

擬一次元ビスマスハライドにおける種々のトポロジカル量子相の開拓

Exploration of Various Topological Quantum Phases

in Quasi One-Dimensional Bismuth Halides

東工大フロンティア研¹, 東大物性研² ○小林賢¹, 野口亮², 高橋敬成¹, 近藤猛², 笹川崇男¹

MSL Tokyo Institute of Technology¹, ISSP, University of Tokyo²

○M. Kobayashi¹, R. Noguchi², T. Takahashi¹, T. Kondo², T. Sasagawa¹

E-mail: Kobayashi.m.bi@m.titech.ac.jp

3次元トポロジカル絶縁体は、バルクが絶縁体であるにもかかわらず表面では特殊な2次元金属状態が出現する物質であり、全ての面に表面状態が存在する「強い」と、ある結晶面にのみ表面状態が存在する「弱い」の分類がある。近年では、3次元結晶の稜線の位置に1次元金属状態（ヒンジ状態）が現れる「高次トポロジカル絶縁体」が提唱され、トポロジカル量子相は多様性と可能性を更に広げている。

我々は、擬一次元ビスマスハライド (Bi_4X_4 , $\text{X} = \text{Br}, \text{I}$) が、これら様々なトポロジカル量子相の現れる物質群であることを見出してきた。単層の Bi_4X_4 はハロゲン元素に依らず2次元トポロジカル絶縁体となるが、バルクではその積層様式によって様々なトポロジカル相に変化する (図1)。具体的には、そのまま積層する $\beta\text{-Bi}_4\text{I}_4$ では弱いトポロジカル絶縁体、ずらして積層する $\alpha\text{-Bi}_4\text{I}_4$ では通常の絶縁体、そして反転して積層する Bi_4Br_4 では高次トポロジカル絶縁体を実現することを明らかにしてきた^{[1][2]}。さらに最近、ビスマスハライドの混晶系である $\text{Bi}_4\text{Br}_{4-x}\text{I}_x$ において、これまでのハイブリッド型の積層形式となり、強いトポロジカル絶縁体や異なる状態間のトポロジカル相転移の可能性も見つけた。講演では、トポロジカル電子状態の変化を第一原理計算から整理した上で、系統的に組成変化させたビスマスハライド単結晶により明らかにしたトポロジカル相と輸送特性を関連づけた結果 (図2) について議論する。

[1] R. Noguchi, T. Takahashi, T. Sasagawa, T. Kondo *et al.*, Nature **566**, 518 (2019).

[2] R. Noguchi, M. Kobayashi, T. Sasagawa, T. Kondo *et al.*, Nature Materials (2021) published online.

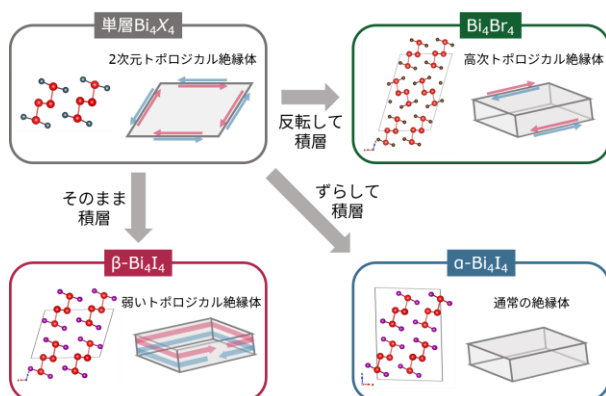


図1. Bi_4X_4 の結晶構造とトポロジカル相の関係性

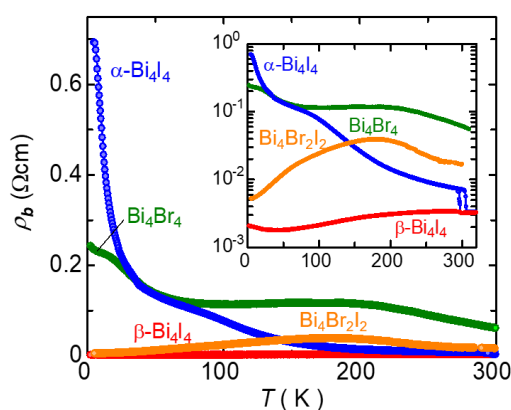


図2. ビスマスハライドの輸送特性