

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 6 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2010～2013

課題番号：22740196

研究課題名(和文) グラフェンにおけるトポロジと電子相関の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical studies of topological and electron correlation effects in graphene

研究代表者

江澤 雅彦 (Ezawa, Motohiko)

東京大学・大学院工学系研究科・助教

研究者番号：10504805

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,400,000円、(間接経費) 720,000円

研究成果の概要(和文)：グラフェン及び関連物質であるシリセンの電子物性とトポロジカルな性質について研究を行った。特に様々なトポロジカル絶縁体とトポロジカル相転移について研究を行った。三角グラフェンの波動関数を厳密に求めた。グラフェン・ナノディスク・アレイが平坦バンドを持つ事を示した。シリセンの構造が座屈している事により、垂直電場でバンドギャップを制御出来る事を示した。シリセンに強磁性体を貼り付ける事で量子異常ホール効果を示す事を予言した。また、光照射でトポロジカル相転移を起こし、臨界点で単一ディラック・コーン状態が出現する事を予言した。また、磁性体中のトポロジカル構造であるスキルミオンについても研究を行った。

研究成果の概要(英文)：I studied electronic and topological properties of graphene and silicene (graphene's cousin). In particular, I analyzed various topological insulators and their topological phase transitions. Main results read as follows: The zero-energy sector of the triangular zigzag graphene is investigated based on the Dirac theory of graphene. Analytic wave functions of triangular graphene are obtained. A vortex with the winding number 2 emerges in triangular graphene. Graphene nanodisk arrays have multi-degenerate perfect flat bands and are ferromagnetic. The band gap of silicene can be controlled by external electric field applied perpendicular to silicene. Silicene shows the quantum anomalous-Hall effect when ferromagnetic is attached. Furthermore, silicene undergoes a topological phase transition by photo-irradiation, where single-Dirac cone states appear at the critical point. I also studied the skyrmion, which is a topological structure in magnet.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性

キーワード：グラフェン シリセン トポロジカル絶縁体 スキルミオン 量子スピンホール効果 チャーン数 メロン 量子異常ホール効果

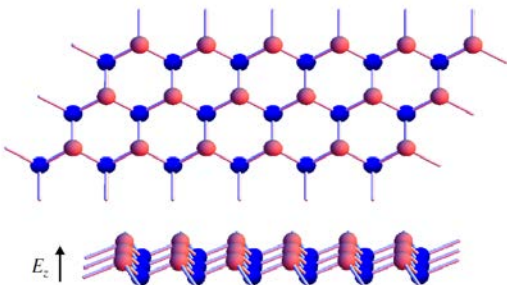
## 1. 研究開始当初の背景

グラフェンのトポロジーの研究に関する国内及び国外の研究の動向及び位置づけを述べる。グラフェンは炭素がハニカム格子を組んだ二次元結晶である。グラフェンは電気伝導、熱伝導、機械特性が極めて高く、応用上も重要な物質である。低エネルギー励起はディラック方程式で記述され、理論的にも数多くの美しい性質を持っている。2004年に実験的に初めて合成され、理論・実験ともに爆発的な研究がなされてきた。2010年にノーベル賞の対象となった事は記憶に新しい。

私はグラフェンのエッジ状態、特にグラフェン・ナノリボンやグラフェン・ナノディスクなどの電子状態、バンド構造、磁性を研究してきた。特に、三角グラフェンには長さに比例してゼロエネルギー状態が存在し、強磁性を示す事を示した。また、グラフェンの量子ホール効果なども研究してきた。

Kane と Mele により、グラフェンで量子スピンホール効果が起きる事が理論的に提案され、現在のトポロジカル絶縁体の理論の基礎となった。しかし、グラフェンのスピン軌道相互作用はマイクロ電子ボルトのオーダーであり、極低温でしか、実現せず課題となっていた。その後、水銀化合物で量子スピンホール効果が実験的に観測されたが、毒性の強い物質である事から、実験的に扱いにくく、また、興行的な応用が困難であるなどの課題がある。

シリコンで出来たハニカム構造であるシリセンは1994年に白石氏らによって、構造安定であり、ディラック・コーンを持つ事が第一原理計算で言われていた。2011年に Yugu Yao 氏らのグループにより、スピン軌道相互作用がミリ電子ボルトのオーダーで存在する事が第一原理計算によって示され、シリセンが量子スピンホール効果を実現する有力な物質である事が示された。また、2012年にフランスの Guy Le Lay らのグループと東大新領域の川合・高木グループによって独立に銀基盤上でシリセンの合成が確認された。また、同時期に北陸先端大の高村グループによってジルコニウム二ホウ化物上でもシリセンの合成が確認された。また、イリジウム基板上でもシリセンの合成が確認されている。



私はグラフェンの研究の初期から参入し、グラフェン・ナノリボンや量子ホール効果などの分野で成果を上げてきた。基礎理論からデバイスの提案まで幅広く研究を行ってきた。

以上のグラフェンおよび関連物質のトポロジーに加えて、私は広くトポロジカル物性に関心を抱いている。トポロジカル物性のよく知られた例として、

磁性体中のトポロジカル励起がある。特に、スキルミオンが Dzyaloshinsky-Moriya 相互作用によって安定化される事は Bogdanov らによって理論的に示されていた。

## 2. 研究の目的

グラフェンが実験的に合成され、単原子層物質に注目が集まっている。グラフェンは質量がゼロのディラック方程式で記述され、多くの理論的に美しい性質がある。

本研究の目的は、グラフェン及び関連物質の電子物性及び、トポロジカルな性質を明らかにする事である。バルクの性質をディラック理論を用いて解析的に決定する。また、強束縛近似を厳密対角化する事により、エッジ状態を明らかにする。トポロジカル相転移を起こす方法を探索する。また、グラフェンより優れた性質を持つ物質を探索し、その性質を明らかにする。

グラフェンのエッジがコーナーを作っている場合のエッジ状態を解析的に議論する。また、三角グラフェンのエッジ状態を解析的に構成し、渦度を計算する。グラフェン・ナノディスクを周期的にならべた場合に電気特性、磁気特性を明らかにする。グラフェン・ナノディスクの複合系を用いたデバイスを考案する。また、電気機械的特性を明らかにし、パイエルス転移などとの関係を明らかにする。

特に、電場でのバンドギャップの制御可能性を探索する。更に、電場が不均一の場合にエッジ状態が出現するかを確認し、出現する場合にはエッジ状態を解析的に求める。量子スピンホール効果や量子異常ホール効果などの様々なトポロジカル相を探索する。また、磁性体を近接させたり、光照射で新しいトポロジカル絶縁体を出現させられないか探索する。

グラフェンには二層グラフェン、カーボン・ナノチューブ・フラーレンなど多彩な派生物質が存在する。シリセンにおけるこれらの対応物が存在しないか探索し、その電子物性とトポロジカルな性質を明らかにする。

また、磁性体中にもトポロジカルな構造がある。特にスカーミオンやメロンについて安定性を調べる。安定化に際しては、強磁性体だけでは不十分であるために、安定化に何が必要であるかを探索する。また、有限温度での相図を求める。

## 3. 研究の方法

解析的な方法と数値計算を併用し、結果の一致を確かめる。解析的方法は現象の物理的理由を理解する上で極めて重要である。特に低エネルギー励起に対するディラック理論は解析的な結果を得る事が可能である。トポロジカル相の決定にはチャーン数やスピン・チャーン数などのトポロジカル指数をディラック理論に対して、解析的に決定する。また、強束縛近似模型を用いてナノリボンのエッジ状態を厳密対角化により求め、バルク・エッジ対応を用いてトポロジカル相を決定する。不均一電場をかけた時のエッジ状態は Jackiw-Rebbi 解を時間反転対称性のある場合に拡張する事で求める。光照射の応答は

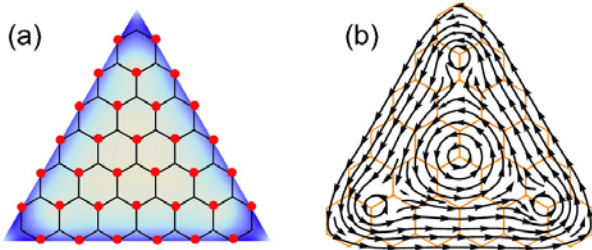
時間的に周期的な系に対して適応可能な Floquet 理論を用いる。また、二次摂動で Haldane 項が出現する事を用いる。

スキルミオンの安定性は非線形シグマ模型に双極子相互作用や Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用を導入したハミルトニアンを変分法を用いてエネルギーを最小化する。また、Pontryagin 数を極座標表示を用いて解析的に評価する事でスキルミオンである事を示す。メロンの構造は楕円関数を用いた解で記述する。有限温度での相図はエントロピーを評価し、分配関数により、決定する。

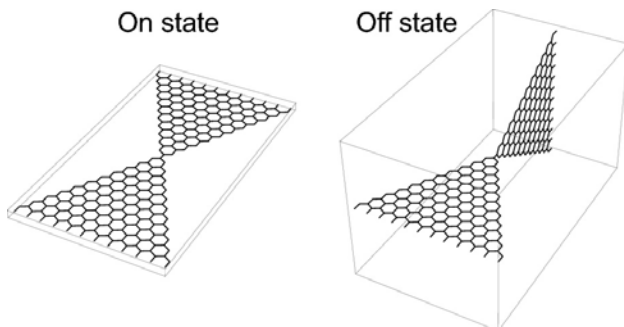
#### 4. 研究成果

グラフェン及びシリセンの電子物性、特にトポロジカルな性質について研究した。

1) グラフェンのエッジが 60 度で接しているコーナーに対して、二つのジグザグ・エッジ状態の波動関数を重ね合わせ、境界条件を用いる事により、解析的な波動関数を構成した。

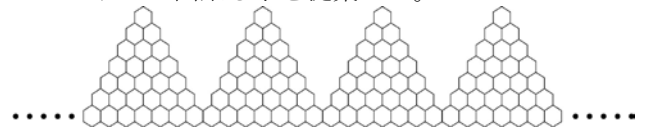


2) グラフェン・ナノディスクは閉じた境界を持つグラフェン派生物である。このナノディスクという新しい物理系の豊かな電磁的性質を明らかにした。特に、サイズ  $N$  のジグザグ三角ナノディスクは  $N$  重縮退した零エネルギー状態を持つ。零エネルギー状態を対称群  $C_{3v}$  の既約表現で分類した。更に、グラフェンの連続理論である Dirac 方程式を用いて定式化し、全ての波動関数と量子数を決定した。また、実空間ベリー位相を計算することで渦糸構造を発見した。特に、ノディスクの重心での渦度は 0, 1, 2 の値をとることを示した。これらの渦は基底状態に現れる磁束として観測可能である。一般に渦度 2 の渦状態はエネルギーが高いので不安定であり、性系のみならず全物理系においても実現しない。ノディスクにおいて実現したのは三角対称性の強い制約からである。

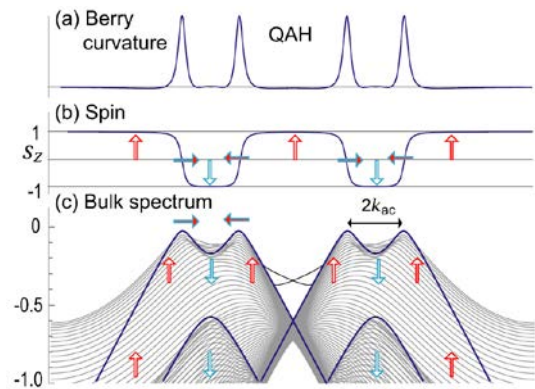


3) グラフェン・ナノディスクを並べた構造であるグラフェン・ナノディスク・アレイを提案し、高スピン状態が発生する事を導いた。グラフェン・ナ

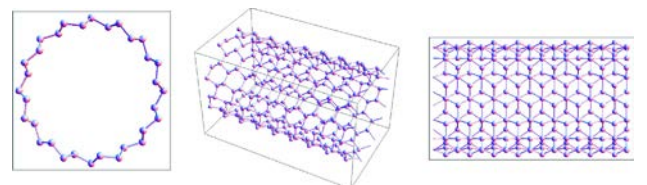
ノディスクを用いた電気機械デバイスを提案した。グラフェン・ナノ構造を用いた電気機械的性質を応用してメカニカル・スイッチを提案した。二つの三角グラフェンを接合し、波動関数の重なり積分が回転角によって変化する事を応用してナノメカニカル・スイッチを提案した。またグラフェン・ナノディスクを並べたグラフェン・ナノディスク・アレイのバンドを計算し、多重縮退した完全平坦バンドが存在することを示した。これによりグラフェン・ナノディスク・アレイが磁性元素を用いないで強磁性になることをしめした。レアアースを用いないで強磁性体を作成できることは今後の元素戦略の上でも重要になる。またジグザグ・グラフェン・ナノリボンを機械的に引っ張ることにより、人為的にパイエルズ転移を起こすことでナノメカニカル・ストレッチ・センサーが出来る事を提案した。



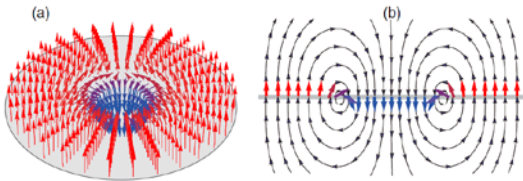
4) シリセンの構造が座屈している事を応用してシリセンに垂直に電場をかける事でバンドギャップを制御出来る事を示した。また、臨界電場で量子スピンホール相から自明な相へ相転移する事を示した。このトポロジカル相転移を反磁性で測定出来る事を提案した。また、電場を非一様にする事でヘリカル・エッジ状態を作り出す事が出来る事を示した。シリセンに強磁性体を貼り付ける事で、量子異常ホール効果が起きる事を示した。運動量空間でスカーミオンが生じている事を示した。



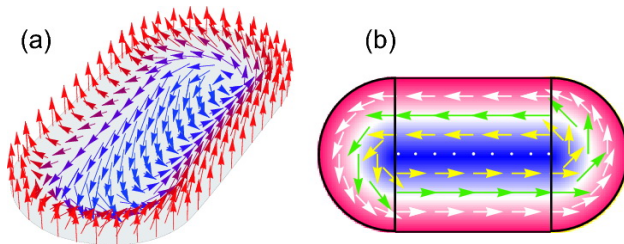
5) 光照射によってもバンドギャップが制御可能である事を示し、臨界点でシングル・ディラックコーン状態が出現する事を示した。また、光誘起量子異常ホール相へトポロジカル相転移する事を示した。円偏光を照射する事で、バレーを選択的に電子励起を起こせる事を示した。また、トポロジカル相と自明な相で光り吸収の選択則が反転する事を示した。また、シリコン・ナノチューブや二層シリセンの電子状態も明らかにした。



6) 強磁性体中のトポロジカル励起であるスキルミオンについても研究した。異方的非線形シグマ模型に磁気双極子相互作用を導入した系を解析し、スキルミオンの新たな安定化機構を提案した。スキルミオンの半径を外部磁場の関数として解析的に求めた。磁気双極子相互作用によって実現するスキルミオンの半径はマイクロメートルのオーダーであり、「巨大スキルミオン」と名付けた。巨大スキルミオンには最小半径があることを示した。



7) またカイラル強磁性体中のトポロジカル励起についても研究を行った。カイラル磁性体中ではDzyaloshinskii-Moriya相互作用がスケールを与える。カイラル強磁性体中にはコンパクトスキルミオンとコンパクトメロンが存在することも示した。また磁場と温度に対して相図を解析的に求めた。



## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 15 件)

- 1) M. Ezawa, Photo-Induced Topological Phase Transition and Single Dirac-Cone State in Silicene, *Phys. Rev. Lett.* 110, 026603 (2013) DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.026603> (査読有)
- 2) M. Ezawa, Spin-Valley Optical Selection Rule and Strong Circular Dichroism in Silicene, *Phys. Rev. B* 86, 161407(R) (2012) DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.86.161407> (査読有)
- 3) M. Ezawa, Topological Phase Transition and Electrically Tunable Diamagnetism in Silicene, *Eur. Phys. J. B* 85, 363 (2012) DOI:<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2012-30577-0> (査読有)
- 4) M. Ezawa, Quasi-Topological Insulator and Trigonal Warping in Gated Bilayer Silicene, *J. Phys. Soc. Jpn.* 81, 104713 (2012) DOI:<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.81.104713> (査読有)
- 5) M. Ezawa, Dirac Theory and Topological Phases of Silicon Nanotube, *Europhysics*

*Letters* 98, 67001 (2012) DOI:[10.1209/0295-5075/98/67001](http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/98/67001) (査読有)

- 6) M. Ezawa, Quantum Hall Effects in Silicene, *J. Phys. Soc. Jpn* 81, 064705 (2012) DOI:<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.81.064705> (査読有)
- 7) M. Ezawa, Valley-Polarized Metals and Quantum Anomalous Hall Effect in Silicene, *Phys. Rev. Lett* 109, 055502 (2012) DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.055502> (査読有)
- 8) M. Ezawa, Topological Insulator and Helical Zero Mode in Silicene under Inhomogeneous Electric Field, *New J. Phys.* 14, 033003 (2012) DOI: [:10.1088/1367-2630/14/3/033003](http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/14/3/033003) (査読有)
- 9) M. Ezawa, Skyrmion Burst and Multiple Quantum Walk in Thin Ferromagnetic Films, *Phys. Lett. A* 375, 3610 (2011) DOI:<http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2011.08.030> (査読有)
- 10) M. Ezawa, Complex Structure of Triangular Graphene: Electronic, Magnetic and Electromechanical Properties, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* 12, 386 (2012) DOI:<http://dx.doi.org/10.1166/jnn.2012.5350> (査読有)
- 11) M. Ezawa, Compact Merons and Skyrmions in Thin Chiral Magnetic Films. *Phys. Rev. B* 83, 100408(R) (2011) DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.83.100408> (査読有)
- 12) M. Ezawa, Giant Skyrmions Stabilized by Dipole-Dipole Interactions in Thin Ferromagnetic Films, *Phys. Rev. Lett.* 105, 197202 (2010), DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.197202> (査読有)
- 13) A. Shitade, M. Ezawa, N. Nagaosa, Manipulation of Two Spin Qubits in a Double Quantum Dot using an Electric Field, *Phys. Rev. B* 82, 195305 (2010), DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.82.195305>
- 14) M. Ezawa and J. Zang, Current Modulator based on Topological Insulator with Sliding Magnetic Superlattice, *Phys. Rev. B* 81, 193302 (2010), DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.193302> (査読有)
- 15) M. Ezawa, Dirac fermions in a graphene nanodisk and a graphene corner: Texture of vortices with an unusual winding number, *Phys. Rev. B* 81, 201402(R) (2010) DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.201402> (査読有)

[学会発表] (計 17 件)

- 1) 山影相, 江澤雅彦, 田仲由喜夫, 永長直人、シ

リセン pn 接合の輸送理論, 日本物理学会, 第 68 回年次大会 広島大学 東広島キャンパス, 2013 年 3 月 26-29 日

- 2) M. Ezawa, Quantum Anomalous Hall Effects and Topological Phase Transitions in Silicene, (invited talk) APS2013 March Meeting 18-22 Baltimore Convention Center Baltimore, March 19 (2013), Maryland, USA
- 3) M. Ezawa, Engineering topological phase transitions in silicene (oral presentation) QS2C Theory Forum: International Symposium on "Strongly Correlated Quantum Science" January 26-29, 2013, Ito International Research Center, The Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan
- 4) M. Ezawa, Valley Dependent Physics in Silicene, (invited talk) EMN west meeting, energy materials nanotechnology January 7-10, 2013, Houston, USA
- 5) M. Ezawa, Silicene: Silicon-based topological material (oral presentation) International Symposium "Nanoscience and Quantum Physics 2012" (nanoPHYS'12) Dec. 17-19 (2012), Roppongi, Tokyo, Japan
- 6) 江澤雅彦, シリセンにおけるトポロジカル相転移, 第 6 回物性科学領域横断研究会 (領域合同研究会), 2012 年 11 月 27-28 日, 本郷, 東京
- 7) 江澤雅彦, シリセンにおけるトポロジカル絶縁体, 日本物理学会 2012 年秋季大会 (横浜国立大学) 20pEC-11, 2012 年 9 月 20 日
- 8) M. Ezawa, Topological Insulators in Silicene: Quantum Hall, Quantum Spin Hall and Quantum Anomalous Hall Effects (oral presentation) 31st International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29th to August 3rd (2012), Zurich, Switzerland
- 9) 江澤雅彦, グラフェンナノ構造の電氣的磁氣的性質の理論的研究, 日本物理学会 2012 年 年次大会にて若手奨励賞受賞記念講演 (関西学院大) 27PCE-2, 2012 年 3 月 27 日
- 10) M. Ezawa, Giant Skyrmions and Compact Merons in Thin Ferromagnetic Films (oral presentation) Novel Quantum States in Condensed Matter 2011 (NQS2011) Nov.7-Dec.9 (2011), Kyoto, Japan
- 11) 江澤雅彦, 強磁性薄膜中のスキルミオンとメロン, 第 4 回 物性科学領域横断研究会, 2010 年 11 月 13-15 日, 本郷, 東京
- 12) M. Ezawa, Graphene Nanodisks: Nanomagnets made of Graphene, (oral presentation), Asian Conference on Nanoscience & Nanotechnology Nov. 1-3, (2010), Odaiba, Japan
- 13) M. Ezawa, Giant Skyrmion in Thin Ferromagnetic Film: The importance of Magnetic Dipole-Dipole interaction (poster presentation) 2010 Opening Symposium of QS2C Theory Forum Sep. 27-30, 2010, RIKEN, Japan
- 14) 江澤雅彦, 三角グラフェンの Dirac 理論と特異な渦構造, 日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪

府立大学中百舌鳥キャンパス) 24aWQ-5, 2010 年 9 月 24 日

- 15) 下出敦夫, 江澤雅彦, 永長直人, 二重量子ドットにおけるスピンの電氣的制御, 日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学中百舌鳥キャンパス) 24pWQ-13, 2010 年 9 月 24 日
- 16) M. Ezawa, Quasiferromagnetism and Spintronics in Trigonal Graphene, (poster presentation), The 6th International Conference on the Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors, Hongo, Aug. 1-4 (2010), Tokyo, Japan
- 17) M. Ezawa, Peculiar Vortex Structure with Unusual Winding Number in Trigonal Graphene, (oral presentation) 30th International Conference on the Physics of Semiconductors, July 25-30 (2010), Seoul, Korea

[図書] (計 1 件)

Motohiko Ezawa, Physics of Triangular Graphene, Physics and Applications of Graphene - Theory, Sergey Mikhailov (Ed.), ISBN: 978-953-307-152-7, InTech (2011)

[その他]

ホームページ等

<http://park.itc.u-tokyo.ac.jp/nagaosa-lab/ezawa/profile.html>

<http://park.itc.u-tokyo.ac.jp/nagaosa-lab/ezawa/papers.html>

## 6. 研究組織

(1) 研究代表者

江澤 雅彦 ( Motohiko Ezawa )

東京大学・大学院工学系研究科・助教

研究者番号: 10504805