

令和元年6月18日現在

機関番号：11401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K04619

研究課題名(和文) ナノ構造伝導体のリアル・スケール・シミュレーション手法の開拓と新機能の創出

研究課題名(英文) Development of real-scale simulation methods for nanostructure conductors and creation of new functions

研究代表者

林 正彦 (Hayashi, Masahiko)

秋田大学・教育文化学部・教授

研究者番号：60301040

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：tight-bindingモデルで記述されるナノ構造伝導体における電気伝導度に関して、再帰的グリーン関数法を用いた計算を進めると共に、大規模計算が可能な特異値分解を用いた計算手法を新規に開発した。これによって、歪みを導入したグラフェンやトポロジカル絶縁体における電気伝導に関して種々の理論的予測を行った。また、高温超伝導体を記述するt-Jモデルおよびそれより導かれるGinzburg-Landau理論により、電子状態および反磁性に関して自己無撞着調和近似等を用いた研究を行った。また、その知見に基づいて新規デバイスを提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

グラフェンなどのナノ伝導体やナノ超伝導体は次世代エレクトロニクス技術の基礎となる物質系であるが、その物性の理論的な予測のためには高精度な数値計算手法が不可欠である。本研究では、ナノ伝導体の電気伝導に関して、再帰的グリーン関数法やそれを特異値分解という数学的な手法を用いて拡張した方法を用いて、種々の物性の予測を行い、新規デバイス開発に資する結果を得た。また、超伝導体についても、t-Jモデルという高温超伝導体のモデルに関して自己無撞着調和近似を用いるなどの新しい試みを行い物性を議論した。以上の成果に基づいていくつかの新しいデバイス構造を提案したことも重要な成果といえる。

研究成果の概要(英文)：With regard to the electrical conductivity in nano-structured conductors described by tight-binding models, we performed calculations using the recursive Green's function method, and developed large-scale calculation scheme using singular value decomposition. Based on them, we made various theoretical predictions of electrical conduction in strained graphene and topological insulators. In addition, within the t-J model describing high-temperature superconductors and Ginzburg-Landau theory derived from it, we have studied electronic states and diamagnetism in terms of the self-consistent harmonic approximation and other methods. Based on the above findings, novel devices have been proposed.

研究分野：物性理論

キーワード：グラフェン トポロジカル絶縁体 電気伝導 超伝導 高温超伝導体 ナノ構造 ナノ超伝導体

1. 研究開始当初の背景

グラフェンを中心としたナノカーボン系材料、トポロジカル絶縁体や超伝導ナノ構造体は次世代のデバイス材料としての期待が高いが、それらの応用のためには電気伝導や磁性などを含めた物質の特性をより厳密に解析するシミュレーション手法の開発が不可欠である。特にこれらのナノ・デバイスの物性をよりリアルなサイズで解析することが技術的にも求められる。また、近年、種々の微細加工技術の進歩によって、新規デバイスの創成も可能になってきており、物性的な知識に基づく新しいアイデアが求められている。

2. 研究の目的

本研究は、これらの問題を解決し、電気伝導などの物理的特性を基礎的な理論に基づいて明らかにする手法を確立するとともに、ナノ構造体の物理的特性を解明し、新規デバイス応用への道を開拓することを目指して研究を行った。具体的には次の問題に取り組んだ。

(1) グラフェンやトポロジカル絶縁体などのナノ構造体の電気伝導に関して、再帰的グリーン関数法や特異値分解を用いた拡張した方法を用いて計算を行い不純物効果や歪み導入の効果などに関する物性評価を行う。

(2) 高温超伝導の物性に関してt-Jモデルやそれから導かれるGinzburg-Landauモデル等の有効モデルを用いて解析を行い、超伝導・反強磁性などの競合する秩序の下での物性を評価すると共に、新奇デバイスの可能性について研究を行う。

3. 研究の方法

(1) ナノ構造体における電気伝導の計算に関しては再帰的グリーン関数と特異値分解を用いてその拡張を行ったformalismを用いた。また、数値計算においては並列計算による効率化も行った。

(2) 高温超伝導体の諸物性の計算は主に、t-Jモデルに基づき行った。また、空間依存する物性の評価にはGinzburg-Landau理論を用いた。

4. 研究成果

(1) ナノ構造体の電気伝導

Haldane模型およびKane-Mele模型について、有限幅のワイヤーにおける電気伝導度を再帰的グリーン関数の方法を用いて評価した。特に試料内での不純物散乱に着目し、そのエッジ状態に対する効果を詳細に検討した。Haldane模型の場合には、エッジに1個の不純物がある場合にはその強さがどんなに大きくても後方散乱は起こらないが、試料全体に不純物が分布している場合には後方散乱が起こりうる。この効果は定性的には端の形状に依存しないが、不純物散乱の強さ依存性など定量的特性は端の形状により異なる。また、Kane-Mele模型の場合にはヘリカル・エッジ状態による電気伝導に対する1個の磁性不純物の効果に関して、非自明な散乱強度依存性を見出した。さらに、これらの振る舞いの物理的な起源を説明することを目的とし、T-matrixを用いた有効ポテンシャルの方法による計算を行った。その結果、不純物がB副格子（ジグザグ端）にあるときには、数値計算の結果とT-matrixの結果が異なることを見出した。また、ジグザグ端に2個の磁性不純物がある場合にS行列理論による解析を行い、ヘリカルエッジ状態の電気伝導度に対する寄与を明らかにした。

また、電気伝導度の計算のために本研究で開発した特異値分解を用いた計算方法によって、歪み導入グラフェンにおける電気伝導度の計算を行った。その結果、図1のようにzigzagの場合とarmchairの場合では歪みの効果が異なり、特に後者で顕著であることが分かった。

(2) 高温超伝導体の物性とその応用

高温超伝導体の物性に関しては、t-Jモデルに基づくミクロな解析を行った。まず、従来の平均場近似によるt-Jモデルの解析に対して熱的なゆらぎを取り入れた拡張を行った。具体的には自己無撞着調和近似を用いることによって、面間結合による3次元性および秩序変数の

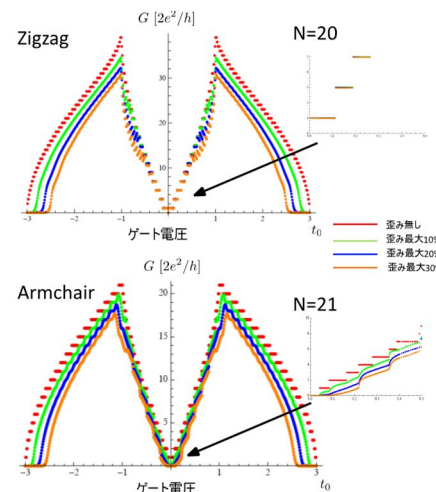


図1：歪み導入グラフェンの電気伝導度

ガウスの揺らぎを考慮して、温度とドーピング率に関する相図がどのように変更を受けるかを調べた(図2)。その結果、従来の平均場近似に基づく反強磁性および超伝導の転移温度は、1/2程度まで抑制されることが分かった。しかしながら、この理論の範囲では実験的に知られている擬ギャップ領域における反強磁性秩序の抑制は顕著には見られず、さらに不純物などの効果を考慮する必要があることが分かった。

さらに、以上の研究で得られた、高温超伝導体における反強磁性秩序と超伝導秩序との競合関係に着目して、近年実験的に精力的に研究されている、電気二重層電界効果トランジスタ(EDLFET)を用いた新奇デバイスを考案した。このデバイスでは、電解質溶液をナノ超伝導体の上に配置し、電場を加えることで、超伝導体表面に大きな電荷層を形成することが出来る。われわれはこの点に着目し、EDLFETの一部を金属で覆うことによって、その部分には電界が加わらないようにすることで、高濃度にドーパされた領域とほとんどドーパされていない領域の間の接合を作ることが出来ると考えた(図3)。この場合、超伝導体として、高温超伝導体のように、競合する秩序を持つ系を採用すると、2つの領域の間の近接効果によって、その境界にバルクでの超伝導転移温度よりも高温で超伝導を出現させることが出来る可能性があることを示した。ただし、反強磁性と超伝導の秩序の持つコヒーレンス長の間で一定の条件が成り立たなければ成らないので、現在の高温超伝導体で実現するためには何らかの工夫が必要であると考えられる。本研究の解析においては、t-Jモデルの研究で得られた反強磁性・超伝導競合関係を表現する有効的なGinzburg-Landau理論を用いた。

さらに、2次元t-Jモデルを用い、表面に誘起される時間反転対称性の破れた状態を、スピン軌道相互作用を導入して拡張したBogoliubov-de Gennes理論に基づき解析した。スピン軌道相互作用によりペアポテンシャルの副次的成分が変化し、表面状態密度のzero bias peakの形状が顕著に変化することを見出した。

(3) 層状超伝導体における分数磁束と反磁性

近年、ナノ超伝導体の実験的な研究において層状超伝導体における分数量子磁束が注目されている。本研究でも将来的なデバイス利用の可能性に着目し、Ginzburg-Landau理論およびMaxwell方程式を用いて、2層超伝導体におけるパンケーキ渦とジョセフソン渦の作る磁束に関する解析を行った。特に層間にジョセフソン結合が有る場合と無い場合との違いに着目した。その結果、層間にジョセフソン結合の有無は2層の間の磁束分布には影響するものの、その外側の磁束分布には(試料端で磁束が面間から抜け出る部分をのぞいて)全く影響しないことを示した。さらに、上の層に渦が有る場合と、下の層に渦が有る場合とで、外部での磁束分布がどのように変わるかを計算によって示した。

以上の他に、電荷密度波を対象とした時間に依存するGinzburg-Landau理論の導出および、金属フラレン高分子に関する研究も行った。

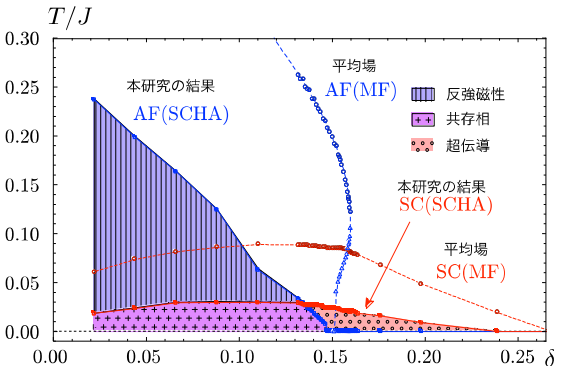


図2 : t-Jモデルの相図

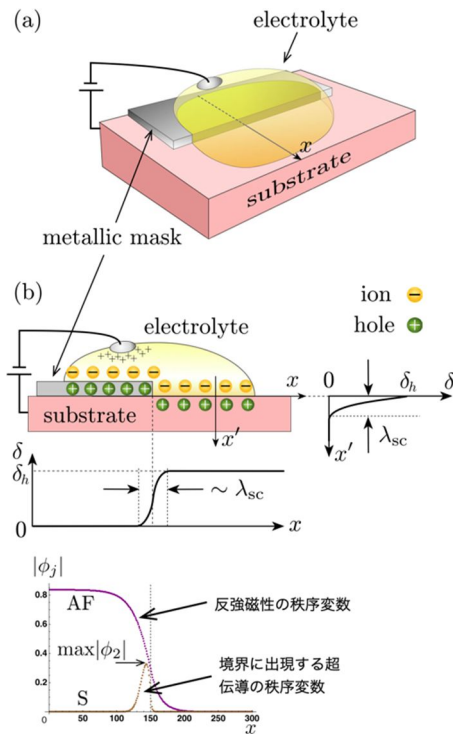


図3 : EDLFET デバイスの概念

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計4件）

Masahiko Hayashi, "A Model of Competing Orders and Its Application to a Novel Junction", J. Supercond. Nov. Magn. (2019) [掲載予定].

Masahiko Hayashi, "Effects of Interlayer Coupling on the Magnetic Flux of Vortices in Bi-layer Superconductors", J. Phys. Soc. Jpn. **88**, 035002 (2019).

Yositake Takane, Masahiko Hayashi, Hiromichi Ebisawa, "Time-Dependent Ginzburg-Landau Equation and Boltzmann Transport Equation for Charge-Density-Wave Conductors" J. Phys. Soc. Jpn. 85, 084709 (2016).

Hideo Yoshioka, Hiroyuki Shima, Yusuke Noda, Shota Ono, Kaoru Ohno, "Tomonaga-Luttinger liquid theory for metallic fullerenes polymers", Physical Review B 93, 165431 (2016).

〔学会発表〕（計24件）

林正彦, "多層系超伝導体における渦糸状態と磁束分布", 2019.3.17, 日本物理学会第74回年次大会,九州大学伊都キャンパス

辰己智子, 吉岡英生, 林正彦, "磁性不純物がランダムに分布した二次元蜂の巣格子模型の輸送特性", 2019.3.14, 同上

田沼慶忠, 田仲由喜夫, A.A. Golubov, "t-J模型による超伝導表面状態とスピン軌道相互作用", 2019.3.14, 同上

T. Tatsumi, H. Yoshioka, M. Hayashi, "Transport properties of two dimensional quantum spin Hall insulators with magnetic impurities", 2019.1.22, 第4回「トポロジーが紡ぐ物質科学のフロンティア」領域研究会

Masahiko Hayashi, "Fluctuation Effects on the Phase Diagram of Cuprate High-T_c Superconductors Based on the t-J Model", 2018.8, The 12th international conference on materials and mechanisms of superconductivity (M2S 2018)

辰己智子, 吉岡英生, 林正彦, "1つの磁性不純物を含む2次元量子スピンホール絶縁体の輸送特性", 2018.11, 第12回物性科学領域横断研究会

林正彦, "電気二重層トランジスターにおける秩序の制御の可能性について", 2018.9.11, 日本物理学会2018年秋季大会, 同志社大学京田辺キャンパス

辰己智子, 吉岡英生, 林正彦, "磁性不純物を含む二次元蜂の巣格子模型の輸送特性", 2018.9.9, 同上

林正彦, "高温超伝導体における反強磁性秩序および超伝導秩序のゆらぎと相転移", 2018.3.22, 日本物理学会第73回年次大会, 東京理科大, 野田キャンパス

辰己智子, 吉岡英生, 林正彦, "二次元蜂の巣格子単原子層物質の輸送特性", 2018.3.23, 同上

林正彦, "薄膜およびバルク磁性体・超伝導体の磁束観察について", 2018.12.2-4, 第26回渦糸国内会議, スパリゾートハワイアンズ会議室モアナ

林正彦, "t-Jモデルの超伝導および反強磁性秩序に対するゆらぎの効果", 2017.9.24, 日本物理学会2017年秋季大会, 岩手大学

Bo Lu, Pablo Burset, 田沼慶忠, Alexander A. Golubov, 浅野泰寛, 田仲由喜夫, "異方的超伝導体接合における不純物散乱効果", 2017.9, 同上

辰己智子, 吉岡英生, 林正彦, "Haldane模型の輸送特性に対する不純物散乱の効果II", 2017.9.24, 同上

林正彦, 吉岡英生, 友利ひかり, 神田晶申, "歪み導入グラフェンの電気伝導の理論", 2017.3.17, 日本物理学会第72回年次大会, 大阪大学

辰己智子, 吉岡英生, 林正彦, "Haldane模型の輸送特性に対する不純物散乱の効果", 2017.3.18, 同上

Tomoko Tatsumi, Hideo Yoshioka, and Masahiko Hayashi, "Transport properties of ribbon consisting of Haldane Model", 2017, International Conference on Topological Materials Science 2017 (TopoMat2017)

Akane Kayano and Hideo Yoshioka, "Charge Ordering of Quarter-Filled One-Dimensional

Extended Hubbard Model with t - d Coupling", 2017, The 12th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM2017)

辰己智子, 吉岡英生, 林正彦, "Haldane模型からなる接合系の輸送特性", 2016.9, 日本物理学会第72回年次大会, 金沢大学

田沼慶忠, 田仲由喜夫, A.A. Golubov, "スピン軌道相互作用を持つ t - J モデルによる d 波超伝導体表面と奇周波数ペア", 同上

②1 能藤高広, 田沼慶忠, 小野田勝, "グラフェン・超伝導体接合界面でのアンドレーエフ反射の影響", 2016.3, 日本物理学会第71回年次大会, 東北学院大学

②2 田沼慶忠, "表面での時間反転対称性の破れた超伝導状態とスピン軌道相互作用", 2016.11.28, 第24回渦糸物理国内会議, あきた芸術村

②3 田沼慶忠, 小野田勝, 林正彦, "グラフェン型トポロジカル絶縁体・超伝導体接合におけるエッジ状態とトンネル効果II", 2015.9, 日本物理学会2015年秋季大会, 関西大学

②4 友利ひかり, 平出璃音可, 大塚洋一, 林正彦, 吉岡英生, 渡辺賢司, 谷口尚, 神田晶申, "BN上グラフェンへの局所1軸ひずみ導入法の開発", 同上

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：吉岡 英生

ローマ字氏名：Hideo Yoahioka

所属研究機関名：奈良女子大学

部局名：自然科学系

職名：教授

研究者番号（8桁）：40252225

研究分担者氏名：田沼 慶忠

ローマ字氏名：Yasunari Tanuma

所属研究機関名：秋田大学

部局名：理工学研究科

職名：准教授

研究者番号（8桁）：90360213

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。