

実証的トポロジー科学:新しいパラダイム

丹田 聡・坪田 雅功

1. はじめに

そもそもトポロジーとは「ちぎったり貼ったりせずに構造を連続変形したときの不変的性質を探る」学問として数学の幾何学分野で生まれ、20世紀前半から曲がった時空を表す一般相対性理論や場の量子論などの基礎物理分野において自然な形で利用されてきた。20世紀後半にはいり、トポロジカルな2重螺旋構造をもつDNAや液晶・超伝導体におけるトポロジカル欠陥の発見に伴い、物性分野においても応用されるようになってきた。現在では熱相転移や量子相転移などの臨界現象を扱う複雑系分野や、システムとしての関係性を重んじる生命科学、カーボンナノチューブ、各種ネットワーク、量子情報科学とも密接な関係があることが明らかになってきている。それはまさにトポロジーが「局所的な性質(部分)と大局的な性質(全体)の相関を解明する」という極めて一般的な科学的手法の確立を目的とした学問であるため、単に数学や物理学に留まらず、自然科学・社会科学・先端工学分野に対して、幅広く適用可能な新しいアプローチ手法として注目されている(図1)。今回は特に実験屋からみた実証的なトポロジー結晶学・トポロジー物性物理学ひいてはもっと広げてトポロジー科学の可能性に焦点をあてのべてみる。

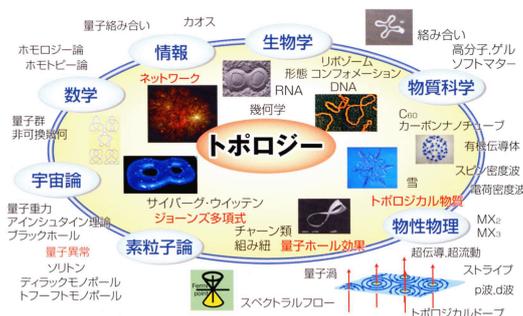


図1 トポロジー理工学概念図

2. トポロジーと物性

これまで物性におけるトポロジーの問題は

(1) ある秩序場のトポロジー的に非自明な古典的配位、例えば、結晶中の点、線、面欠陥、第二種超伝導の渦糸や ^3He 超流動体・ ^{87}Rb ボース・アインシュタイン凝縮中の量子渦などのトポロジカル欠陥が存在する場合、ホモトピー論を使った欠陥の分類、欠陥の安定性、また秩序パラメータそのものの分類を議論すること¹⁾

(2) 運動量空間におけるトポロジカルな特異点(最近流行のDirac型フェルミ点)が織り成す量子異常²⁾³⁾⁴⁾、スペクトラルフロー⁵⁾が現れること

(3) ベリー位相のように、あるパラメータ空間で断熱的にパラメータを動かしたときに波動関数の位相がその辿る経路に依存してトポロジカルに変化しその結果、偏光性などの物理量変化が現れる現象などがあつた⁶⁾⁷⁾。

系の大域的な実空間トポロジーが物性そのものに果たして直接影響を与えるものなのか、またそれがトポロジカル欠陥、秩序パラメータの安定性、波動関数空間、運動量空間、配位空間のトポロジーの問題とどのように関わってくるのかに、関心が集まってきている。例えば、メビウス帯のような裏と表の区別ができない系にイジングスピンをおいたり、クーパーペア、電荷密度波、P波超伝導体およびグラファイトシートで実現されていると考えられている2成分電子系をおくと一体どうなるのであろうか？⁽⁸⁾⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾⁽¹¹⁾⁽¹²⁾

トポロジーという概念は系の大域的な性質を取り扱うものである。メビウスの帯という空間は、局所的な曲率が例えば円筒面で近似できるとしても、円筒は両側性があり向き付け可能であるが、メビウスの帯は単側性であり向き付け不能な曲面である。明らかに円筒面とはトポロジー的に峻別され、それらは数学的にはトポロジカル不変量の値が異なることとして表現される。そして摂動的な微視的変形とは無関係にトポロジカル不変量を保とうとするトポロジー安定性があり、その安定性が物性としても現れてくることがある。例えば、SQUID (Superconducting quantum interference devices: 超伝導量子干渉計) やジョセフソン電圧計や量子ホール素子のようなデバイスは、理想的な形からはかなりずれている適当な形をしていても非常に精密に測定がなされる。つまりSQUID やジョセフソン電圧計を多少変形しても、数学的に Winding 数で表される磁束の量子化に対応するとびとびの値は変わらないし、縦と横の電極の長さが違う形状をした量子ホール素子における量子ホールコンダクタンス (Chern 数で表される¹³⁾) のとびとびの値は変わらない。Winding 数、Chern 数ともにこれらはトポロジカル不変量であり、この数学的剛性ゆえに物理系における不変定数 ($h/e, e^2/h$) の係数が整数値として物性に現れてくるのである。それはこれらのデバイスがトポロジカル量子数を使っているからである。トポロジカル量子数は角運動量のような対称性にもとづく通常の量子数よりもっとも強い剛性が

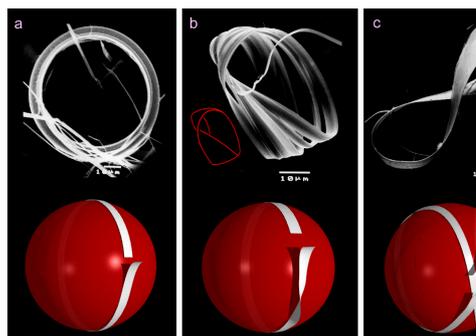


図2 トポロジカル結晶と生成機構: (a) リング結晶, (b) メビウス結晶, (c) 8の字結晶

あるのである。さらに、金属-絶縁体転移、超伝導-絶縁体転移、超流動-絶縁体転移などのトポロジカル量子数が変わる量子相転移もあり⁽⁹⁾⁽¹³⁾ 実に興味深い、物性物理と幾何学の深い対応があり奥深さを感じる。

3. トポロジカル結晶

そのような背景のもと、トポロジカルに非自明な実空間構造をもつ結晶体を作成することに成功したのでそれを報告議論したい。化学気相輸送法により擬1次元伝導体の一種である NbSe₃, TaSe₃ のリング結晶、8の字結晶、メビウス結晶をそれぞれ作成した。その結晶成長機構はSeの液滴の周りを表面張力により NbSe₃ ファイバー結晶がはりつき一周してくっつくことがわかった。これによりリング結晶になることがわかった。さらにメビウス、8の字結晶は、結晶の内的性質と断面形状により捻られながら結晶成長することにより作成できることがわかった。本稿は主にトポロジカル結晶の成長機構と CDW (Charge density waves: 電荷密度波) のトポロジカル効果を中心に行いたい¹⁴⁾。

遷移金属トリカルコゲナイド物質 MX₃ は1次元性の強い物質群である。通常結晶は非常に細長いリボン状・ホイスキー状をした断面 (数 $\mu\text{m} \times 1\mu\text{m}$) 長さ数 mm に成長し、その結晶構造は中心に金属原子をもつ6つのカルコゲン原子からなる三角柱を基本単位としている。同系の MX₂ も同

様に三角柱を基本単位にもつが MX_2 ではそれらが横につながってグラファイトと同様に 2 次元的に配列するのに対して MX_3 では三角柱チェーンどうしが並行に積み重なる構造を形成している。このような結晶構造の特徴から MX_2 では 2 次元性が MX_3 では 1 次元的な性質を示すことが期待され多くの低次元研究における典型的物質としての不動の位置を占めている。代表的な MX_3 は異方性の強い超伝導 TaSe_3 、パイエルス転移を示す TaS_3 、CDW 転移を示す NbSe_3 とさまざまな物性を示す。このように低次元系に特有な一連の物性を示す MX_3 系はその「良質単結晶の存在」により、ヨーロッパを中心に流行に左右されない形でしっかり根を下ろした研究が行われている¹⁵⁾。

我々は、次の 4 種類のトポロジカル物質を発見している。いずれも電子線回折と X 線回折から単相の NbSe_3 、 TaSe_3 の単結晶であることがわかった。

(1) リング結晶: トポロジー的にはリング(円筒)と見なされるが、実際の形状は多彩である。図 2(a) のように外形 $1 \sim 90 \mu\text{m}$ の細いものが典型例であるが、円盤や円柱型も存在する。

(2) メビウス結晶: 現在まで数個しか得られていないものの確かに存在していることが図 2(b) により示されている。3 次元空間に埋めこめられた唯一の向き付け不能なループ結晶の例として特に重要である。

(3) 8 の字結晶: このタイプの結晶は、円周に 2π のひねりがあるものとして特徴付けることができる。数字の 8 の字を形作る事が多い(図 2(c))。周長の平均は $480 \mu\text{m}$ であり、リング結晶 ($280 \mu\text{m}$) の約 2 倍である。ツイスト数でいうと 2π である。このように縁 (2 本の粹線) を持つリボンから作られる閉じたループは、数学の分野では「リボン・ノット」として取り扱われる。上記の 3 タイプもその分類に従ったものである。

(4) ホップリンク結晶: この結晶はこれまでの結晶学の分類に収まらない結晶である。ただ埋め込み多様体で分類できる可能性がある(図 3)¹⁶⁾。

これらのループ結晶を FIB (収束イオンビーム) を用いて切断することで¹⁷⁾、曲げ変形による塑性

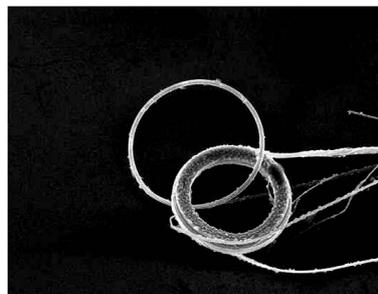


図 3 ホップリンク結晶。

の程度を見積もった。その結果、細いループは弾性的に直線形状へと回復する一方、厚み約 $1 \mu\text{m}$ を境にして、太いものはそのままの形状を保つことが判明した。これは、リング結晶が幅約 $1 \mu\text{m}$ 単位で、繊維状の完全結晶によるリングと見なせることを意味する。リング結晶が持つ離散的回転対称性は、単なる単結晶を切り出して作製したリングには無いものである(切り出し、加工リング結晶では離散的並進対称性しかない)。結晶学の表現をとるならば、リング結晶は結晶欠陥によって記述することも可能である。ただし、結晶に普通見られる線欠陥(ディスロケーション)では無く、液晶に特有であると思われていた回位(ディスクリネーション)を導入しなければならない。リング結晶はその中心に一本のくさび型回位線(大きさは $+2\pi$)を持つ結晶だと言える。メビウス 8 の字結晶はくさび形に加え、 π あるいは 2π のねじれ型回位を持つ。別の見方をすれば結晶全体がディスクリネーションになっている結晶といえる¹⁸⁾¹⁹⁾。

次に、我々の研究室で合成されたリング、メビウス、8 の字結晶の成長機構について論じる。テンプレート型のトポロジカル結晶成長である。リング結晶に関しては、 NbSe_3 ホイスカー(ひげ結晶と呼ばれる細長い結晶)のような繊維状の物質が何かに巻きついて成長することで形成できる。 Nb (ニオブ)と Se (セレン)の気相反応中にそのような状況が起こることを発見した。通常、この種の結晶作成法では、沸点の低いセレンが反応容器中を蒸発凝集しながら循環し、反応によって生じた NbSe_3 分子を一箇所に集めて結晶化させること

ができる．そうしてできる NbSe₃ の微小なホイスカーが付近のセレン液滴と接触すると，表面張力により液滴表面に吸着する．その結果，図 2(a) の写真のように，液滴に巻きつくループとなる．液滴が蒸発すると，ループだけが残り得る．次に 8 の字結晶に関しては，周長がリングのおよそ倍であることから Se 液滴を 2 周回った後に両端が結合することで形成されると考えられる．液滴に 2 回巻き付けるだけで 2π のひねりを持つ 8 の字を作れるのは少し不思議だが，テープとはさみを用意して実際にやってみれば明らかであろう．数学的には，テープの縁の線に着目し，2 本の線同士の絡み合いの数を lk(リンク数) と定義するとき，

$$W_r + T_w = lk$$

の関係式が成立する²⁰⁾²¹⁾²²⁾．W_r(ライジング数) は 1 回巻き付けるごとに 1，T_w(ツイスト数) は 2π のひねりに対して 1 の整数である．球体に 2 回巻きつけたものは W_r=2，T_w=0，lk=2 であるのに対して，図 2(c) に写っている 8 の字に関しては W_r=1，T_w=1，lk=2 となっている．つまりトポロジー不変量である lk に注目すると，どちらも数学的には同じものである．物理的には，同じトポロジークラスに属する形状のうち，曲げによる弾性エネルギーが最小のものが選択されるはずである．観察された lk=2 の結晶は 8 の字型が多いことから，どこかで(例えば Se の球が蒸発するとき)ライジング-ツイスト変換がおこると考えられる．メビウス結晶に関しては，次のメカニズムがわかった．図 2(b) のように，Se 球面を NbSe₃ が這う際，曲がりながらツイストが入ることが明らかになった．表面張力で NbSe₃ が曲がっていくのであるが，その際，結晶断面が矩形であるランダウ，ハーモンの弾性体論によれば捻られるのである²³⁾²⁴⁾．この場合勿論どちらに捻られるかは対称性の破れと同じでどちらにもなりうる．この結晶が捩れを伴いやすいもう一つの理由は単斜晶(P1/m2)であることが掲げられる．つまり，単斜晶系においてはフックの法則を拡張した弾性体論を結晶学に適用した場合，歪と応力間のコンプライアンス行列のシアの項に非対角項が存在

する．例えば S₃₅ があるとする．この項の意味は x 面に対して z 方向にシア変位をさせた場合，z 面が z 方向に力が働くのである．この項が 0 であればそのような力は働かず結晶を曲げていった場合捩れは起こらない．もし有限であれば曲がりとともに捩れることになる．単斜晶であるから必ず捩れる方向に力が働く．この場合は勿論結晶断面が矩形でなくても何でもよい．いずれにしてもこの 2 種類の効果により NbSe₃ の曲げは常にひねりを伴っていると思われる．一周巻き付けたところでちょうど π のひねりが生じていた場合，メビウスの結晶ができあがる．ひねりの大きさは場合により異なる．例えばホイスカーが太すぎるとねじれの弾性エネルギーが大きいため，ひねりは無視できる程度になるだろう．メビウス結晶の生成がリング 8 の字より希少であるのは，曲げ変形とひねり変形の偶然の一致に依存する部分があるためと思われる．他にも液体 Se の球の回転も考えられるが，まだ観測してはいない．これまでに見つかったトポロジカル物質を，次の 3 種類に分類した．ひねり無し π ひねり(メビウスの輪)π ひねりの 3 つで，巻きつきの過程で生じたひねりによって分類する．各タイプごとに，ホイスカーが液滴にどのように巻きつければ形成できるかを図 2 にまとめた．

4. トポロジカル物性

次に電氣的測定に移る．実際の系におけるトポロジーの変化が物性に影響を及ぼし、トポロジカルな効果がでるかどうかは非常に重要な問題である．理論的には，CDW の AB 効果²⁵⁾ や，AC 効果²⁶⁾ が予言されているがいまだ決着はみていない．なぜなら結晶を加工することで CDW リングを作るのは現在の技術では不可能だからである．TaS₃ のリング結晶では CDW リングが自己形成するため，まさに理想的な CDW 干渉系になっている．このリングに関して AB 効果がおきるかどうか確かめた．磁場をかけ電気抵抗を測ったところ，h/2e の周期で振動しているのがわかった(図 4)²⁷⁾．こ

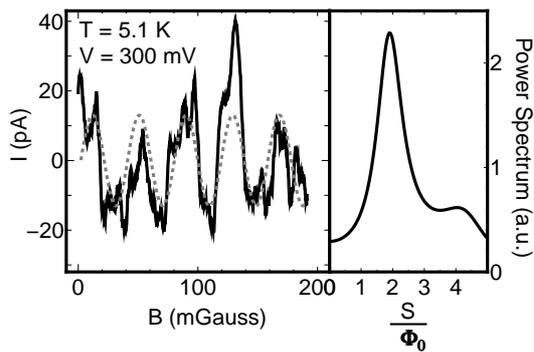


図4 TaS₃ リング結晶における CDW の AB 効果、横軸は磁場であり明らかに周期が観測される。周期 ϕ_0 はパワースペクトルから $h/2e$ であり CDW のソリトン励起 (電荷 $2e$) 由来の干渉と考えられる。

ここで現れる $2e$ という電荷はソリトン励起に起因するものと考えられる。余分に追加された CDW の波面 (位相ひずみ) が干渉を起こすというモデルを図5に示す。CDW の干渉はこれまでにフランスのモンソウのグループが重イオンを NbSe₃ 短冊結晶に貫通させそのスライディング状態で AB 干渉効果²⁸⁾ をみているが解釈がまちまちである。リング周りの準粒子が AAS 効果のように干渉しているとみるのが妥当である。

一方、NbSe₃ のリング結晶に直流と交流を同時に印加することでシャピロステップを観測した²⁹⁾。CDW リングではメインのシャピロピークに加えてサイドにビートピークが現れた。この共鳴条件のずれは、CDW が循環して流れるという効果を考慮しなければ説明がつかない。我々のデータは理想的な CDW リング系における実験のため、CDW そのものの干渉を見ている可能性もあり重要な知見を与えている。室温でも CDW は形成されるため、トポロジカル結晶を用いた CDW の AB 効果や CDW 還流の発見は、室温フレーリッヒ超伝導や新しい量子干渉デバイスの実現の可能性も示唆しており多様な分野への発展が期待できる。

5. 実証的トポロジ科学

まだこれらの系に関する実験は始まったばかり

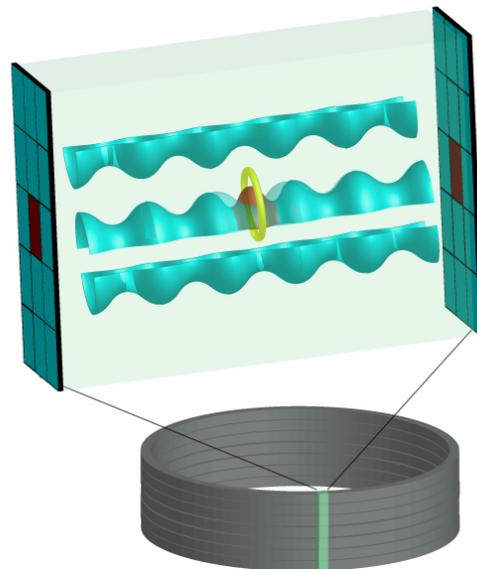


図5 CDW ディスロケーションループモデル。波は結晶中に生じている CDW を表している。ソリトンとしてディスロケーション (ループ状) に囲まれた余分な波面が励起している。

である。他に電子的なトポロジカルな効果はあるのかないのかは急務な課題である。結晶学的にもメビウス結晶の最適な形はどういったものか、今後の課題でもある³⁰⁾。ナノテクノロジーの急先鋒であるナノチューブの作製メカニズムがまだはっきりしていない現状を考えると同じ2次元層状化合物、さらに可塑性のある1次元化合物によるこのようなトポロジカル結晶の成長メカニズムが明らかになったことは創成の指導原理を与えたという意味においても、新しい物性をひきだす場を与えたという意味において非常に重要である。これらは物理学、数学、化学、生物学、鉱物学分野を巻き込む可能性もあり多くの人がこの分野に参入することを望んでおります (図1参照)。

物性だけでなく、宇宙の大域的トポロジ構造がビッグバン後に現れる素粒子の種類を決める可能性も示唆されており系の大域的トポロジが宇宙物理分野にも確実に重要な位置を築きつつある。宇宙では大域的トポロジは変えられないので実験はできないが、物性系は実験ができるという点で優れている³¹⁾。実験室系を使って宇宙を語る日も

近いと考える。(Cosmology in Laboratory: ヨーロッパではこの研究が始まっている.)

最後に、本研究を遂行するのに、多くの支援を受けました。実験では、常田琢氏、松浦徹氏、豊島剛司氏、稲垣克彦氏、山谷和彦氏、故三本木孝氏、市村晃一氏、川本温子氏、岡島吉俊氏、塩原正人氏、安塚周磨氏、砂川一郎氏にお世話になりました。それから、広島大学の畠中憲之氏、秋田大学の林正彦氏、奈良教育大の松山豊樹氏、立命館大学の倉辻比呂志氏、南カルフォルニア大の故真木和実氏、日本大学の山中氏、京大の吉川研一氏、NECの飯島澄雄氏、白河英樹氏、東京大学の青木秀夫氏、MITのJackiw氏、Bristol大学のBerry卿、ヘルシンキ工科大低温物理研のVolovik氏、Hakonen氏、Paalanen所長をはじめ多くの方々に議論して頂きました。この場を借りて謝辞とします。

参考文献

- 1) N. D. Mermin: Rev. Mod. Phys. **51** (1979) 591.
- 2) R. Jackiw: Phys. Rev. D **29** (1984) 2375.
- 3) A. Niemi and G. Semenoff: Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 2077.
- 4) T. Matsuyama: Prog. Theor. Phys. **77** (1987) 711.
- 5) 田中秋広, 林正彦: 固体物理 **35**, No.1 (2000) 50.
- 6) M. V. Berry: Proc. R. Soc. Lond. Ser. A **392** (1984) 45.
- 7) 倉辻比呂志: 幾何学的量子力学、シュプリンガー・フェアラーク東京 (2005).
- 8) M. Hayashi and H. Ebisawa: J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001) 3495.
- 9) G. E. Volovik: *Exotic Properties of Superfluid ^3He* (World Scientific, 1992).
- 10) H. Ito and T. Sakaguchi: Phys. Lett. A **160** (1991) 424.
- 11) K. Kaneda and Y. Okabe: Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 2134.
- 12) F. Mila, C. Stafford, and S. Capponi: Phys. Rev. B **57** (1998) 1457.
- 13) D. Thouless: *Topological Quantum Numbers in Nonrelativistic Physics* (World Scientific 1998).
- 14) S. Tanda, T. Tsuneta, Y. Okajima, K. Inagaki, K. Yamaya, and N. Hatakenaka: Nature **417** (2002) 397.
- 15) For reviews on CDWs, see P. Monceau: *Electronic Properties of Inorganic Quasi-One-Dimensional Compounds* (Reidel, 1985).
- 16) T. Matsuura, M. Yamanaka, N. Hatakenaka, T. Matsuyama, S. Tanda: J. Crys. Grow. **297** (2006) 157.
- 17) T. Matsuura, T. Tsuneta, K. Inagaki, S. Tanda: Phys. Rev. B **73** (2006) 165118.
- 18) W. F. Harris: Surf. Defect Prop. Solids : a Specialist Periodical Report **3** (1974) 57.
- 19) M. Hayashi, H. Ebisawa, K. Kuboki: Europhys. Lett. **76** (2006) 264.
- 20) J. H. White: J. Math. **91** (1969) 693.
- 21) A. V. Vologodskii, V. V. Anshelevich, A. V. Lukashin, and M. D. Frank-Kamenetskii: Nature **280** (1979) 294.
- 22) H. Tsuru and M. Wadati: Biopolymers **25** (1986) 2083.
- 23) L. D. Landau and E. M. Lifshitz: *Theory of Elasticity* (Pergamon Press, 1959).
- 24) R. F. S. Hearmon: *An Introduction to Applied Anisotropic Elasticity* (Oxford Univ. Press, 1961).
- 25) E. N. Bogachek, I. V. Krive, I. O. Kulik, and A. S. Rozhavsky: Phys. Rev. B **42** (1990) 7614.
- 26) Ya-Sha Yi and A. R. Bishop: Phys. Rev. B **58** (1998) 4077.
- 27) M. Tsubota, K. Inagaki, S. Tanda: Physica B **404** (2009) 416.
- 28) Yu. I. Latyshev, O. Laborde, P. Monceau and S. Klaumünzer: Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 919.
- 29) T. Matsuura, K. Inagaki, S. Tanda: Phys. Rev. B **79** (2009) 014304.
- 30) E. L. Starostin, G. H. M. van der Heijden: Nature Material **6** (2007) 563.
- 31) J. Luminet, J. R. Weeks, A. Riazuelo, R. Lehoucq, J. Uzan: Nature **425** (2003) 593.

(たんだ・さとし, 北海道大学大学院工学研究科応用物理学専攻、トポロジー理工学の創成 COE)
(つばた・まさかつ, 北海道大学大学院工学研究科応用物理学専攻、日本学術振興会特別研究員)