

令和 2 年 6 月 3 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2019

課題番号：16K17755

研究課題名（和文）トポロジカル超伝導におけるマヨラナ準粒子の検出と制御に向けた微視的理論研究

研究課題名（英文）Theoretical study aiming to detect and control Majorana quasiparticles in topological superconductors

研究代表者

川上 拓人 (Kawakami, Takuto)

大阪大学・理学研究科・助教

研究者番号：00750895

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：近年実験が進展しているトポロジカル物質の超伝導とその表面のマヨラナ準粒子の性質を、Bogoliubov-de Gennes 理論やギャップ方程式などに対する数値解析と対称性や表現論に基づく考察を併用し、理論的に調べた。特に逆ペロブスカイト物質Sr₃SnOの超伝導体が、大きな巻きつき数を持つ新しいトポロジカル超伝導となる可能性を指摘した。また、Fe(Se, Te)などの鉄系超伝導体において結晶対称性によって守られた、マヨラナカルテット、マヨラナ平坦バンド、メビウス表面状態などの多彩なマヨラナ準粒子が現れることを明らかにした。さらにトポロジカルノード線半金属の理論研究も実施した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

逆ペロブスカイト物質や鉄系超伝導などの現在実験が進行中の物質を舞台として、新しいトポロジカル超伝導の出現を指摘したことで、今後のさらなる実験的研究の動機付けとなることが期待される。さらに、本研究で得られた相図や用いた解析手法を応用することで、対象とした物質固有の性質だけでなく、多様なトポロジカル物質を効率よく解析することが可能になった。現在もマヨラナ準粒子を用いた量子コンピューターの実現にむけた研究が盛んに行われているが、本研究もそのさらなる促進に寄与すると期待される。

研究成果の概要（英文）：We theoretically investigated superconductivity in topological materials and their Majorana quasiparticle excitation, on the basis of symmetry consideration and numerical solution of the Bogoliubov-de Gennes equation and gap equation. In particular, we pointed out that recently discovered superconducting anti-perovskite material Sr₃SnO can be a novel topological superconductor characterized by large winding number. It was also shown that iron-based superconductors can have a variety of Majorana quasiparticles protected by crystalline symmetry, such as Majorana quartet, Majorana flat band, and Moebius surface states. In addition, we studied the nodal line semimetal phase in photonic crystal system.

研究分野：物性理論

キーワード：トポロジカル超伝導 マヨラナ準粒子励起 トポロジカル半金属

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

マヨラナ粒子は、80年以上前に素粒子の分野で提案された、自身の反粒子と等価なフェルミ粒子である。素粒子としては未だ検出されていないが、この粒子が物質系におけるエネルギーゼロの準粒子励起として現れることが理論的に示されたことで、本研究開始以前より注目を集めていた。このような物質系のマヨラナ粒子 (=マヨラナ準粒子励起) は、トポロジカル超伝導体や超流動体の表面や量子渦等の欠陥に束縛される。そしてそれらは非可換統計性に従うために、外部からの乱れに対して強固な量子計算に応用できるという観点からも期待されていた。

一方で研究代表者川上は、本研究開始当初までに、p 波超流動 ^3He や f 波超流動の候補である UPt_3 の量子渦に束縛されるマヨラナ準粒子に関する知見を蓄えていた。さらに、トポロジカル絶縁体と超伝導体の接合系の量子渦束縛状態の解析から、スピン選別された状態密度を用いることでマヨラナ準粒子を単一の粒子として検出する方法を見出していた。

2. 研究の目的

本研究課題の目的は、様々なトポロジカル超伝導体の表面や渦に現れるマヨラナ準粒子の性質を明らかにし、その検出と制御に向けた理論を構築することである。トポロジカル絶縁体や半金属にキャリアドーピングした系が超伝導になると、トポロジカル超伝導となる可能性がある。そして近年の、実験の進展による新しいトポロジカル物質の発見や、分類学などの理論の発展を鑑みると、多様なトポロジカル物質が超伝導になった場合に現れるマヨラナ準粒子の振る舞いを理論的に解明することは重要な課題であった。さらに研究代表者は、超伝導にとどまらず、より広くトポロジカル物質の性質を解明し、得られた知見を超伝導体の研究にフィードバックすることで、マヨラナ準粒子励起に関する理解を深めようと考えた。そこで本研究では、(1)大きなスピン $J=3/2$ を持つトポロジカル超伝導体、(2)近年報告された鉄系超伝導体のトポロジカル相とその超伝導状態 (3)トポロジカルノード線半金属と対称性の果たす役割に関する研究を主に推進した。

3. 研究の方法

下記 (1)、(2)の研究では、トポロジカル物質の超伝導相を解析した。まずは常伝導状態の有効模型を構築し、その電子状態やトポロジカル指数を解析した上で、超伝導相関を導入した。一般にトポロジカル物質は、スピンや軌道などの内部自由度を持つため、多彩なクーパー対を組むことができる。本研究ではそれらを対称性によって分類し、線形化ギャップ方程式を解くことで、実現しうる非自明な超伝導状態を探索した。そして得られた超伝導状態について、Bogoliubov-de Gennes 方程式を数値的に解くことで、マヨラナ準粒子を含む、準粒子励起状態の構造を解析した。

下記 (3)の研究では、トポロジカルノード線半金属状態が現れるしくみを探索するためにタイトバインディング模型を構成した。そしてそのしくみを実現する候補物質としてフォトニック結晶系に注目し、マクスウェル方程式を平面波展開によって第一原理的に解析するソフトウェア、MIT-photonic bands を運用して解析を実施した。

4. 研究成果

(1) スピン 3/2 トポロジカル超伝導とマヨラナ準粒子励起

トポロジカル物質の多くは、強いスピン軌道相互作用を持つ。このとき、通常の電子のスピン 1/2 と p 軌道や d 軌道などの軌道角運動量が結合することにより、電子が 1/2 よりも大きな有効スピンを持つことができる。通常のスピン 1/2 電子において、偶奇のパリティを持つ電子状態のエネルギーが反転すると、トポロジカル絶縁体となることが知られている。同様に、2つの有効スピン $J=3/2$ 電子がバンド反転を起こす場合、トポロジカル結晶絶縁体となることが明らかになっていた。さらに 2016 年、京都大学の実験グループによって、このような物質の候補である逆ペロブスカイト物質、 Sr_3SnO にホールドーピングすると超伝導相転移することが観測された。そして理論的には、この物質のバンド構造や電子状態の解析が行われ、トポロジカル超伝導となる可能性が理論的に示唆されていた。一方で、高いスピン特有の物性がどのように現れるかは明らかになっていなかった。

そこで本研究課題では、スピン 3/2 トポロジカル物質の可能な超伝導状態を網羅的に研究した。この系ではスピンの自由度として、角運動量の z 成分 $J_z = -3/2, -1/2, +1/2, +3/2$ の 4 つ、軌道の自由度が偶パリティと奇パリティの 2 つ存在する。このような自由度によって、BCS 超伝導のようにギャップ関数が波数依存しない場合でも、多彩な超伝導を取ることが許される。本課題では、対称性と表現論の方法によって、候補となる超伝導ギャップ関数を整理した。そしてそれらの超伝導ギャップ構造及び転移温度を解析し、超伝導状態の相対的な安定性を議論した。特に、奇パリティと偶パリティの異なる軌道の間での相互作用が支配的な場合には、合成スピン 0 のクーパー対による奇パリティ超伝導が安定することを示した。

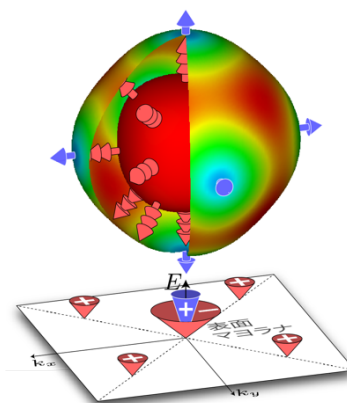


図 1. キャリアドーピングしたスピン 3/2 トポロジカル絶縁体のフェルミ面と超伝導体表面のマヨラナ準粒子の模式図。

さらに、得られた合成スピン0の奇パリティ超伝導のトポロジカル特性を解明した。この超伝導状態は時間反転対称性を保つため、3次元巻きつき数と呼ばれるトポロジカル指数が整数に量子化される。本研究では、この巻きつき数が、スピン角運動量と密接に関連していることを明らかにした。図1に示すようにこの系にはスピン $J_z = \pm 1/2$ 成分と $J_z = \pm 3/2$ 成分に由来する2枚のフェルミ面が存在する。このそれぞれのフェルミ面からの巻きつき数への寄与を算出した。特に、球対称な極限では、スピンのフェルミ面に垂直方向に $J_z = 1/2$ の大きさを持つ場合には巻きつき数1, $J_z = 3/2$ の場合には巻きつき数3を与えることが判明した。そしてこのような系を記述するより一般的な有効モデルにおける、スピン軌道相互作用の強さやキャリアドーパ量に対するトポロジカル相図の全様を明らかにした。特に、大きなスピンを持つことに起因して、トポロジカル超伝導相は、これまで考えられてきた物質群よりも大きな巻きつき数を持つことがわかった。このような大きなトポロジカル数に起因して、物質表面には、図1に示す2重マヨラナコーンや、表面ブリルアンゾーンの中心から離れたところに現れるサテライトマヨラナコーンなどの、多様なマヨラナ準粒子励起が存在することを明らかにした。

(2) 鉄系超伝導体におけるトポロジカル超伝導

2018年、東京大学物性研究所を中心とする実験グループの角度分解光電子分光実験によって、Fe(Se, Te)のトポロジカル表面状態が観測された。そしてそれを契機として、鉄系超伝導体のトポロジカル特性が注目を集めていた。この物質では、図2bに示すように、セレンやテルルなどのカルコゲン原子の p_z 軌道に由来するバンドのエネルギーが、鉄原子の d_{xy} , d_{yz} , d_{zx} 軌道のものを複数回横切る。そしてこのようなマルチバンド反転によって、多様なトポロジカル相が現れる。図2bの低エネルギー側のバンド反転は、小さなギャップを生じ、このギャップ内にフェルミ準位がある場合、この系はトポロジカル絶縁相となる。一方、高エネルギー側に着目すると、ギャップ無しでのバンド交差が起こっている。交差点は3次元ブリルアンゾーン内の点であり、ディラック点に対応する。つまりキャリアドーピングしてこのバンド交差した部分にフェルミ準位を合わせることができれば、鉄系物質はトポロジカルディラック半金属となる。研究代表者らの理論グループは、東大物性研究所の実験グループと共同で、このディラック半金属に起因する、新たなトポロジカル超伝導が現れる可能性があることを見出した。

この物質においても、スピンの他にも軌道、副格子からなる多数の内部自由度に起因する多様な超伝導対形成が許される。特に図2bに波線で示されるように、ディラック点近傍の周囲にフェルミ面が形成された場合、 d 軌道と p 軌道が混成することで、非従来型の超伝導状態となる可能性がある。そこで本研究では、上記(1)と同様の手法で解析を行い、 p 軌道と d 軌道の間引力が支配的である場合に期待される超伝導状態を解析した。その結果、 B_{1u} 表現と B_{2u} 表現に分類されるギャップ関数のいずれかが安定な状態となることを見出した。そしてこれらのギャップ関数のバルクの性質は似通っており、両者ともにフェルミ面上の南極と北極に点ノードを持ち、そのギャップの大きさもほぼ等しいことが判明した。

一方、これらの超伝導状態の結晶対称性によって守られたトポロジカル指数は異なる。そこで本研究では、有効モデルに基づいて、それぞれのトポロジカル指数を算出し、表面状態の振る舞いを解析した。その結果、図3に示されるように、2つの超伝導状態の(100)表面にはそれぞれ、マヨラナカルデットと呼ばれる複数の円錐状の分散関係を持った準粒子励起や、点ノードをつなぐマヨラナ平坦バンドといった、多彩なマヨラナ準粒子励起が存在することを明らかにした。これらの振る舞いは、 Cd_3As_2 など、他のディラック半金属の超伝導に対する先行研究で予言されていた表面状態とも共通する性質である。そしてさらに、(110)表面を形成すれば、 B_{1u} と B_{2u} 状態の両方に、映進対称性によって守られた、メビウス表面状態と呼ばれる新奇な表面状態が実現されることも分かった。

本研究によって、鉄系超伝導では、結晶対称性によって守られた多彩なトポロジカル超伝導が実現する可能性があることが分かった。さらに本研究の議論は、現在実験が盛んに行われているFe(Se, Te) や(Li, Fe)OHFeSeを含む、化学組成やキャリアドーパ量の異なる多数の鉄系超伝導に適用可能である。そのため得られた結果から、トポロジカル物質研究の舞台がさらに広がることが期待される。

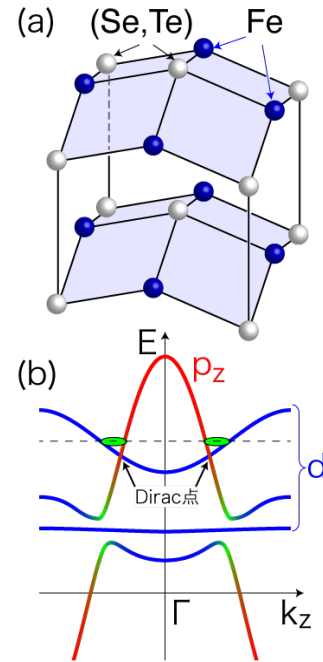


図2. (a) 鉄系超伝導Fe(Se, Te)の結晶構造. (b) 常伝導バンド構造の模式図.

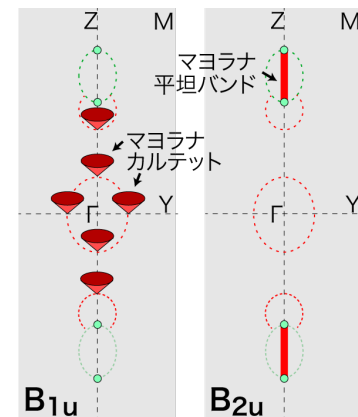


図3. 軌道間引力による2種類の超伝導における、(100)表面状態.

(3) 対称性に保証されたノード線半金属: フォトニック結晶への応用

近年のトポロジカル物質の広がりを受け本課題では、超伝導体だけでなく、ノード線半金属状態の研究も実施した。この系は運動量空間のループ上でディラック電子に類似の線形バンド交差(ノード)を持つ。そしてトポロジカル特性としてほぼ平坦バンドの表面状態が現れ、電気伝導に大きな影響を与えると考えられる。

このようなノード線が現れる舞台をさらに拡大するために、研究代表者は、ノード線をよりシンプルな系で発現する機構を考案した。立方対称性がある面心立方格子を考えると、面心立方格子のそれぞれの格子点に3つのp軌道、 $\{p_x, p_y, p_z\}$ 状態が実現する。この3つは、xy面の鏡映によって符号が反転する p_z 軌道と、反転しない $\{p_x, p_y\}$ 軌道の2グループに分けられる。そしてこの2グループは、軌道は運動量空間の鏡映対称面で互いに相互作用しない。さらに立方体の離散回転対称性により、鏡映対称面内での p_x 軌道と p_z 軌道のエネルギー準位の入れ替わりが保証されることが分かった。これらの観点から研究代表者は、面心立方系では図4aに示すようなノード線が系の詳細によらず対称性のみによって必ず現れることを発見した。

この機構は電子系だけでなく、一般の周期系に適用できる。特に本研究では、シリコン球が面心立方格子に配列している場合、その中を通る光の周波数と波数の関係であるフォトニックバンドがノード線半金属的になることを発見した。一方1980年代の終わり、フォトニックバンド研究の黎明期には、周波数帯にギャップを作るための研究が盛んに行われていた。そして実験と理論の両面から、面心立方格子を用いてもギャップを開けられないことが報告されていた。これは本研究で解明したノード線半金属の性質とよく一致する。つまり、トポロジカルノード線半金属は最近予言されるずっと前から、そうとは知られずに実現していたことが判明した。さらに、このシリコン球のフォトニック結晶の界面に、トポロジカル特性であるほぼ平坦な分散関係をもつ光伝搬モードがあることを示した。このモード中では群速度が極めて遅い光、“スローライト”が実現し、様々な応用が期待される。

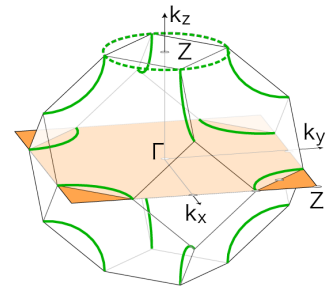


図 4. 面心立方晶における第一ブリルアンゾーンとノード線構造の模式図. 燈色の面は鏡映対称面.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Tamaki Gen, Kawakami Takuto, Koshino Mikito	4. 巻 101
2. 論文標題 Topological junction states and their crystalline network in systems with chiral symmetry: Application to graphene nanoribbons	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205311, 1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.205311	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kawakami Takuto, Sato Masatoshi	4. 巻 100
2. 論文標題 Topological crystalline superconductivity in Dirac semimetal phase of iron-based superconductors	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094520, 1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.094520	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kawakami Takuto, Okamura Tetsuya, Kobayashi Shingo, Sato Masatoshi	4. 巻 8
2. 論文標題 Topological Crystalline Materials of $J=3/2$ Electrons: Antiperovskites, Dirac Points, and High Winding Topological Superconductivity	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review X	6. 最初と最後の頁 041026, 1-23
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevX.8.041026	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 P.Zhang, Z. Wang, X. Wu, K. Yaji, Y. Ishida, Y. Kohama, G. Dai, Y. Sun, C. Bareille ¹ , K. Kuroda, T. Kondo ¹ , K. Okazaki, K. Kindo ¹ , X. Wang, C. Jin, J. Hu, R. Thomale, K. Sumida, S. Wu, K. Miyamoto, T. Okuda, H. Ding, G. D. Gu, T. Tamegai, T. Kawakami, M. Sato, S. Shin	4. 巻 15
2. 論文標題 Multiple topological states in iron-based superconductors	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nature Physics	6. 最初と最後の頁 41 ~ 47
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41567-018-0280-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kawakami Takuto, Hu Xiao	4. 巻 96
2. 論文標題 Symmetry-guaranteed nodal-line semimetals in an fcc lattice	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.96.235307	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 川上拓人, 胡暁	4. 巻 152
2. 論文標題 トポロジカル超伝導研究の現状と展望	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Forum of Superconductivity Science and Technology News	6. 最初と最後の頁 3-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計19件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Takeshi Mizushima
2. 発表標題 Topological stability of polka-dot phase in superfluid ^3He between parallel plates
3. 学会等名 International Conference on Topological Materials Science 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 川上拓人, 水島健
2. 発表標題 平行平板間の超流動 ^3He における 2次元空間変調
3. 学会等名 日本物理学会 2019 年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Masatoshi Sato
2. 発表標題 Topological superconductivity of Dirac semimetal in Fe(Se,Te)
3. 学会等名 Oxide Superspin Workshop 2019. (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 川上拓人
2. 発表標題 逆ペロブスカイト酸化物のスピン3/2トポロジカル超伝導
3. 学会等名 基研研究会「電子相関が生み出す新規な秩序と超伝導現象:トポロジ、液晶状態、動的現象」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Xiao Hu
2. 発表標題 Topological Nodal-Line Semimetals in FCC Photonic Crystals
3. 学会等名 Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Tetsuya Okamura, Shingo Kobayashi, Masatoshi Sato
2. 発表標題 Higher Winding Topological Superconductivity in Antiperovskite Oxides
3. 学会等名 Oxide Superconducting Spintronics Workshop 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 川上拓人, 佐藤昌利
2. 発表標題 Fe(Se,Te) におけるディラック半金属のトポロジカル超伝導
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Tetsuya Okamura, Shingo Kobayashi, Masatoshi Sato
2. 発表標題 Superconductivity in spin 3/2 topological insulators with carrier doping
3. 学会等名 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Xiao Hu
2. 発表標題 Spin Textures in the Majorana Bound States
3. 学会等名 Majorana States in Condensed Matter Towards Topological Quantum Computation (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Xiao Hu
2. 発表標題 Spin Texture of Majorana Bound State in Topological Superconductor
3. 学会等名 14th International Workshop on Magnetism & Superconductivity at the Nanoscale (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Tetsuya Okamura, Shingo Kobayashi, Masatoshi Sato
2. 発表標題 Spin 3/2 superconducting topological insulators
3. 学会等名 Novel Quantum States in Condensed Matter 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Tetsuya Okamura, Shingo Kobayashi, Masatoshi Sato
2. 発表標題 Spin 3/2 superconducting topological insulators
3. 学会等名 CEMS Symposium on Trends in Condensed Matter Physics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Xiao Hu
2. 発表標題 Symmetry-Guaranteed Nodal Line Semimetallic states in fcc structures
3. 学会等名 Conference on Topological Quantum Phases and Topological Quantum Computation (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 川上 拓人, 岡村鉄矢, 小林伸吾, 佐藤昌利
2. 発表標題 スピン3/2トポロジカル絶縁体の超伝導
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Xiao Hu
2. 発表標題 Proposal to detect the Majorana bound states by spin-polarized spectroscopy
3. 学会等名 Spectroscopy in Novel Superconductors (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 川上拓人, 胡曉
2. 発表標題 マヨラナ端状態のスピンテクスチャーと干渉
3. 学会等名 日本物理学会 2016年秋季大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Xiao Hu
2. 発表標題 Proposal to Identify the Majorana Bound States by Scanning Tunneling Spectroscopy
3. 学会等名 EMN Meeting on Quantum and Mesoscopic Physcs (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Takuto Kawakami, Xiao Hu
2. 発表標題 Numerical Study for Searching the Majorana Bound States in Topological Superconductor
3. 学会等名 The 10th International Conference on Computational Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 川上拓人, 胡暎
2. 発表標題 面心立方格子系におけるトポロジカルノード線半金属状態
3. 学会等名 日本物理学会 第72回年次大会
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考