

1 物性理論

1.1 青木

青木は一貫して、超伝導に代表される多体効果、ならびにトポロジカル系の理論を主眼に研究を行ってきた。これらの現象では、強相関電子系やトポロジカル系に特有な新奇現象が起きる。面白い物性を面白い物質構造で発現させる物質設計も目指している。さらに、強相関系やトポロジカル系において、非平衡で生じる顕著な物性を探ることを最近の大きな柱としている。東大からの定年退職後の2016年度からは東大名誉教授として、東大物理学教室ならびに産総研（筑波）において研究を続けている。

1.1.1 超伝導／超流動

ニッケル化合物における超伝導

最近、ニッケル化合物 $(\text{Nd,Sr})\text{NiO}_2$ において超伝導が生じることが Hwang (Stanford) のグループにより実験的に報告された。銅以外の遷移金属化合物における超伝導として注目されるが、電子構造は銅酸化物とはかなり異なっている可能性があり、超伝導機構に興味もたれる。榊原（鳥取大）、黒木（大阪大）等と青木は、先ず、第一原理電子状態計算に基づいて有効模型（7バンド模型 = Ni 3d 電子および希土類元素の 5d 電子）を構築し、多体相互作用の大きさを見積り、FLEX により超伝導を調べた [1]。その結果、on-site 斥力 U はニッケル酸化物では銅酸化物より大きく、超伝導の T_c を下げることを見出した（図 1.1.1）。この仕事は *Phys. Rev. Lett.* に出版され、Editors' suggestion に選ばれるとともに、*Physics* にフィーチャーされた。

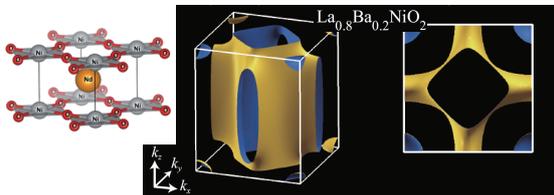


図 1.1.1: ニッケル酸化物超伝導体（結晶構造は左の添図）におけるフェルミ面の形状。 [1]

Li (Chinese Academy of Sciences)、内田（東大）等のグループが、新しい銅酸化物 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ において $T_c = 70$ K 級の超伝導を発見し、2019 年に報告した。従来は、銅酸化物高温超伝導には CuO_2 面が必須との常識があったが、新たな化合物では面内酸素の数割が欠損しており、銅の原子価も $2+$ から大幅にずれているので、超伝導機構を初めとして新たな理論解析がチャレンジングな問題となる。山崎、黒木（大阪大）、永崎（産総研）、内田、青木等は、これを理論的に調べた [2, 7]。実験では結晶構造が確定していないので、理論では先ず可能な構造の探索から始めた。そこで有力な候補の一つとして、酸素によって結ばれている銅原子が、平坦バンド模型として有名な Lieb 格子をなす構造を提案した（図 1.1.2）。この構造に対し、多軌道 Hubbard 模型を第一原理電子状態計算から構築し、FLEX を用いて超伝導を解析した。その結果、(i) s 波と d 波の超伝導が拮抗し、(ii) そこでは軌道内ペアリングと軌道間ペアリングが共存という奇妙な状態となっていることを見出した。これに基づき、銅 d 軌道レベルを調整することにより T_c をさらに上げ、 s_{\pm} 波超伝導を実現する可能性も指摘した。より広いパースペクティブとして、Lieb 模型における超伝導と、通常の La 型銅酸化物 (K_2NiF_4 構造) 上での 2 軌道模型や、2 層系 Hubbard 模型における超伝導の間に密接な関連があることも見出した。

平坦バンド系の設計と平坦バンド超伝導

歴史的には強磁性の研究の流れとして知られる平坦バンド系は、最近では超伝導やトポロジカル系の観点からも重要性が認識されつつある。特に電子間斥力を導入した場合、バンド間ペア散乱が、スピン揺らぎに媒介された高温超伝導を誘発する可能性が、黒木等により示唆されている。さらに最近では小林等により示されているように、平坦バンド超伝導相がトポロジカル相に隣接している平坦バンド模型があり、そこでは異常に大きな量子もつれが存在するので、それが超伝導を増強している可能性がある。通常考えられている平坦バンド模型は一般に多バンド系（平坦バンドと分散バンドが共存）であるが、Sayyad (Néel 研)、Vaezi (スタンフォード大) 等と青木は、1 バンド系においても、分散が平坦な部分をもつ部分的平坦バンドの場合は、バンド・フィリングを変化させるにつれ、強磁性のスピン揺らぎから反強磁性のスピン揺らぎへのクロスオーバーが生じ、これに伴いスピン・トリプレット超伝導からシングレット超伝導への転移が起きることを明らかにした [3, 4]。これらの全体像は図 1.1.3 のようにまとめられる [4]。このように、平坦バンド系では電子相関効果が特徴的に現れる。特に、異なるペアリング対称性間の相転移近傍ではトポロジカル超伝導が発現し易いことが知られているので、平坦バンド系はトポロジカル系および超伝導の両者を融合したユニークな物質設計の舞台になり得ることが期待される。青

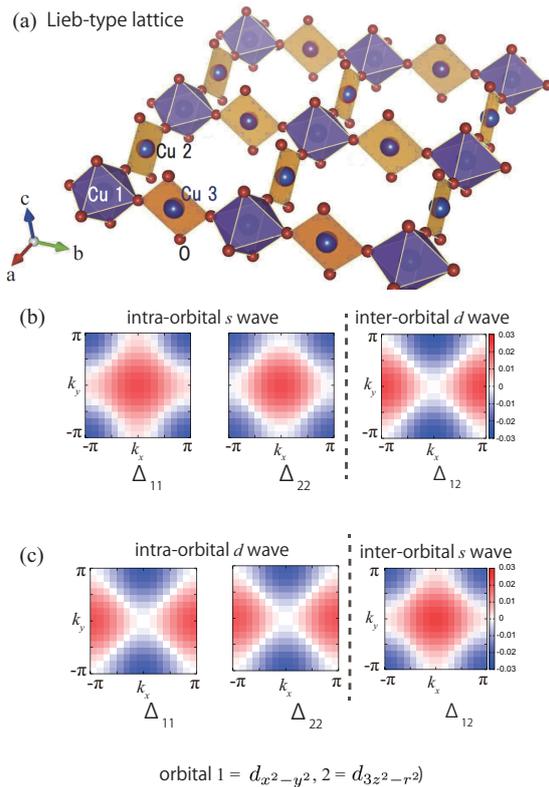


図 1.1.2: (a) 新銅酸化物 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ 高温超伝導体に対するリープ格子型結晶構造の理論的提案。軌道 (i, j) 表示におけるギャップ関数 Δ_{ij} を、軌道内 s 波、軌道内 d 波の場合 (b)、および軌道内 d 波、軌道間 s 波の場合 (c) に対して示す。[2]

木は、これを含めた平坦バンド超伝導についての概観の論文を出版した [4]。

Incipient 2 バンド系における超流動/超伝導 BCS-BEC クロスオーバー

越智、飯田 (高知大)、田島 (高知大、現東大) は、有効質量が異なる二つのバンド間にエネルギー・オフセットがあるフェルミ粒子系における超伝導/超流動を理論的に考察した。バンド間にペア散乱相互作用が存在する場合に対して、各バンドのペアリングを BCS-BEC クロスオーバーの観点から調べた。2 バンド間にエネルギー・オフセットを導入した場合、超伝導が化学ポテンシャル μ にどのように依存するかを見たところ、重いバンドが incipient な場合 (重いバンドの底が μ 近傍) を境にして、バンド間ペア散乱に媒介された各バンドのペアリングが有効相互作用が顕著に異なる振る舞いをする事が分かった。さらにペア散乱相互作用の大きさ、および 2 バンドの質量比を変化させることにより、2 バンド系にお

ける有効相互作用の変化と Feshbach 共鳴との間にアナロジーがあることを指摘した。

1.1.2 グラフェン関連物質

ケクレ秩序をもつグラフェンにおけるゼロ・モード

炭素が蜂の巣格子をなすグラフェンは massless Dirac 粒子のバンド分散 (Dirac cone) をもち、カイラル対称性のために電子状態は特徴的になる。河原林 (東邦大)、初貝 (筑波大)、青木等は、蜂の巣格子系において、ケクレ秩序が存在する場合 (強磁場中で生じる可能性が提案されている) に、質量ゼロのディラックフェルミオンに伴うゼロ・モードが、系に不規則性を導入した場合もロバストに存続することを示した [5]。

2 層グラフェンおよび遷移金属ダイカルコゲナイドにおける谷偏極およびスピン偏極

グラフェンは、Brillouin zone の K および K' という二領域 (谷と呼ばれる) において Dirac cone をもつが、片方の谷の電子が他方の谷の電子より多いという状況 (谷偏極) を作り出せるかどうかは長年の興味を払われている。Maksym と青木は、2 層グラフェンは様々に特異な性質をもつが、これを用いて谷偏極を生み出すことが可能なことを理論的に提案した。鍵となるのは、グラフェンでは Dirac cone が三回対称に歪んでおり、そのために波数 (\mathbf{k}) と電流 (\mathbf{j}) の方向は一致しない。このずれ方が谷によって異なるので、2 層グラフェンにポテンシャル障壁を加えると、片方の谷が完全反射され、谷偏極が生じる。同様なことは遷移金属ダイカルコゲナイドでも期待され、この物質群の場合はスピン・軌道相互作用が大きいために、谷偏極にスピン偏極が伴うことも予想される。[18, 19]

1.1.3 非平衡および非線形現象 — 光学 “imprinting” によるトポロジカル系制御

非平衡や非線形現象は、強相関電子系やトポロジカル系において特に興味深い。本年度は以下を行った。岡・青木 [Takashi Oka and Hideo Aoki, Phys. Rev. B **79**, 081406(R) (2009)] が理論的に予言した、グラフェンに円偏光を照射するとトポロジカル絶縁体 (Floquet topological insulator; FTI) になる、という現象が、ハンブルクのマックス・プランク研究所の James McIver 等により実証され、Nature Physics に 2020 に出版され、表紙も飾った。このようなトポロジカル状態をさらに engineer する試みと

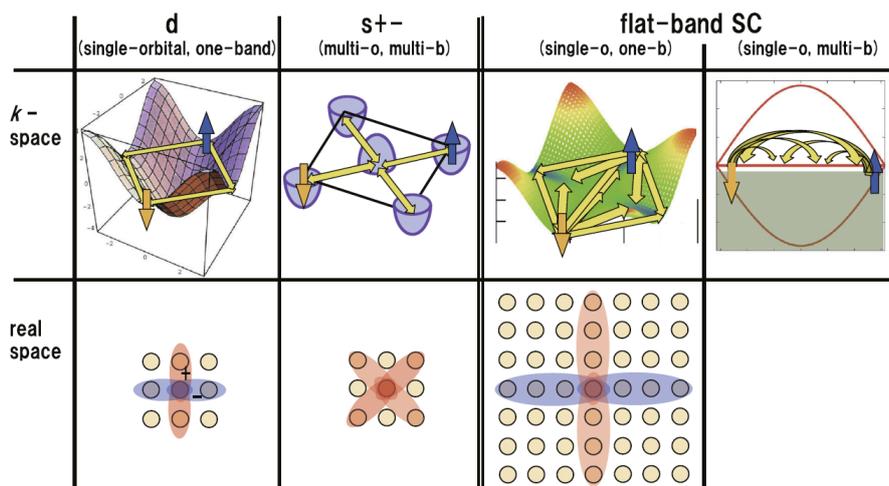


図 1.1.3: 超伝導模型の模式的把握 [4]。左コラム：通常の 1 軌道・1 バンド系（ここでは d 波超伝導の場合を例示）、左から二番目：多軌道・多バンド系 (s_{\pm} 波を例示)。黄色矢印は、主要なペア散乱を表す (“hot spots”間を結ぶネスティング・ベクトル)。これらの分散バンド系は、平坦バンド系における超伝導と対比される。右から二番目：1 軌道・1 バンドの平坦バンド系。右コラム：1 軌道・多バンドの平坦バンド系。平坦バンドにおいては、ペア散乱はネスティング・ベクトルの束に沿って起きる。最下段は実空間におけるペアリングの模式図。

して、Hafezi(Maryland 大)等は、振幅が空間的に周期変調する円偏光を 2 次元系に照射すると、FTI への相転移が制御されることを理論的に提案した [6]。空間変調の格子パターンも制御できるので、例えば正方格子から三角格子に変形すると、FTI 相の領域が鋭く増大する、また三角格子から籠目格子にも変形するとトポロジカル・チェーン数も制御される等が示された。

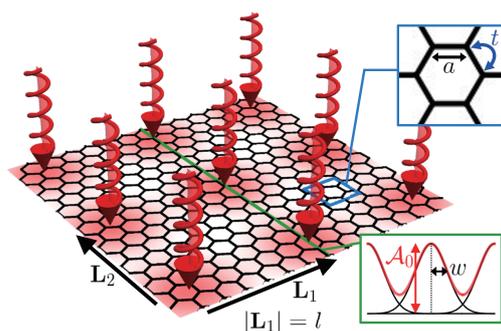


図 1.1.4: 空間的に周期的な円偏光を照射された 2 次元系（例えばグラフェン）の模式図。[6]

1.1.4 その他

青木は、国際会議等の招待講演において、平坦バンド超伝導 [12]、超伝導とトポロジカル状態のデザインについては **Gordon Research Conf.**[13] において、またフロッケ・エンジニアリングおよび超伝導ヒッグスモード [14] について報告した。

また、「物性物理学のルネサンス — 超伝導、トポロジカル系、非平衡」と題した連載を出版した [8, 9, 10, 11]。

<報文>

(原著論文)

- [1] Hirofumi Sakakibara, Hidetomo Usui, Katsuhiko Suzuki, Takao Kotani, Hideo Aoki, and Kazuhiko Kuroki: Model construction and a possibility of cuprate-like pairing in a new d^9 nickelate superconductor (Nd,Sr)NiO₂, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 077003 (2020) (Editors' suggestion).
- [2] Kimihiro Yamazaki, Masayuki Ochi, Daisuke Ogura, Kazuhiko Kuroki, Hiroshi Eisaki, Shinichi Uchida, and Hideo Aoki: Superconducting mechanism for a new-type cuprate Ba₂CuO_{3+δ} based on a multiorbital Lieb lattice model, *Phys. Rev. Research* **2**, 033356 (2020).
- [3] Sharareh Sayyad, Edwin W. Huang, Motoharu Kitatani, Mohammad-Sadegh Vaezi, Zohar Nussinov, Abolhassan Vaezi and Hideo Aoki: Pairing and

non-Fermi liquid behavior in partially flat-band systems, *Phys. Rev. B* **101**, 014501 (2020).

- [4] Hideo Aoki: Theoretical possibilities for flat-band superconductivity, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **33**, 2341 (2020).
- [5] Tohru Kawarabayashi, Yuya Inoue, Ryo Itagaki, Yasuhiro Hatsugai and Hideo Aoki: Robust zero modes in disordered two-dimensional honeycomb lattice with Kekulé bond ordering, *Annals of Physics*, doi.org/10.1016/j.aop.2021.168440 (Proc. "Localization 2020").
- [6] Hwanmun Kim, Hossein Dehghani, Hideo Aoki, Ivar Martin, and Mohammad Hafezi: Optical imprinting of superlattices in 2D materials, *Phys. Rev. Research* **2**, 043004 (2020).

(国内雑誌)

- [7] 山崎公裕, 越智正之, 小倉大典, 黒木和彦, 青木秀夫: 新銅酸化物高温超伝導体 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ の多軌道模型に基づく理論、固体物理、印刷中。
- [8] 青木秀夫: 物性物理学のルネサンス — 超伝導、トポロジカル系、非平衡 (その1)、固体物理 **55**, 445 (2020)。
- [9] 青木秀夫: 物性物理学のルネサンス — 超伝導、トポロジカル系、非平衡 (その2)、固体物理 **55**, 737 (2020)。
- [10] 青木秀夫: 物性物理学のルネサンス — 超伝導、トポロジカル系、非平衡 (その3)、固体物理 **56**, 153 (2021)。
- [11] 青木秀夫: 物性物理学のルネサンス — 超伝導、トポロジカル系、非平衡 (その4)、固体物理、**56**, 209 (2021)。

<学術発表>

(国際会議)

招待講演

- [12] Hideo Aoki: Theoretical possibilities for flat-band superconductivity, Int. Conf. "Superstripes2019", Ischia, Italy, June 2019.
- [13] Hideo Aoki: Floquet engineering of topological and superconducting properties in one-body and many-body systems, Gordon Research Conf. "Ultrafast Phenomena in Cooperative Systems", Lucca, Italy, Feb 2020.
- [14] Hideo Aoki: Floquet engineering and Higgs dynamics in superconductors, Flatiron Int. Conf. "Nonequilibrium superconductivity", New York, Jan 2020.

(国内会議)

一般発表

- [15] 越智一成, 田島裕之, 飯田圭, 青木秀夫: 分散バンドと重い incipient バンドから成る 2 バンド系における超流動/超伝導 BCS-BEC クロスオーバー (日本物理学会 2020 年 9 月秋季大会、オンライン開催)。

- [16] 山崎公裕, 越智正之, 小倉大典, 黒木和彦, 永崎洋, 内田慎一, 青木秀夫: 新しいタイプの銅酸化物 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ における軌道間相互作用を起源とする超伝導の可能性 (日本物理学会 2020 年 9 月秋季大会、オンライン開催)。
- [17] 榎原寛史 B, 白井秀知, 鈴木雄大, 小谷岳生, 青木秀夫, 黒木和彦: 新ニッケル系超伝導体 NdNiO_2 の有効モデル構築と d 波超伝導発現の可能性 (日本物理学会 2020 年 9 月秋季大会、オンライン開催)。
- [18] P. Maksym, H. Aoki: Novel conditionally bound states and anti-Klein tunnelling in bilayer graphene (日本物理学会 2020 年 9 月秋季大会、オンライン開催)。
- [19] P. Maksym and H. Aoki: Effect of trigonal warping on anti-Klein tunnelling in bilayer graphene (日本物理学会 2021 年 3 月年次大会、オンライン開催)。