

# ナノ構造における局在状態の位相的安定性と 量子計算機への応用の可能性

研究代表者 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 初貝安弘

## 概要

近年注目をあつめているカーボンナノチューブにおける構造の境界に存在する局在状態並びに異方的超伝導体における局在状態が、実は電子構造に起因する位相幾何学的起源を持つことが最近の我々の研究で明らかとなった[A1,A2]。このナノ構造、超伝導体における局在状態の安定性はノーベル物理学賞の対象となった量子ホール効果におけるホール伝導度の高精度の量子化の起源であり、これらの局在状態は外的摂動に対して極めて高い安定度を持つことが期待される。

一方近年注目を集めている量子計算機においては量子力学的コヒーレンスを保つことがその実現の為の必須の条件である。これらの事実を背景としてナノ構造、超伝導体における局在状態の高い安定性を用い、将来の量子計算機としての基礎素子としての実現を目指すためのカーボンナノチューブ系及び異方的超伝導体の2つの系に対して物理学的側面から理論的な基礎研究を行なった。

## 目的

ナノ構造として極めて有望であるカーボンナノチューブ、カーボンシートの電子構造は2次元性並びに2p電子の炭素結合の量子力学的特性に由来する特徴的な構造を持つ。

これらのナノ構造を実際に構成すると必然的に端、境界が生ずる。歴史的にはこれら境界の物理的意義はあくまで副次的なものであると考えられがちであったが量子ホール効果の発見によりその認識は改められエッジ状態と呼ばれるある種の安定な局在状態が系の境界に存在することが現象において本質的であることが理解されるにいたった。本研究提案で対象としたカーボンナノチューブ、カーボンシートにおいても量子ホール効果と同様の位相幾何学的起源を持つ局在状態が存在することが最近のわれわれの研究で明らかとなった。[A1,A2]

この局在構造は単に束縛状態として局在するのみでなく、電子論的な位相構造(例えば量子ホール効果におけるホール伝導度の量子化の必然の帰結として境界に存在しなければならないのである。これによりこれら局在状態は位相幾何学的な極めて高い安定性をもつ。つまり、境界のみだれ具合、形状の変化、温度変化等が存在しても局在

状態は安定して存在することがある種の量子化条件の帰結として物理的に要求されるのである。

本研究ではこれらの事実に基づき、カーボンナノチューブの基礎的理解を深めることをまず第一の目的とした。具体的には (1)局在状態の電子状態をバルクのカーボンナノチューブの構造並びに境界の切り出し方との関係で位相幾何学的安定性に着目して理解する。(2) これら局在状態の応用において本質的な系のみだれの効果並びに電子間のクーロン反発（電子相関）の効果を理解する。まず以上の2点に主眼をおいた研究を行なう。次に第2のステップとしてこれらカーボンナノ構造、超伝導体における局在状態を用いた量子計算機の基礎的な動作原理の提案にいたることを最終的な目的とする基礎研究を行なう。

前述のようにカーボンナノチューブ等における局在状態は位相幾何学的安定性（量子化条件）をもち外部からの摂動に対して強固なものであると考えられ、これが近年多くの興味を持たれながらもその実現にはまだいたらない量子計算機の基本原理として極めて有用であると考えられるものである。この観点を追求し最終的なデバイスの提案まで視野にいった基礎的、物理学的研究を行なう。

またいわゆる異方的超伝導特に d 波の超伝導とよばれるものはこのカーボン系の物理と極めて類似性が強く、その関係も含めて議論したい。これらの現象はより一般的にトポロジック秩序との観点から統一的に理解されるのである。この点に関しても具体的な研究を行う。

## 研究成果

### ・「d 波の時間反転対称性を破る超伝導とスピンホール伝導度、スピンエッジ状態」

量子ホール効果に対するトポロジカルな議論の直接の拡張として2次元超伝導特に d 波の時間反転対称性を破る超伝導体を取り扱った。この系では通常量子ホール系において電荷が保存することに対応してスピンの z 成分がこの超伝導相においても保存し、いわゆるスピンホール伝導度が位相不変量による表式をもち、スピン密度が系の境界に局在するスピンエッジ状態が生まれることが導かれた。

### ・「異方的超伝導およびカーボン2次元系のトポロジカル秩序相としての統一理解」

前述のスピンホール伝導度の考察を進めた結果、d 波の2次元超伝導は全く異なる系である炭素2次元系と密接な関係があることを明らかとなった。更にいわゆる「バルクエッジ対応」の精密な定式化を完成させることによりこれらの系においてバルク状態がいかなる性質を持つとき、そしてどのような境界をもつときに局在状態が存在しうるか

の明示的な基準を与えることに成功した。のみならず、これら2つの系において特徴的な2つの物理現象である(1)「異方的超伝導におけるゼロバイアスコンダクタンスピーク構造」及び(2)「炭素系においては境界にのみ発生する磁気秩序」の2つが、いわゆるゼロモードエッジ状態の物理として共通に理解されることを示した。このゼロモードの存在は一般的にはある種の電子正孔対称性の帰結である。この対称性は超伝導体における時間反転対称性と考えられ、炭素系における磁気モーメントが空間的に一様であるべしとの対称性（サイトポテンシャルを消去できることでカイラル対称性と同値）とも見なせる。この対称性が保たれると局在エッジ状態は1次元的にゼロエネルギーとなりフラットバンドを形成することになる。一方1次元フラットバンドは一般的にいわゆるPeierls不安定性を起し対称性を低下させることにより安定化する。これがd波の超伝導において発見された境界での局所的時間反転対称性の破れの物理的起源であり、また、炭素系での境界に局在した磁気秩序の物理的起源である。これらの現象に対して具体例を含めて明示的に示した。

#### ・「超伝導と位相不変量、超伝導ギャップのノード構造」

以上の考察は2次元超伝導かつ平行スピン間のペアリングは存在しないとの仮定のもとの理論であったが、その後3次元の超伝導さらには平行スピンのペアリングを含む（パリティ 偶、奇ともに可）完全に一般的な超伝導体に適用可能な形に拡張し、理論を完結させることができた。つまりランダウのGL理論が対称性による超伝導相の分類の一般的枠組みであることに対応して、対称性とは独立なトポロジカルに量子化された（拡張された）スピンホール伝導度による超伝導相の特徴付けの為の枠組みを構築した。議論の直接の物理的帰結としては完全に一般の3次元超伝導（つまり時間反転対称性のない超伝導）においては可能な超伝導ギャップのノード構造はポイントノードであり、ラインノードの存在の為には時間反転対称性が保たれる等、付加的対称性が必要であることが見てとれる。なお3次元の超伝導をある方向の波数 ( $k$  と書こう)をパラメータとした2次元超伝導の集合として理解したとき、3次元の超伝導ギャップのノード構造は2次元超伝導にとってはパラメータ  $k$  を変化させたときの量子相転移点として特徴付けられることとなる。

## 量子計算とトポロジカル秩序

以上の研究はすべて量子力学に固有の位相にその考察の中心がありいわゆる幾何学的位相の研究とも考えられる。またその幾何学的位相の効果は量子力学に固有の秩序相であるトポロジック秩序相として特徴づけられるのである。一方すべての量子計算は量

量子力学における重ね合わせの原理をその基礎とし波動関数の複素数としての可干渉性をその特徴とする。その際ここで議論した幾何学的位相、トポロジカル秩序相はある種の幾何学的安定性、トポロジカル安定性を持ち実際の応用を考えた際に外部からの外乱に対して物理系が安定であると考えられ、量子計算における基礎的動作原理としてこれらの現象を用いることが有望な可能性をあたえると期待している。

さらにはこれらのトポロジカル秩序とは多粒子系の波動関数の空間的な位相情報により物理系を特徴づけるものであるが、これは言い換えるといわゆる entanglement により多粒子系の波動関数を特徴づけるともいえる。この多粒子系の entanglement すなわちトポロジカル秩序は量子情報処理の基礎的動作素子となりうる有望な物理現象であると考えられている。

## 謝辞

本研究提案のような極めて基礎的な研究に対して研究援助頂きまして JFE21 世紀財団には心から感謝致しております。

## 参考論文

[A1] ``Topological Quantum Phase Transitions in Superconductivity on Lattices'', (Y. Hatsugai and S. Ryu), Phys. Rev. B65, 212510-1-4 (2002).

[A2] "Topological Origin of Zero energy Edge State in Particle-Hall Symmetric Systems", (S. Ryu and Y. Hatsugai), cond-mat/0112197, Phys. Rev. Lett. 89, 077002-1-4 (2002).

## 発表論文

[P1] ``Dirac Monopole and Spin Hall Conductance for Anisotropic Superconductivities'', (Y. Hatsugai, S. Ryu), Physica C, 388, 78, (2003).

[P2] ``Zero energy edge states and their origin in particle-hole symmetric system: symmetry and topology'', (S. Ryu, Y. Hatsugai), Physica C, 388, 90, (2003).

[P3] ``Correlation effects of carbon nanotubes at boundaries: Spin polarization induced by zero-energy boundary state'', (S. Ryu and Y. Hatsugai), Phys. Rev. B. 67, 165410 (2003).

[P4] ``Superconductivity and Abelian Chiral Anomalies'', (Y. Hatsugai, S. Ryu, M. Kohmoto), Phys. Rev. B. 70, 054502 (2004).

[P5] ``Zero energy edge states and chiral symmetry breaking at edges of graphite sheets'', (S. Ryu and Y. Hatsugai), Physica E, 679-683 (2004).

[P6] ``Explicit Gauge Fixing for Degenerate Multiplets: A Generic Setup for Topological Orders'',

Y. Hatsugai, Phys. Soc. Jpn. 2604-2607 (2004).

[P7] ``A Characterization of Topological Insulators: Chern Numbers for a Ground State Multiplet'', Y. Hatsugai, submitted, cond-mat/0412344.

#### 招待講演並びに口頭発表

[T1] ``A Characterization of Topological Insulators'', (Y. Hatsugai), YKIS 2004 ``Physics of Strongly Correlated Electrons Systems'', Nov. 12, Kyoto (2004).

[T2] "非自明なトポロジカル秩序を持つ系でのチャーン数とゲージ固定", (初貝安弘), 14pTK-2, 日本物理学会 2004 年秋季大会 Sep. 12-15, 2004 青森大学, 青森

[T3] ``Superconductivity and Chiral Anomalies'', Y. Hatsugai, APS March meeting P13.008, March 22-26, 2004, , Montreal, Quebec, Canada.

[T4] "一般化した超伝導のトポロジカルな特徴づけ", (初貝安弘, 笠真生), 28pWM, 日本物理学会 2004 年年次大会 Mar. 27-30, 2004 九州大学, 九州

[T5] ``Topological Orders: superconductors, Carbon Sheets and Chiral Anomaly'', Y. Hatsugai, Jan. 23, (2004), ISSP, Tokyo. (東京大学物性研究所理論セミナー)

[T6] ``異方的超伝導におけるノード構造のトポロジカルな意義", 「充填スクッテルダイト構造に創出する新しい量子多電子状態の展開」, 29-b4, Nov. 27-29 (2003), 都立大学 東京

[T7] ``3次元異方的超伝導におけるノード構造のトポロジカルな起源と量子相転移'', (初貝安弘, 甲元真人), 21pTM-9, 日本物理学会 2003 年秋季大会 Sep. 20-23, 2003 岡山大学, 岡山

[T8] ``Topological Aspects of Carbon Nanostructures and Anisotropic Superconductivity'', Aug. 27, 2003, ``Invited Talk, International Workshop on Field Theory Methods in Correlated Nanoscale Systems'', Aug. 26-30 (2003), Brookhaven National Laboratory, Upton.

[T9] ``Topological Orders in Superconductivity and Carbon Nano-Structures'', MIT condensed Matter Seminar, 12:30, Aug. 22, 2003, MIT, Boston.

[T10] ``Zero-energy edge states and chiral symmetry breaking at edges of graphite sheets'', (S. Ryu and Y. Hatsugai), PB63, EP2DS, July.14-18, 2003 Nara.

[T11] ``カーボンナノチューブのエッジにおける電子相関: エッジ状態とスピン偏極'', (笠真生, 初貝安弘), 30pZB7, 日本物理学会 2003 年 58 回年次大会 March 28-31, 2003 東北大学, 宮城

[T12] ``Topological Origin of Edge States and Boundary Magnetic Moments in Carbon Nanotubes'', Yasuhiro Hatsugai, S. Ryu and Y. Otsuka, APS March meeting P26.6, March 5,

2003, Austin, TX, USA

[T13] QPEC Workshop on Quantum Physics, 「異方的超伝導およびカーボンナノ構造におけるトポロジカル秩序と量子相転移」 Feb. 1, 2003 Tokyo