

自発的回転対称性の破れの発現機構の新発見 ～ツイスト2層グラフェンにおける複合自由度の重要性～

国立大学法人東海国立大学機構 名古屋大学大学院理学研究科の大成 誠一郎 准教授、紺谷 浩 教授らの研究グループは、ツイスト2層グラフェン^{注1)}における、自発的回転対称性の破れの発現機構を新たに発見しました。

2層のグラフェンをわずかに回転させて積層したツイスト2層グラフェンは、クーロン相互作用や電子数の制御可能な、新しい強相関電子系^{注2)}です。魔法角と呼ばれる 1.1° 回転させたツイスト2層グラフェン(MATBG)において、回転対称性が自発的に破れたネマティック秩序^{注3)}が観測されました。近年、強相関電子系において、高温超伝導のメカニズムに関係すると考えられているネマティック秩序に注目が集まっています。本研究では、MATBGのネマティック秩序の発現機構が、従来の強相関電子系には存在しない、バレー^{注4)}自由度とスピン^{注5)}自由度を複合した、新規自由度の揺らぎ^{注6)}の干渉であることを発見しました。

このことは、ネマティック秩序近傍で発現する、MATBGの超伝導状態の起源の解明及び、強相関電子系高温超伝導体の超伝導転移温度の向上に繋がると期待されます。

本研究成果は、2022年2月9日付アメリカ科学誌「Physical Review Letters」に掲載されました。

本研究は、科学研究費助成事業(JP19H05825, JP18H01175, JP17K05543)の支援のもとで行われたものです。

【ポイント】

- ・魔法角と呼ばれる 1.1° 回転させたツイスト 2 層グラフェン (MATBG) における、ネマティック秩序の発現機構を発見した。
- ・このネマティック秩序は、SU(4)対称性^{注7)} に起因する、バレー+スピン複合自由度の揺らぎ間干渉機構により引き起こされることを発見した。

【研究背景と内容】

単層グラファイト^{注8)}であるグラフェンを、わずかに回転して 2 層積層したツイスト 2 層グラフェンは、図 1 に示すモアレ超格子を形成します。黒線で囲まれるユニットセル内で、多数の炭素原子からなる巨大分子軌道が構成されるため、格子間隔が長い新しい金属となります。バンド幅が狭いため、クーロン相互作用^{注9)} が弱いにも関わらず、強相関電子系となります。ツイスト 2 層グラフェンは、ゲート電圧や回転角で、電子数やクーロン相互作用が制御可能であり、新しい強相関電子系の舞台として注目されています。特に魔法角 (1.1°) 回転したツイスト 2 層グラフェン (MATBG) では、超伝導相が出現するため、集中的に研究されていますが、最近、回転対称性が自発的に破れたネマティック秩序が観測されました。他の強相関電子系である、鉄系超伝導体や銅酸化物超伝導体でも、ネマティック秩序は観測されており、物性物理学における重要未解明問題である、高温超伝導の発現機構にも関係していると予想されるネマティック秩序は、近年大変注目されています。

MATBG では、巨大分子軌道の軌道角運動量に対応するバレー自由度 $\xi=\pm 1$ が生じます。この MATBG に固有なバレー自由度は、電子固有のスピン自由度 $\sigma=\pm 1$ と同様な回転操作が可能であり、SU(2)対称性を持つと言います。大変興味深いことに、MATBG ではスピンの自由度とバレーの自由度がほぼ対等であり、両者を混ぜ合わせるような高次元の回転操作が可能です。すなわち、バレー+スピンの複合自由度(4 自由度)を考えると、この複合自由度は SU(4)対称性を持ちます。固体物理において、このような高次元の対称性が実現する例は珍しく、従来の強相関電子系では実現しない相転移現象 (=自発的対称性の破れ) や創発現象が自然に期待されます。

我々は、MATBG の SU(4)対称性に着目し、この系のネマティック秩序の理論的解明に取り組んできました。そして、バレー+スピンの複合自由度の量子揺らぎ (バレー+スピン) が発達する強相関領域において、分子軌道間の飛び移り積分^{注10)} が自発的に変調する、ボンド秩序という量子相転移が起きることを見出しました。ボンド秩序が起きる時、MATBG の持つ 3 回対称性が自発的に破れた、ネマティック状態が生じます (図 2)。本機構によって得られたボンド秩序は、異方性の向き (ディレクター) を XY 面内で任意に回転させることが可能であり、XY ネマティック秩序と呼ばれます。そのため、ごく弱い一軸性圧力によってネマティック秩序を自由に回転させることが可能であり、新規デバイスへの応用が期待されます。これは、鉄系超伝導体における一軸性ネマティック秩序と著しい対照をなします。

MATBG のネマティックボンド秩序の発現には、SU(4)対称性に起因するバレー+スピン複合揺らぎ間干渉機構 (図 3) が重要であることが分かりました。従来の平均場近

似等の理論では、ネマティック秩序を説明できないという重大な問題があるため、従来の理論を超えて高次多体効果を考慮することで、この機構を導出しました。複合揺らぎ間干渉機構とは、媒質が変化せず振幅や位相のみが変化する、古典的な波の干渉とは著しく異なり、2つの同種の複合揺らぎが高次多体効果により干渉した結果、元の複合揺らぎとは異なるネマティック秩序が発現するという、量子力学的な干渉（量子干渉）機構です。SU(4)対称性のために、複合揺らぎは15重縮退しており、3重縮退したSU(2)スピン揺らぎに比べて、量子干渉に寄与する自由度が飛躍的に多くなります。そのため、複合揺らぎ間干渉機構によるネマティック秩序は、以前、鉄系超伝導体で提唱した、スピン揺らぎ間干渉機構によるネマティック秩序よりも、強く安定化されることが分かりました。複合自由度の揺らぎはf電子系の多極子揺らぎとも関係しているため、幅広い発展性が期待されます。

本研究で得られたネマティック秩序は、量子揺らぎによって融解する時にネマティック量子揺らぎをもたらします。このネマティック量子揺らぎは、エキゾチックな物理現象の源であり、例えば、超伝導のクーパ対を形成する際の、強力な糊としての役割を果たします。従って本研究は、MATBGにおける超伝導発現機構の解明のカギを与えると期待されます。また、ネマティック秩序のような空間一様な秩序だけではなく、空間非一様な秩序や、カレント秩序も同じ理論の枠組みで取り扱うことが可能なため、本理論による、強相関電子系の秩序状態の統一的理解が期待されます。

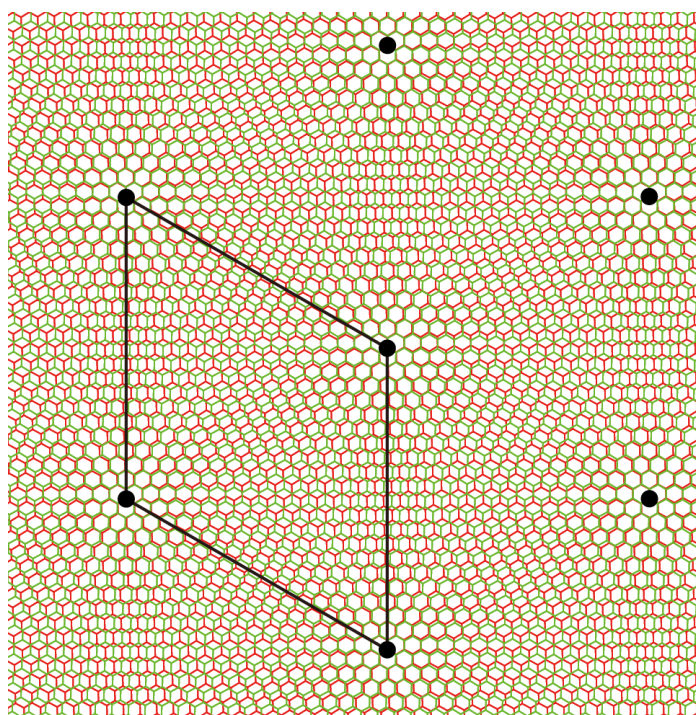


図1 2層のグラフェン(赤線と緑線)が重なって生じるモアレ超格子(ツイスト角 3.18°)。黒丸はモアレ超格子点、黒線はユニットセルを表す。

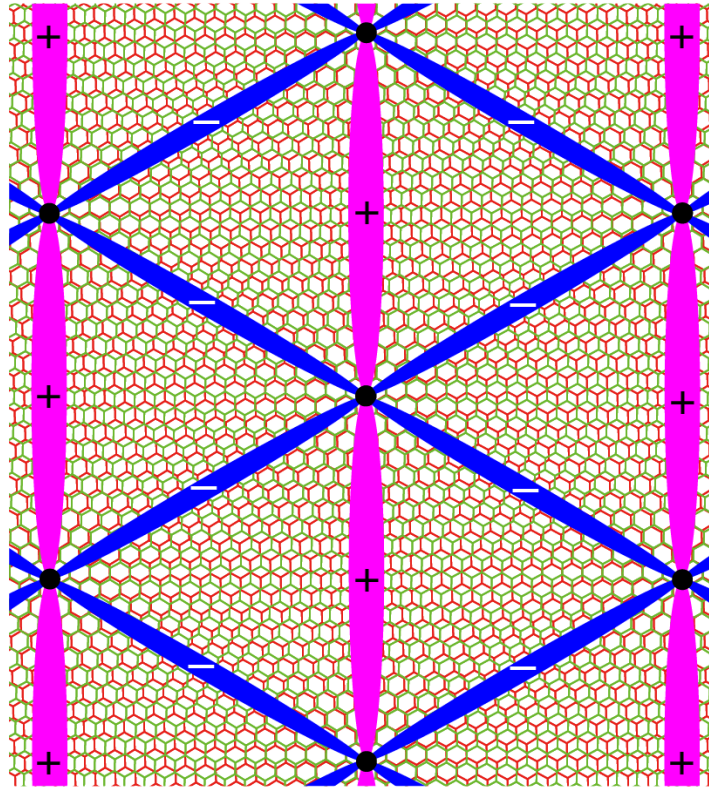


図2 ボンド秩序の例。モアレ超格子点間の飛び移り積分の増加（紫線）、減少（青線）により、3回対称性が破れたネマティック秩序になる。

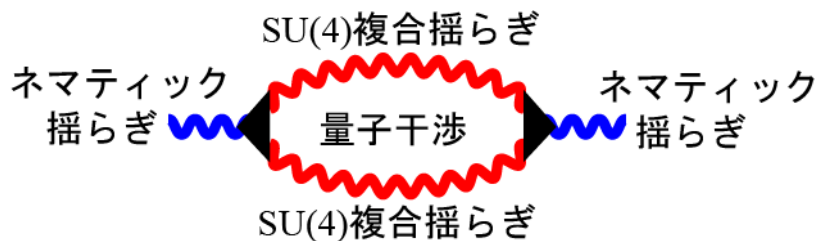


図3 SU(4)複合揺らぎ間干渉機構のファインマンダイアグラム。赤波線は複合揺らぎ、青波線はネマティック揺らぎを表す。2つの複合揺らぎ間で量子干渉を起こし、ネマティック揺らぎ(秩序)が現れる。

【成果の意義】

MATBGのSU(4)対称性に起因するバレー＋スピン複合揺らぎ間干渉機構は、ネマティック秩序の新しい発現機構です。得られたネマティック秩序は、ディレクターの制御が可能であるため、新規デバイスへの応用が期待されます。ネマティック秩序の近傍で、超伝導が現れるため、本研究の成果は、MATBGの超伝導のメカニズムの解明及び、強相関電子系高温超伝導体の超伝導転移温度向上に繋がると期待されます。

【用語説明】

注 1) ツイスト 2 層グラフェン :

炭素のハチの巢格子からなるグラフェンを、2 層わずかに回転させて積層した物質。

注 2) 強相関電子系 :

クーロン相互作用が強い電子系、低温で様々な秩序相が現れる。

注 3) ネマティック秩序 :

結晶本来が持つ回転対称性が破れる秩序。元来は液晶の秩序を表す用語。

注 4) バレー :

グラフェン等の電子に特有な内部自由度 ξ 。MATBG では、 $\xi=\pm 1$ の 2 成分があり、これらは時間反転操作で互いに入れ替わる。バレーは空間的に広がった電子の分子軌道の軌道角運動量に相当する。

注 5) スピン :

電子や陽子等のミクロな粒子が持つ内部自由度 σ 。電子では上向きスピン $\sigma=+1$ と、下向きスピン $\sigma=-1$ の 2 成分があり、磁氣的性質を与える。

注 6) 揺らぎ :

ある自由度の平均値からのずれの標準偏差を表す。秩序近傍で重要となる。

注 7) SU(N)対称性 :

複素数 N 成分を持つベクトルの回転（行列式 1 のユニタリ変換）に対する不変性。

注 8) 単層グラファイト :

炭素のハチの巢格子が層状に重なったグラファイトは鉛筆の芯にも使われており、なじみの深い物質である。一層のみのグラファイトである単層グラファイトはグラフェンと呼ばれており、2004 年に発見され、2010 年のノーベル賞の対象となった。

注 9) クーロン相互作用 :

荷電粒子間にはたらく電磁相互作用をクーロン相互作用という。電子間には斥力のクーロン相互作用がはたらく。

注 10) 飛び移り積分 :

格子点上に電子を束縛したモデルで考えた場合、電子の格子点間の飛び移りやすさを表す。

【論文情報】

雑誌名 : Physical Review Letter

論文タイトル : SU(4) Valley + Spin Fluctuation Interference Mechanism for Nematic Order in Magic-Angle Twisted Bilayer Graphene: The Impact of Vertex Corrections

著者 : Seiichiro Onari (名古屋大学准教授), Hiroshi Kontani (名古屋大学教授)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.128.066401

URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.128.066401>