

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 10 日現在

機関番号：11401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2012～2015

課題番号：24540392

研究課題名(和文)トポロジカル結晶の物理とナノ結晶エンジニアリング

研究課題名(英文)Physics of Topological Crystals and Nano-crystal engineering

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) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：メビウスの帯など新奇な形状を持つトポロジカル結晶中の構造および物性を明らかにするために、メゾ・スケールの現象を理論的に取り扱うための理論構築を行い、さらにそれに基づいて形状や幾何学が問題となるような物理系における新奇物理現象の探求を行った。具体的には、トポロジカル結晶中に生じる電荷密度波のダイナミクスを準粒子というミクロな対象と凝縮体というマクロな対象との相互作用まで含めて正確に扱えるような、時間に依存するギンツブルグ・ランダウ理論の構築を行った。また、高温超伝導体を記述するt-Jモデルに基づいて、メゾ・スケールにおけるゆらぎや界面効果を現象論的なアプローチと微視的理論を用いて解析した。

研究成果の概要(英文)：In order to clarify the crystal structures and novel physical properties of topological crystals, such as moebius-strip crystals, we have constructed theoretical frameworks to treat various mesoscopic phenomena, and also investigated physics in the systems where topology and geometry are important. Especially, we developed a new time-dependent Ginzburg-Landau equations, in order to study the charge density wave dynamics in topological crystals, taking into account the interplay between microscopic quasi-particles and macroscopic condensate. We also studied the fluctuations and surface effects of the cuprate high-Tc superconductors at mesoscopic scales, based on phenomenological and microscopic treatment of the t-J model.

研究分野：物性理論

キーワード：電荷密度波 高温超伝導 トポロジカル結晶

## 1. 研究開始当初の背景

近年、カーボンナノチューブなど、その幾何学的に新奇性を持ち、電子材料としてもユニークな物質が大きな注目を集めている。これ以外の素材でも、ナノチューブと同様の形状を持つ単結晶が発見されている (NbSe<sub>3</sub>, MoO<sub>2</sub>, TaS<sub>3</sub>, MoS<sub>2</sub> など)。特に北大の丹田らは、2002年に従来、針状結晶としてしか合成されていなかった NbSe<sub>3</sub> のチューブやリング状単結晶の合成に成功し、さらに「メビウスの帯状単結晶」という極めて新奇性の高い物質が合成可能であることを示した。これらの事実は、チューブ状単結晶が、炭素のみの示す「特殊な」状態ではないということを示唆している。この物質群はトポロジカル結晶という、ミクロとマクロの中間に存在し、従来の3次元的な結晶とは異なる、メゾ・スケールの新しい物質群として位置づけることが出来る。

これらの物質の物性解析には、ミクロな原子・分子レベルでの第一原理計算・分子動力学とマクロな連続体レベルでの弾性体力学やレオロジーといった理論を段階的につなぐ、マルチスケール手法の開発が必要となる。われわれはこの観点から、それらを取り扱う理論的枠組みに関する予備的な研究を行ってきた。例えば、円筒状結晶において位相欠陥の自由度そのものに着目し、自由エネルギーを計算することで、結晶の大きさに応じて位相欠陥分布および結晶の形状が変化することを見出した。この相図は実験的にも妥当性が確認されつつある。また、物性の観点から、トポロジカル結晶についても研究を行ってきた。(例えば、メビウスの帯型超伝導体の Little-Parks 効果についての、Ginzburg-Landau 方程式や Bogoliubov-de Gennes 方程式に基づく解析)しかし、より現実的な大きさの系で、さらに結晶の曲率まで加味して、同等の計算を行うことは現在の計算機性能では不可能であり、新しい方法論が必要である。さらに、近年グラフェンが作成され、注目されている。

以上のような観点から、トポロジカル結晶・ナノ結晶の物理を明らかにするために、ミクロとマクロをつなぐ、マルチスケール理論が不可欠であると考えて、本申請に至った。

## 2. 研究の目的

### (1) 物性や物質構造の解析のためのメゾ・スケールにおける有効理論の構築

本研究の目的は、結晶学や物性物理学において、ナノスケールのトポロジカル結晶に適用可能な新規理論の展開を目指すことである。電荷密度波や超伝導秩序を示す NbSe<sub>3</sub> 等から成るトポロジカル結晶においては、幾何学的に特異な形状の効果により、通常のバルク結晶では見られない秩序状態が現れうると考えられる。これは結晶の形状変化によっ

て格子定数が変化し、それにとまなう電子の飛び移り積分の変化が秩序状態に影響をおよぼすと考えることができる。このような状況を理論的に解析するために、超伝導や電荷密度波(CDW)状態を、tight binding モデルから、Bogoliubov-de Gennes 方程式を用いて、また GL 自由エネルギーを微視的に導出することによってシミュレートするための理論的枠組みを構築することを目的とした。当初はさらに、結晶の3次元的な形状を位相欠陥のダイナミクスとして記述する「位相欠陥動力学」など、ミクロな理論とマクロな理論を折衷的に扱う手法によるマルチスケール理論を構築も目指した。

### (2) トポロジカル結晶などメゾ・スケールの系における新奇物理現象の解析

さらに、もう一つの柱としては、従来あまり扱われてこなかったような、トポロジカル形状に起因する特殊な界面効果などメゾスコピックな物理現象の解析手法の開拓と新奇現象の発見であった。マクロとミクロをつなぐ理論として、「準古典近似の手法」をナノ・スケールの現象に適用する可能性について模索することで、準粒子束縛状態や界面状態等に対するトポロジカルな境界条件の影響を矛盾なく取り扱うことを目指した。また、これによってトポロジカル結晶の超伝導や CDW 秩序などの物性について明らかにすることも目的とした。

## 3. 研究の方法

### (1) メゾ・スケールの電荷密度波のダイナミクスを取り扱うための手法の開発

本研究の大きな目標として、トポロジカル結晶中の CDW などの興味深い物性現象を記述するための枠組みの構築がある。このためにわれわれは従来から CDW において議論されてきた時間に依存するギンツブルグ・ランダウ理論 (TDGL) の再定式化を試みた。まず、現象論的なレベルで TDGL を導出し、その数値シミュレーションを行うことで、実施の物理現象との比較によって理論的な妥当性の検討をおこなった。さらに、微視的な理論に基づく導出の可能性について検討を行うことによっても、理論の高精度化を図った。

### (2) 高温超伝導体におけるゆらぎと新奇界面現象の解析

興味ある物質系として銅酸化物高温超伝導体に着目し、 $t$ - $J$  モデルに基づく秩序相の解析を行った。メゾ・スケールでの現象にこのモデルを適用する際に問題となる、ゆらぎと種々の秩序の競合状態を解析するために、まず平均場近似の範囲内で、 $t$ - $J$  モデルの平衡状態を詳細に解析した。次に、この系における熱的なゆらぎを、平均場近似を越えて取り入れるための計算手法について研究を行った。

#### 4. 研究成果

##### (1) 電荷密度波における時間に依存するギンツブルグ・ランダウ方程式

われわれは、TDGLの構成法について研究を行ってきたが、その成果に基づいて新規 TDGLを提案した。従来の TDGL は準粒子の自由度を積分して消去することによって得られていたが、この方法では準粒子と凝縮体の間での電荷のやり取りが上手く記述できない。この点は、CDW の滑り伝導における電流電極付近での位相滑りなどの記述において不十分である。われわれは、最も単純な1次元 CDWをモデルとして考察し、右向きと左向きに進む電子の化学ポテンシャルを別個に考慮することによって、準粒子と凝縮体のダイナミクスを統一的に記述できる TDGL のプロトタイプを見出した。この方程式は次の通りである。(論文 参照)

1つ目は、凝縮体の TDGL であり、

$$\begin{aligned} \hbar \partial_t \Delta + i \mu_a \Delta &= \frac{8T_c}{\pi} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \Delta \\ + \frac{8c_1}{\pi T_c} \left\{ \frac{(\hbar v_F)^2}{4} \left(\partial_x - i \frac{\mu_s}{\hbar v_F}\right)^2 \Delta - \frac{|\Delta|^2 \Delta}{2} \right\} + \alpha \end{aligned}$$

で与えられる。 $\Delta$ が CDW の秩序変数、 $a$ が CDW のピン止めを表す項である。(詳細は、論文参照) 従来のものと似ているが、 $m_s$ および $m_a$ が右向きと左向きに進む電子の化学ポテンシャルの和および差である。

さらに、準粒子の運動を記述する Boltzmann 型の方程式が必要となる。これに関しては、次のように仮定した。

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{e} \partial_t j + \frac{(\hbar v_F)^2}{e} \partial_x \rho - \frac{\hbar v_F e}{\pi} E \\ = \frac{\hbar}{2\pi\tau_{tr}} \left(1 - \frac{2c_1}{T^2} |\Delta|^2\right) \mu_a \end{aligned}$$

$j$ および $\rho$ 、それぞれ電流と電荷密度である。これらの方程式を連立してとくことによって、CDW の運動を解析することが出来る。本研究では、図1のように、電流電極からの電流の流入を仮定して、数値計算を行い、

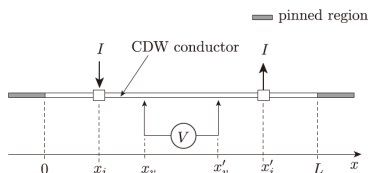


図1：シミュレーションに用いた系の形状

電流とそれによって生じる電圧の関係を探った。その結果、図2のように非線形な I-V 特性が再現されてくることが分かった。さらに、秩序変数のダイナミクスを可視化することによって、図3のようなグラフを得た。グラフは $|\Delta|$ をプロットしたもので、 $t$ は時間を表す。位相の滑りが周期的に生じる様子(図の周期構造)が分かる。

本研究において導出した方程式は、その後

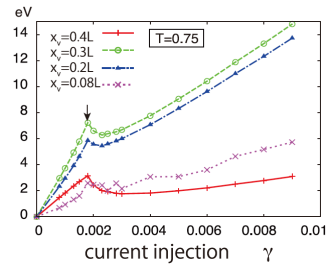


図2：電荷密度波の I-V 曲線

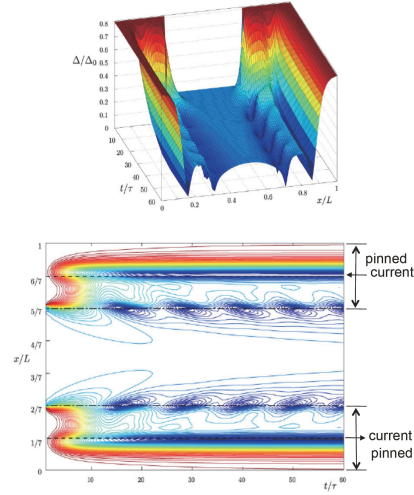


図3：秩序変数の振幅の時間発展

も微視的な理論からの導出を継続して行っており、いくつかの新しい修正点が見つかった。しかし、大枠では妥当であることが確認されている。現在は、これらの方程式に基づいてさらなる数値シミュレーションを行っており、最終的にトポロジカル結晶中の CDW についても解析可能なところまで近づいている。

##### (2) 高温超伝導体におけるゆらぎと新奇界面現象の解析

特徴的な結晶構造を持っており、界面や形状の効果が大きいと期待できる銅酸化物高温超伝導体に関して  $t$ - $J$ モデルに基づく研究を行った。まず、平均場近似の範囲で秩序相の構造を明らかにすることを行った。この点に関しては、既に先行研究があり、ある程度詳細な相図が明らかになっているが、本研究ではギンツブルグ・ランダウ理論に基づき、その秩序変数に関する展開の更に高次を解析することによって、相転移の詳細を解析し

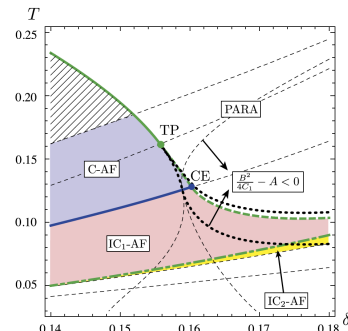


図4： $t$ - $J$ モデルの平均場の相図

た。(論文 参照)この研究ではまず、反強磁性秩序に注目して調べた。図4がドーピング率および温度の平面で表した反強磁性相の相図である。ICのインコメンシュレート相は、さらに結晶軸との方向性によって2つに分類されることが分かった。さらに、高ドーピング側(図のTPより右)では、相転移自体が1次転移となることが分かった。

さらに、ゆらぎを使う手法に関しても研究を行い、ゆらぎを考慮すると反強磁性相転移温度は平均場近似でものよりも低温側に有為にシフトすることを見出した。

また、研究分担者を中心として、 $t$ - $J$ モデルで記述される系の界面付近における秩序相についても研究を行った。(論文②~④参照)その結果、YBCO系の(1,1,0)界面においては、時間反転対称性を破るflux相が、ドーピングの広い領域において安定に存在することが示された。このことは、例えば実験で、YBCOのab面に接合された正常金属との間でゼロ・バイアス・コンダクタンスの分裂等、時間反転対称性の破れが観測されているにも関わらず、自発磁場が存在しないことをコンシステントに説明できる可能性があり、大きな成果であると言える。

#### 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 6件)

Masahiko Hayashi, Yoshitake Takane, Hironichi Ebisawa, "Time-dependent Ginzburg-Landau equation of charge-density-waves and numerical simulation of the sliding", Physica B **460**, 6-10 (2015) 査読有り.

DOI:10.1016/j.physb.2014.11.029

Kazuhiro Kuboki, "Flux Phase in Bilayer  $t$ - $J$  Model: Time-Reversal Symmetry Breaking Surface State without Spontaneous Magnetic Field", J. Phys. Soc. Jpn., **87**, 064706 (2015) 査読有り.

DOI:10.7566/JPSJ.84.064706

Kazuhiro Kuboki, "Flux Phase as Possible Ordered State in  $t$ - $J$  model", J. Phys. Soc. Jpn., **83**, 15003 (2014) 査読有り.

DOI:10.7566/JPSJ.83.125001

Kazuhiro Kuboki, "Flux Phase as Possible Time-Reversal Symmetry Breaking Surface States of High- $T_c$  Cuprate Superconductors", J. Phys. Soc. Jpn., **83**, 054703 (2014) 査読有り.

DOI:10.7566/JPSJ.83.054703

Masahiko Hayashi, Yasunari Tanuma, and Kazuhiro Kuboki, "Theory of Antiferromagnetic Order in High- $T_c$  Oxides: An Approach Based on Ginzburg-Landau Expansion" J. Phys. Soc. Jpn **82**, 124705 (2013) 査読有り.

DOI:10.7566/JPSJ.82.124705

M. Hayashi, Y. Takane and H. Ebisawa, "Numerical Study of Collective Transport in Charge Density Wave Conductors", J. Phys.: Conf. Ser. **400** 012015 (2012) 査読有り.

DOI:0.1088/1742-6596/400/1/012015

[学会発表](計 13件)

Masahiko Hayashi, Kazuhiro Kuboki, Yasunari Tanuma, "Effects of Fluctuations in the Phase Diagram of high- $T_c$  Cuprate Superconductors", The 11th international conference on materials and mechanisms of superconductivity (M2S 2015), 2015.8.24 (CICG, ジュネーブ, スイス)

林正彦, "t-Jモデルに基づく多層系高温超伝導体の相転移に関する理論的研究" (19aPS-6), 日本物理学会2015年秋季大会, 2015.9.19, 関西大(大阪府吹田市)

久保木一浩, "t-JモデルのFlux phaseと超伝導状態に対するGL理論"(19pCL-1), 日本物理学会2015年秋季大会, 2015.9.19, 関西大(大阪府吹田市)

林正彦, 吉岡英生, 友利ひかり, 神田晶申, "架橋構造のグラフェン・ナノリボンにおける形状による歪みのコントロール" (22pAC-3), 日本物理学会第70回年次大会, 2015.3.22, 早稲田大(東京都新宿区)

田沼慶忠, 小野田勝, 林正彦, "スピン軌道相互作用を加味したグラフェン超伝導接合におけるエッジ状態とトンネル効果" (24aPS-20), 日本物理学会第70回年次大会, 2015.3.24, 早稲田大(東京都新宿区)

Masahiko Hayashi, Yoshitake Takane, Hironichi Ebisawa, "Time-dependent Ginzburg-Landau equation for charge density waves and its application to sliding phenomena", International School and Workshop on Electronic Crystals (ECRYS-2014) (invited), 2014.8.15 (Cargese, France)

林正彦, 吉岡英生, 友利ひかり, 神田晶申, "グラフェンの電気伝導における形状効果について"(27pCL-9), 日本物理学会第69回年次大会, 2014.3.27, 東海大(神奈川県平塚市)

田沼慶忠, 林正彦, 田仲由喜夫, "グラフェン異方的超伝導における準粒子状態"(24pSB-4), 日本物理学会第69回年次大会, 2014.3.24, 東海大(神奈川県平塚市)

林正彦, 田沼慶忠, 久保木一浩, "銅酸化物高温超伝導体における反強磁性磁気秩序と擬ギャップ" (26aDC-33), 日本物理学会2013年秋季大会, 2013.9.26, 徳島大(徳島県徳島市)

久保木一浩, "d波超伝導体表面付近での競合秩序の誘起" (27aED-6), 日本物理学会2013年秋季大会, 2013.9.27, 徳島大(徳島

県徳島市)

林正彦, 田沼慶忠, 久保木一浩, "銅酸化物高温超伝導体における反強磁性磁気秩序の構造と熱的ゆらぎの効果" (26pXX-10) 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013.3.26, 広島大 (広島県東広島市)

林正彦, "高温超伝導体の磁気構造", 東北大学金属材料研究所共同利用研究会「ナノ構造超伝導体の磁束構造」, 2013.1.30, 東北大学金属材料研究所 (宮城県仙台市)

林正彦, 高根美武, 海老澤丕道, "電荷密度波の滑り伝導の数値シミュレーション -- 位相滑りと非線形抵抗 --" (19aAF-3), 日本物理学会 2012 年秋季大会, 2012.9.19, 横浜国立大学 (神奈川県横浜市)

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

名称 :  
発明者 :  
権利者 :  
種類 :  
番号 :  
出願年月日 :  
国内外の別 :

取得状況 (計 0 件)

名称 :  
発明者 :  
権利者 :  
種類 :  
番号 :  
取得年月日 :  
国内外の別 :

〔その他〕

ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 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 : 6 0 3 0 1 0 4 0

### (2) 研究分担者

久保木 一浩 (KUBOKI, Kazuhiro)  
神戸大学・理学 (系) 研究科・准教授  
研究者番号 : 5 0 2 3 1 2 9 6

海老澤 丕道 (EBISAWA, Hiromichi)  
東北大学・情報科学研究科・名誉教授  
研究者番号 : 9 0 0 0 5 4 3 9

### (3) 連携研究者

丹田 聡 (TANDA, Satoshi)

北海道大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号 : 8 0 2 1 7 2 1 5