

モアレ・グラフェンと超伝導

——炭素系を舞台としたエキゾチックな多体問題の可能性

1. はじめに

2018年、非整合なグラフェン2層系である回転積層グラフェン (twisted bilayer graphene, TBG) と呼ばれる系で超伝導が発見され、大きな注目を集めている。¹⁻³⁾ TBGとは2枚のグラフェンが結晶軸を揃えずに積層した系のことであり [図1(a)], 各層の結晶軸同士がなす回転角 θ によって特徴づけられる。角度 θ が数度以下の場合、結晶構造に長周期のモアレ模様が見られ、電子状態が大きく変調を受ける。特に魔法角 (magic angle) と呼ばれる角度では、最低エネルギーバンドが分散を失いほぼ平坦となることが理論的に知られている。⁴⁾ 実験では、この魔法角近くのTBGにおいて超伝導状態が観測されており、平坦バンドとの関連が強く示唆される。MITによる最初の実験^{1,2)} に続いて、コロンビア大学などのグループ³⁾ が超伝導の観測に成功している。現在までに既に多数の理論が提唱されているが、TBG超伝導状態の解明には至っていない。本稿ではこの非常にホットな分野についての現状を紹介したい。

2. 回転積層グラフェンの構造と電子状態

最初にTBGの原子構造とバンド構造について、その概要を述べる。図1(a)は $\theta=2.65^\circ$ のTBGの原子構造である。単層グラフェンの格子定数を $a=0.246\text{ nm}$ とすると、モアレ干渉模様の周期は $L_M=a/[2\sin(\theta/2)]$ となり、 $\theta\rightarrow 0$ の極限で発散する。平坦バンドの現れる魔法角 (1.1° 程度) では $L_M\sim 14.1\text{ nm}$ となり、単位胞の中に10,000個以上の炭素原子が含まれる。この膨大な原子からなる周期構造が

TBGの大きな特徴である。

電子のバンド構造は θ に大きく依存する。理論計算によると、 $\theta>10^\circ$ ではグラフェンの線形バンド (ディラックコーン) にほとんど影響がないが、角度が小さくなるにつれ、徐々に線形バンドの傾きが小さくなっていき、 1.1° 付近ではほぼ完全に平坦バンドになる。⁴⁾ これが魔法角である。さらに角度が小さくなると再びバンドが分散を回復し、また別の魔法角で平坦バンドが現れる。図1(b)に最初の魔法角に近い $\theta=1.05^\circ$ におけるバンド構造の実際の計算例を示す。⁵⁾ エネルギーの原点 $E=0$ が電荷中性点を表す。 $E=0$ 直上に平坦に近いバンドが生じており、その幅は10 meVに満たない。電子状態にはバレー自由度 K_+, K_- があり、それぞれ図中の実線と点線に対応している。炭素のスピンの軌道相互作用は弱いので、スピン自由度に関してはほぼ完全に縮退している。平坦バンドは各バレー、スピンごとに上下2枚ずつ存在し、電荷中性点で互いに接している。これはグラフェンのディラックコーンの名残である。バンド一枚に収容されるスピン、バレー自由度あたりの電子数密度は、モアレ単位胞の面積 S_M を用いて $n_0=1/S_M$ と表される。電荷中性点から数えて、平坦バンドを埋めるのに要する電子数はスピン、バレーを含めて $4n_0$ である。平坦バンドと周りのバンドの間には10 meVから数10 meV程度のエネルギーギャップが存在し、平坦バンドはエネルギー的に孤立している。理論的には、このギャップはモアレ模様の格子緩和によって生じることがわかっている。⁶⁾

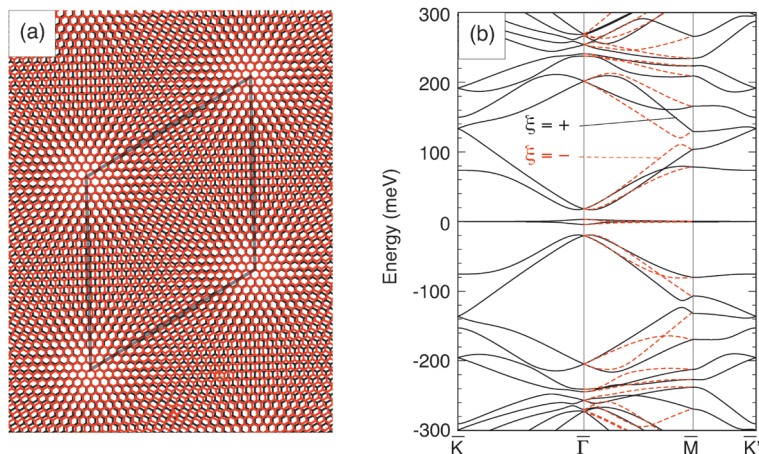


図1 (a) $\theta=2.65^\circ$ のTBGの原子構造. (b) $\theta=1.05^\circ$ におけるバンド構造. 実線と点線は K_+, K_- バレーに対応する.

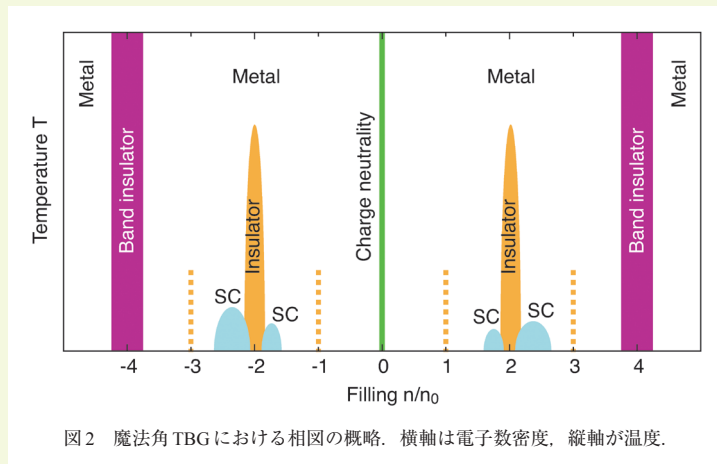


図2 魔法角TBGにおける相図の概略. 横軸は電子数密度, 縦軸が温度.

3. 超伝導状態の観測

実験で得られた相図の概略を図2に示す. 横軸は n_0 を単位とした電子数密度, 縦軸が温度である.¹⁻³⁾ 電子数 $n/n_0 = \pm 4$ の帯はバンド絶縁体を表し, 平坦バンドの直上, 直下のギャップに対応する. 電荷中性点 $n/n_0 = 0$ は単層グラフェンのディラック点と類似し, エネルギーギャップは存在しないが電気抵抗が極大となる. これらの特徴は角度の大きいTBGでも共通に見られる. 一方で魔法角付近のTBGではそれらに加え, $n/n_0 = \pm 2$ に新たな絶縁相が低温で生じ, さらにそこから少しずれた電子数密度周辺で超伝導相が現れる. いずれも何らかの多体効果による現象と予想される. 超伝導状態は $\theta = 1.1^\circ$ 周辺のいくつかの角度で観測されている. 超伝導転移温度は, 絶縁相から見て $|n|$ が大きい側でより高くなる傾向があり, その大きさは0.数Kから1K程度である. 最大の転移温度はMITの実験で $\theta = 1.05^\circ$ で観測された1.7Kである.²⁾ コロンビア大学の実験では, $n/n_0 = \pm 1, \pm 3$ といった電子密度 (図2の点線) でも $n/n_0 = \pm 2$ と似た絶縁相の兆しが現れている.³⁾ 電気抵抗の磁気振動を観測すると, $n/n_0 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ の周りでランダウ準位が確認されており, それぞれフェルミ面ができてきていることを示す.¹⁻³⁾

絶縁相の周りにドーム状の超伝導相が存在する形は高温超伝導体の相図と一見類似する. 特筆すべきは, 通常の3次元物質では電子数の制御は不純物ドーピングによって行われるが, 2次元系であるTBGでは, ゲート電極に電圧を印加することによって電子数を外部的に変えることができる点である. すなわち一つのデバイスの中でこの相図を得ることができる.

4. 理論研究の現状

$n/n_0 = \pm 2$ の絶縁相とその近傍の超伝導の起源の解明が目下の課題である. 現時点で既に数多くの理論が提唱されているが, ここではその是非を問うことはせず, 代表的な

ものを列挙する. モアレ単位胞に含まれる膨大な数の原子は, 多体問題の記述の上での大きな困難である. これを克服するため, 平坦バンドのワニエ軌道を抽出することで, 平坦バンドのみを記述する少数軌道の拡張ハバードモデルが提唱され,^{5,7,8)} そのモデルの上での基底状態も検討されている.^{9,10)} 一方で弱相関の立場より, フェルミ面のネスティングと van Hove singularity によって絶縁相や超伝導を説明する試みもなされている.¹¹⁾ 電子間相互作用による理論の他にも, フォノン媒介の超伝導の可能性も調べられている.¹²⁾ また Hartree Fock 近似により絶縁相を説明する試みもあり, この描像はランダウ準位における量子ホール強磁性と類似する.¹³⁾

5. おわりに

2018年3月の超伝導の報告以来, この分野の理論論文の数は爆発的に増え百家争鳴状態である. 一方で実験論文も少しずつ増えており, 絶縁相や超伝導状態に関するより詳細な情報も徐々にわかってきている. 今後実験と理論が両輪となってこの分野が発展していくことが期待される.

参考文献

- 1) Y. Cao et al., Nature **556**, 43 (2018).
- 2) Y. Cao et al., Nature **556**, 80 (2018).
- 3) M. Yankowitz et al., Science **363**, 1059 (2019).
- 4) R. Bistritzer and A. H. MacDonald, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **108**, 12233 (2011).
- 5) M. Koshino et al., Phys. Rev. X **8**, 031087 (2018).
- 6) N. N. T. Nam and M. Koshino, Phys. Rev. B **96**, 075311 (2017).
- 7) H. C. Po et al., Phys. Rev. X **8**, 031089 (2018).
- 8) J. Kang and O. Vafek, Phys. Rev. X **8**, 031088 (2018).
- 9) M. Ochi, M. Koshino, and K. Kuroki, Phys. Rev. B **98**, 081102 (2018).
- 10) J. Kang and O. Vafek, arXiv:1810.08642 (2018).
- 11) H. Isobe, N. F. Q. Yuan, and L. Fu, Phys. Rev. X **8**, 041041 (2018).
- 12) F. Wu, A. H. MacDonald, and I. Martin, Phys. Rev. Lett. **121**, 257001 (2018).
- 13) M. Xie and A. H. MacDonald, arXiv:1812.04213 (2018).

越野幹人 (大阪大学大学院理学研究科 koshino@phys.sci.osaka-u.ac.jp)

(2019年1月29日原稿受付)