

「非相反表面波:材料科学に使えるアノマリー」

研究期間:2020年11月～2024年3月

研究者:山本 慧

1. 研究のねらい

この研究計画では、固体の表面に沿って伝搬する波「表面波」に着目する。自然界にはさまざまな表面波が存在するが、その中でも表面音波、表面プラズマ振動、表面スピン波はそれぞれ弾性体、金属、強磁性体において材料のミクロな詳細によらず普遍的に現れる。これらの表面波を記述する波動方程式はそれぞれに異なるものの、共通して波の伝搬方向と適切に一般化された意味で波の偏極方向が一对一に相関する。伝搬方向と偏極方向の相関を利用することで非相反性など通常の波動では見られない特異現象を引き起こすことができる。この性質は、バンド構造を持つ電子系において運動量表示された波動関数が決定する基底状態がトポロジカルに非自明である場合に現れるトポロジカル境界モードを彷彿とさせる。しかし電子系のバンド理論は離散的な力学的自由度からなる格子系のモデルに立脚しており、連続体モデルによって記述される表面波の特徴付けには直接用いることができない。一方で、素粒子物理学においては、コンパクト多様体上の連続体モデルに基づく場の理論に関して、トポロジカルに非自明なベクトル束に対応したゲージ場に対する系の異常応答「アノマリー」が知られている。バンド電子系のトポロジーとアノマリーの間に形式的な一致と電磁応答を介した関連があることは広く指摘されているが、物理学的な具体例の意味でも数学的な枠組みの意味でも、離散的な格子モデルとコンパクト多様体の関係は明らかにされていない。本研究では、材料科学の対象として扱われる身近な表面波、特に表面音波を主な題材として、離散的なモデルにおけるトポロジカル境界モードと、連続体モデルにおける表面波の関係を探る。より端的には表面音波が何らかの意味でトポロジカルであるか否かを検証する。この過程においてコンパクト多様体上で展開されるアノマリーの理論を手がかりとして用い、離散と連続をつなぐ具体的な手続きの開拓をねらう。並行して、表面波が持つ伝搬方向と偏極方向の相関を利用した新現象の提案を目指し、実験研究者と共同で表面波の応用可能性を追求する。

2. 研究成果

(1) 概要

最も具体的な目標として掲げていた表面音波が何らかの意味でトポロジカルかどうかという問いには結局答えることはできていない。しかしこの問題を調べる過程で、離散的な格子モデルと連続体において定義された場の理論の関わりについて、様々な知見を得ることができた。特に電子系のトポロジカル境界モードと素粒子物理学におけるアノマリーの関係を明確にするツールとして、**Coarse Geometry** と呼ばれる数学的手法を見つけることができたことは大きな成果であった。物理学にはこれまでのところほとんど応用されていないが、この手法は二つの密接に関連した問題を同時に解決する。一方では、考察する空間が離散的か連続かに全く依存しない形で、トポロジカル境界モードを特徴付けることができる。他方で、コンパクト

ト多様体におけるベクトル束の大域的なねじれ概念を、指数定理の観点から非コンパクト多様体に対象を拡大して適用することができる。これらは空間に関する情報を線形作用素のスペクトルに反映させることで達成されるが、そこで用いられる線形作用素が物理学におけるハミルトニアンやラグランジアンに対応する多数の演算子を重要な例として含んでいる。さきがけの研究期間中に、作用素が作用するヒルベルト空間が複素数を係数とする場合の **Coarse Geometry** を学び、それを用いて複素係数の場合のトポロジカル境界モードとアノマリーの関係の整理し、アノマリー概念を非コンパクト多様体に拡張することに成功した。しかし当初研究対象としていた表面波は、全て古典物理学の対象であり、ヒルベルト空間としては実係数のものを考察する必要がある。この場合の **Coarse Geometry** については、一般論は確立されているものの、物理学に直結する具体例に乏しく、研究期間内で調べ尽くすことはできなかった。周辺的な成果として、実係数の指数定理を物理学に応用する可能性を検討することで、**de Rham** コホモロジーの有用性と、その波動方程式への応用に必要となるヘルムホルツ分解を用いた二階偏微分方程式の一階への書き換え方法を見出すことができた。これらと並行して、国内外の多数の実験グループと共同研究を行い、特に表面音波と磁気ダイナミクスを組み合わせた新現象を記述するための理論構築で様々な成果を得た。研究期間の終わりにかけて二件のプレス発表を理化学研究所と共同で行うことができ、磁性材料分野で有意義な貢献ができたものと考えている。

(2) 詳細

研究テーマ A「表面音波とトポロジーの関連解明」

表面音波を記述する波動方程式は二階の偏微分方程式であり、通常ラプラス型作用素のスペクトルを決める問題に帰着する。しかしワイル半金属に関する先行研究から、トポロジーと境界モードの関係を探るためには一階の偏微分方程式が一つの鍵となっていることが示唆される。同様に、コンパクト多様体上のアノマリーの理論において非自明なトポロジーを表現する作用素はディラック型であり、それはやはり一階の微分作用素である。そこでまず音波の波動方程式を一階の偏微分方程式に書き換える方法を探った。発見的手法ではうまくいかなかったものの、電磁波の伝搬を記述するマクスウェル方程式との類似に着目することで一つの解答を得ることが出来た。ディラック型に書き換えることで自然に微分形式が導入され、トポロジーとの関わりが見やすくなった。ユークリッド空間中のコンパクトな領域における電磁場や音波の方程式を解いた際に、もしも固有周波数がゼロとなるモードが存在すれば、それは **de Rham** コホモロジーの非自明な生成元と一対一に対応することが **Hodge-de Rham** の定理からわかる。よってコンパクトな領域における電磁波や音波のゼロモードはトポロジカルと言える。表面モードはある種のゼロモードを含む場合がほとんどであるため、そこにも何らかのトポロジカルな意味が付くことはありそうである。しかし表面モードとバルクモードを区別できるためには、方程式を解く空間が非コンパクトである必要がある。この場合の **Hodge-de Rham** に相当する数学的枠組みは、少なくともよく知られた教科書等からは見つけることが出来なかった。当初この課題は物理的によく知られた具体例を調べることで一般論の手がかりを得られるように設定したが、取り組みれば取り組むほど非コンパクトな空間における「トポロジー」の意味を一般的に解明することが表面波を理解するために不可欠であると感じる様になった。

研究テーマ B「連続体モデルにおけるトポロジカル境界モード」

上述テーマ A から、そもそもトポロジカル境界モードという概念が意味を持つためには、非コンパクトな空間上の理論が前提となることが明確になった。突き詰めれば、バルク境界対応の実体を掴むのが困難な理由はここにあると考える。並進対称性を仮定すれば、非コンパクトな空間である格子からコンパクト多様体である運動量空間に移ることができてトポロジーが議論できる。しかし境界がある格子は並進対称性がないためコンパクト空間に逃げて議論を展開することが出来ない。その背景にあるのは、非コンパクト空間を議論できる数学的枠組みが普及していないことである。通常の意味でのトポロジーは非コンパクトな空間で考えると自明になってしまう場合がほとんどであるが、実はアノマリーに直結した意味でのトポロジーを扱う指数定理という枠組みは非コンパクト空間に非自明に拡張できることを偶然知った。非コンパクト空間の指数定理を定式化する枠組みは **Coarse Geometry** と呼ばれる。それによれば、離散的であるかどうかやコンパクトであることに依存しない形で、並進対称性を要求せず、空間上の関数を基に定義されたヒルベルト空間の線形作用素に対して代数トポロジーを導入して、チャーン数に相当する整数を計算することが可能になる。ハミルトニアンに対応する自己共役な作用素については、作用素のスペクトルが有界か非有界かに応じて二種類の整数が定義できる。偶数次元においては、その内有界な作用素で非自明となるものが通常のチャーン絶縁体を記述し、非有界な場合に非自明なものがカイラルアノマリーを記述することが分かった。有界な場合には偶数次元の非自明な作用素から一次元少ない奇数次元非有界スペクトルの非自明な作用素を具体的に構築でき、それがカイラルエッジ状態を記述することも明らかになった。加えて、作用素から整数を構築する手続きそのものがチャーン絶縁体のハミルトニアンとカイラルアノマリーを記述するディラック作用素のある種の内積を取る操作と見なすことができ、この意味でチャーン絶縁体とカイラルアノマリーは双対であると言える。この知見によって、格子上の理論と連続体の理論の関連を具体化して、並進対称性を仮定せずにバルクエッジ対応を直接的に定式化するという目的は大部分達成できた。しかし上述の結果は全て複素数を係数とするヒルベルト空間に対して成立するものである。この研究で対象としたい物理現象では全て実係数のヒルベルト空間を考察する必要がある。実係数の **Coarse Geometry** については、代数トポロジーは複素の場合と同様に導入できるものの、それらの生成元が具体的に知られている例が少ないようで文献が容易には見つからなかった。また異なる次元間を繋ぐ作用素環の計算操作もより複雑になる様で、研究期間内に音波や電磁場と **Coarse Geometry** の関係を掴むことは出来なかった。

研究テーマ C「実験グループとの連携による表面音波の応用研究」

表面音波はスマートフォンなどの通信機器においてマイクロ波の周波数フィルターとして幅広く応用されているため、基板上で周波数や波長を制御して微小な信号を検出する技術が発達している。この表面音波生成技術を応用して、磁性体薄膜のマイクロ波周波数・マイクロメートル波長領域でのダイナミクス解明・操作を目指す研究が近年盛んになった。本研究では、偏微分方程式の知見を用いてさまざまな実験条件に対応した表面音波と磁気ダイナミクスの結合を記述する理論的枠組みを構築し、実際の実験データを解析することに用いた。関連した内容も含めて研究期間内に実験グループと共同で7報の論文を出版したが、特に代

表者が主要な役割を果たしたものとして、表面音波が持つ偏極ベクトルの回転と磁気共鳴の結合により現れる非相反性の理論的基礎付け(成果リスト1)、グラフェンのディラック型分散の物理を模した磁性体の人工周期構造によって表面音波の有効的な自由度を増やして制御することの実証(成果リスト2)、擬二次元的構造を持つ反強磁性体における表面音波とスピン波の共鳴を初めて実証した実験の理論解析(成果リスト3)が挙げられる。

3. 今後の展開

トポロジーと直接関連した表面に局在した自由度を記述する理論の基礎的側面については、研究期間内に物理的に新しい知見を得たり現象を提案したりすることは出来なかった。しかしそのような現象を記述する数学的な枠組みとして、これまで物理学ではほとんど触れられてこなかった **Coarse Geometry** が非常に適していることを見出した。ここで議論しているトポロジーとバルク境界対応を超えて熱力学の基礎付けや繰り込み・相転移の理論など物理学の幅広いテーマにおいて数学的理解を与えられる可能性を秘めていると考えており、今後長期的な視点で **Coarse Geometry** の応用研究を進めていく予定である。抽象的な数学的枠組みの物理的実体を掴むために具体例を探していくのが代表者の今後の仕事であると考えており、現在複素係数の場合についてはいくつかこれまでに考察されてこなかった物理的モデルを検討している。Kitaev が提案したマヨラナ鎖やスピン液体でさえ社会実装からは定量化できないほど離れている状態で、自身が提案できる程度のモデルがいつか技術応用されるとは到底考えられない。しかし **Coarse Geometry** が特徴付けるものは、非常に多くの自由度を含む系が、実際に無限自由度となる極限で、極端に小さいスケールにも大きいスケールにも依存せずを示す堅牢な性質である。未知の現象でかつ実世界において意味を持つものを探求するのであれば、これ以上チャンスが高いアプローチは多くはないと思っている。表面音波を特に磁気ダイナミクスと関連して応用する研究については、表面的には多少社会実装の可能性が高い様にも見える。しかし具体的な利用可能性として物理学者が思い描いている波動計算機、環境発電、量子計算回路におけるマイクロ波周波数から光領域の周波数への変換などについて、どのような展開があり得るのか代表者には想像できない。物理学者にはこのような応用装置の原理は理解できても、課題の工学的側面が理解できない。例えば波の非相反性はこれらの応用において有用であるとされているが、物理学研究においてはどのような状況であればどのような理由で非相反性が現れるかを知ることが目標となる。一方工学的には、その応用が必要とされる前提条件の環境が決まっており、そこで有用となる様な原理・現象を探し求める。アプローチが真逆であるため、物理学者が見出した現象が社会実装できると期待する理由はない。物理学と工学が継続的に対話し、かつその大部分が落胆に終わることを受け入れるような時間的・精神的余裕が社会にあれば、ここで得られた成果が何らかの形で社会実装に繋がる可能性があるのかもしれない。

4. 自己評価

当初計画書に書いた個々の具体的な目標が達成されたかどうかという観点からは、達成度は10%ほどと言わざるを得ない。しかし代表者自身は、表面波の理論的基礎付けのテーマについて得られた数学的知見とその潜在的な応用可能性について非常に満足している。この研

究計画を提出した段階では、Coarse Geometry については耳にしたことがある程度で、有用であるとも思っていなかったし、そもそも自分が理解できるような内容だとは考えていなかった。さきがけによって得られた経済的・人的な資源を活用することで、自身が取り組まなければならない問題がはっきりし、自分の能力を最大限に活かす方向性を見つけることができたと思っている。実験との共同による応用研究についても、新しい共同研究相手やテーマを開拓することができ、分野内で立場を確立することができた。数学にも実験にも妥協なく踏み込んで研究していけるという確信が得られた 3 年半であった。

5. 主な研究成果リスト

(1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数: 10件

1. Kei Yamamoto, Mingran Xu, Jorge Puebla, Yoshichika Otani, Sadamichi Maekawa, “Interaction between surface acoustic waves and spin waves in a ferromagnetic thin film”, J. Magn. Magn. Mater. **545**, 168672 (2022).

弾性体の表面に強磁性体の薄膜を成膜した構造中を表面音波が伝搬する状況をモデル化して、強磁性体中のスピン波が磁気弾性結合および磁気回転結合を介して表面音波を吸収した際の表面音波の透過率を計算。従来使われていた理論モデルより 1 段階進んだ近似を採用することで CoFeB 薄膜に対する実験における磁気共鳴線幅の磁場角度依存性を説明し、レイリー波とラブ波の角度依存性を公式として定式化。

2. Liyang Liao, Jorge Puebla, Kei Yamamoto, Junyeon Kim, Sadamichi Maekawa, Yunyoung Hwang, You Ba, Yoshichika Otani, “Valley-Selective Phonon-Magnon Scattering in Magnetoelastic Superlattices”, Phys. Rev. Lett. **131**, 176701 (2023).

ピエゾ素子の表面に強磁性体であるニッケルを用いて数百 nm 周期の三角格子パターンを作製すると、そこを伝搬する表面音波はバレー自由度と呼ばれる波面回転方向の左右に対応した二値性を獲得し、かつ磁場によって片方のバレーに対応する表面音波のみ選択的に周期構造を透過することを実験・理論両面から解明、実証。

3. Thomas P. Lyons, Jorge Puebla, Kei Yamamoto, Russell S. Deacon, Yunyoung Hwang, Koji Ishibashi, Sadamichi Maekawa, Yoshichika Otani, “Acoustically Driven Magnon-Phonon Coupling in a Layered Antiferromagnet”, Phys. Rev. Lett., in press.

ピエゾ素子を用いた表面音波の透過率測定によって、vdW 反強磁性体である三塩化クロムのスピン波共鳴を検出することに成功。通常のマイクロ波磁場では容易に得られなかった低磁場領域の音響モードおよび高磁場領域の光学モードの共鳴周波数を詳細に決定し、その磁場角度依存性を理論モデルを用いて解析することで強い温度依存性を示す磁気異方性が存在することを明らかにした。

(2) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

(チュートリアル講演) “Suhl instability in spintronics”, Magnonics 2023, Le Touque, France, 2023 年 7 月 30 日

(招待講演) “Phenomenological description of surface acoustic waves hybridised with spin waves”, Samarkand International Symposium on Magnetism, Samarkand, Uzbekistan, 2023 年 7 月 4 日

プレスリリース「磁石によるうろこ模様で回る音波を制御」、2023 年 10 月 26 日

プレスリリース「隠された磁気を超音波で診断」、2023 年 11 月 8 日