノン物性を誘起する相互作用の微視的起源を解明することは興味のある重要な問題である。

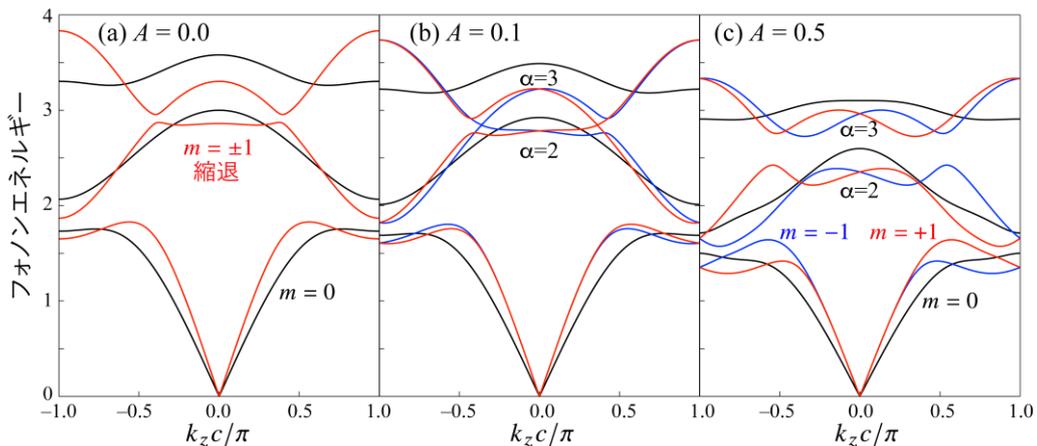


図 1. 単体金属 Te を拡張した模型のフォノンのエネルギー分散。非対称パラメータ  $A$  が非零の場合がカイラル結晶に対応。結晶角運動量  $m = \pm 1$  がカイラルフォノンモード。

最近、東京大学物性研究所と明治大学理工学部の研究グループは、Te および関連するカイラル結晶におけるフォノンのエネルギー分散を計算し、光学型横波フォノンのエネルギーが円偏光の向きの違いによって分裂する起源とその大きさを求めることに成功した。また、議論のあった音速の偏

光方向による分裂が存在しないことを示すと同時に、フォノンの有効模型への制限条件を明らかにした。この成果は、JPSJ の 2023 年 2 月号に掲載された。

本研究では 3 回らせん対称のカイラル軸をもつ Te の微視的模型およびその拡張模型を用いて、調和近似のもとでフォノンのカイラル軸方向のエネルギー分散が計算された。拡張模型においては、非対称パラメータ  $A$  の制御により、 $A=1.0$  の Te の場合から  $A=0.0$  の非カイラル極限まで統一的に解析することに成功している (図 1 参照)。また、微視的模型の構築においては、カイラルスピンス系で典型的に現れるジャロシンスキー・守谷型の反対称相互作用が存在できないことが示された。カイラル結晶の対称性を反映するように構築された弾性エネルギーの固有振動モードからフォノンエネルギーが計算される。各固有モードは 3 回らせん対称操作の同時固有状態になっており、結晶角運動量 ( $m=0, \pm 1$ ) によって特徴づけられるが、 $m=\pm 1$  のモードが  $\Gamma$  点 ( $k_z=0$ ) 付近ではほぼ横波の右・左回りの楕円偏光成分とみなせる。重要なポイントはカイラル ( $A \neq 0$ ) な場合には、横波のエネルギーは円偏光の向きによって分裂するが、その波数依存性は音響モードと光学モードで定性的に異なることである。 $\Gamma$  点付近で 2 つの光学モード ( $\alpha=2, 3$ ) のエネルギー分裂は波数の 1 次から始まり、 $\Delta\omega_\alpha(k_z) \propto \Gamma_\alpha m k_z$  の形で求められた。これは電子系のスピン軌道相互作用に対応する項である。本研究の拡張模型では、係数  $\Gamma_\alpha$  は非対称パラメータ  $A$  に比例する空間反転に対して奇パリティの擬スカラーで、その非零の値が系のカイラリティを反映している。これは、電気トロイダルモノポール  $G_0$  と同じ対称性を持ち、微視的模型のパラメータの単純な関数で与えられるカイラル結晶の秩序変数の役割を果たす量であることが示された。一方、音響モードのエネルギー分裂は波数の高次項しかないために小さい。特に、 $|k_z|$  の線形係数である音速は楕円偏光の向きに依存しないことが、一般のカイラル系の場合に厳密に証明された。

カイラル結晶のフォノンエネルギー分散の計算は、第一原理計算に基づくものも含めてこれまでに多くの先行研究があったが、本研究はシンプルな模型に基づき解析的計算を行うことによって、期待されるべき振る舞いを明確な形で提示しており意義が大きい。結晶角運動量に依存した光学励起エネルギー分裂のモデルパラメータ依存性について得られた結果も、関連実験データの解釈や物質設計に有用であり、これらの結果を基盤的知見としてカイラルフォノン物性研究の今後の大きな発展につながることを期待される。

原論文 (2023 年 1 月 19 日公開済)

[Theory of Energy Dispersion of Chiral Phonons](#)

H. Tsunetsugu and H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. **92**, 023601 (2023).

< 情報提供 : 常次宏一 (東京大学物性研究所)

楠瀬博明 (明治大学理工学部) >