

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 6 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01025

研究課題名（和文）キタエフ模型に基づく新奇デバイスの理論的提案

研究課題名（英文）Theoretical proposal for novel devices based on the Kitaev model

研究代表者

土浦 宏紀 (Tsuchiura, Hiroki)

東北大学・工学研究科・准教授

研究者番号：30374961

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 11,700,000円

研究成果の概要（和文）：本申請課題の目的は、キタエフ模型で予測される新奇物性を活用した、比較的簡便な制御性をもつデバイスの理論的提案を行うことである。キタエフ模型には、量子スピン型と1次元p波超伝導型の2種類が知られている。前者の量子スピン型模型については、マヨラナ準粒子による磁気励起輸送を制御する新たなスイッチング機構や、系にキャリアドーピングした場合に回転対称性が破れた超伝導状態が出現することの予測およびそれを利用した超伝導スイッチの提案を行った。また、1次元p波型模型については、模型を平行対として配置した場合に、多彩なジョセフソン電流特性が現れ、さらに超伝導ダイオード効果が発現することが明らかになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年、トポロジカル絶縁体・超伝導体という概念が確立・浸透し、それに伴いこれらの物質で予想される新しい現象を活用したデバイス開発が期待されてきた。その代表的なものに、これらの物質で期待されるマヨラナ準粒子状態を用いた量子計算素子の開発がある。しかしながら、そのためにはマヨラナ準粒子同士の位置交換という極めて困難な操作を実現する必要があり、実用化には遠い。本研究課題では、マヨラナ準粒子の存在が期待されるキタエフ模型をもとにして、比較的簡便な操作性をもつ新奇デバイス構造を理論的に3種類提案したことにより、トポロジカル物質の応用に新たな活路を開くことができたと考えている。

研究成果の概要（英文）：The objective of this research project is to propose theoretical devices with relatively simple controllability that take advantage of the novel physical properties predicted in the Kitaev model. Two types of the Kitaev model are known: a quantum spin type and a one-dimensional p-wave superconductor type. With regard to the quantum spin type model, a new switching mechanism has been proposed that controls the transport of magnetic excitations by Majorana quasiparticles. Furthermore, we predicted the emergence of rotationally symmetry-breaking superconducting states in carrier-doped systems, along with the proposal of a superconducting switch utilizing this mechanism. With regard to the 1D p-wave model, various Josephson current-phase relationships and also the superconducting diode effect have been predicted when the models are arranged in parallel pairs.

研究分野：物性理論

キーワード：キタエフ模型 マヨラナ準粒子 異常なジョセフソン効果 並進・回転対称性の破れた超伝導状態 超伝導ダイオード効果

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

トポロジカル絶縁体・超伝導体（以下、トポロジカル物質と総称する）の概念が確立してから10年以上経過し、それに伴いこれらの物質群で予想される新しい現象を応用したデバイスの開発が期待されていた。トポロジカル物質における新奇現象の中でも代表的なものとして、試料の表面を流れる純スピン流や、マヨラナ準粒子状態と呼ばれる特殊な量子力学的統計性をもつ準粒子の存在が挙げられる。表面スピン流もマヨラナ準粒子も、ともにトポロジカルに保護された状態であるために擾乱に強いと考えられており、その特性を利用して、例えば前者は散逸が極めて少ない低電力型スピントロニクス素子への応用など、そして後者は環境雑音に対して堅固な量子計算素子としての活用が早期から提案されていた。しかしながら、実用的なデバイスとしての活用には未だ遠いのが実情であった。その理由として、表面スピン流に関しては、それを外部に取り出すことが困難であること、量子計算素子に関しては、マヨラナ準粒子同士の位置交換操作 (braiding と呼ばれる) が、やはり極めて困難であることが挙げられる。そのため、トポロジカル物質に関する膨大な基礎的研究の蓄積を有効活用するための新たな道を拓くことが望まれていた。

一方で申請者たちは、トポロジカル物理の基本的理論模型の一つであるKitaev模型において、興味深い性質を見出していた。Kitaev模型には、蜂の巣格子上に量子スピンの配置されたもの（以下では「Kitaevスピン模型」と呼ぶ）と、1次元p波超伝導模型（以下では「p波Kitaev模型」と呼ぶ）の2種類が知られている。p波Kitaev模型においては、それを2本対にした際に生じる多彩なジョセフソン効果を、そしてKitaevスピン模型においては、マヨラナ粒子による磁気励起輸送がバルクで生じることを明らかにしていた。これらはともに、上述のbraiding等の実験的困難を伴わずにデバイス応用が期待される現象であると予想されたため、集中的な研究を行うべく本研究を開始した。

2. 研究の目的

2種類のKitaev模型において申請者らが見出した現象をもとにして、スピン輸送や超伝導回路における制御性の高いデバイスを理論的に提案することを目的とする。さらに、Kitaevスピン模型に電荷キャリアを注入した系における新しい現象を探索し、拡張されたKitaev模型の応用可能性についても探索を行う。

3. 研究の方法

- (1) Kitaevスピン模型は、局在マヨラナ粒子と遍歴マヨラナ粒子という準粒子を用いて記述することができる。これらのマヨラナ粒子に対する時間依存平均場近似を施し、系の磁气的励起の時間発展を解析可能にした。
- (2) 予備的研究において、p波Kitaev模型を2本平行に配置した系をひとつのユニットとしたとき、このユニット間のジョセフソン効果に多彩な位相-電流特性がみられることを見出した際には、数値対角化を用いていた。しかしながら、より一般的な状況における

解析を行うために、本研究では主に recursive Green 関数法を用いた。

- (3) キャリア注入されたキタエフ模型においては、先行研究により異方的超伝導状態が発現しうることが理論的に予測されている。異方的超伝導状態をデバイスに応用する際には、実空間における定式化による解析が有効であるため、renormalized mean-field theory (RMFT) に基づく Bogoliubov-de Gennes 方程式を構築し、解析を行なった。

4. 研究成果

- (1) キタエフスピン模型における磁氣的輸送現象：

2 つのキタエフ模型がある断面で弱い磁氣的相互作用 J' によって接合された系を考える (図 1)。このとき、領域 R には(001)方向に静的な外部磁場が印加されている。予備的研究によって、この系の左端 (図 1 の領域 L) にパルス磁場を印加すると、領域 M では磁氣的励起を示さないにも関わらず、領域 R に磁氣励起が生じることが示された。これは、領域 L に印加されたパルス磁場によって励起されたマヨラナ粒子が領域 M を伝播して領域 R に到達することにより、外部磁場下の局在マヨラナ粒子と相互作用して磁氣励起を引き起こすという機構であることが分かっている。この現象は、トポロジカル物質で通常見られる試料表面を流れるスピン流とは本質的に異なる、バルクを伝播する磁氣励起であり、しかも領域 M においては遍歴マヨラナ粒子のみが伝播しているため外的な擾乱に強いという、デバイス応用には極めて適したものであると考えられる。

しかしながら、磁氣励起の伝播が生じるだけでは不十分であり、そのスイッチング機構を考案する必要がある。キタエフ模型をマヨラナ準粒子で表示したとき、遍歴マヨラナ粒子はギャップレスの分散関係をもつ。一方で(111)方向の磁場を印加すると、この分散関係にはエネルギーギャップが生じることが知られている。したがって、図 1 の領域 R にエネルギーギャップが生じているならば、遍歴マヨラナ粒子の領域 R への流入が抑制され、スイッチング効果が生じることが期待される。そこで、マヨラナ粒子に対する時間依存平均場近似による解析を行い、領域 R の外部磁場は(001)方向 (エネルギーギャップなし) と(111)方向 (エネルギーギャップあり) の場合における遍歴マヨラナ粒子の伝播の様子を実時間解析によって調べた。その結果を図 2 に示す。図 2(a)においては、

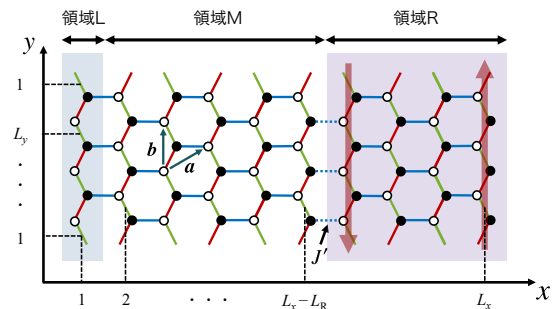


図 1 2 つのキタエフスピン模型からなる接合模型。領域 L と M からなる系が、領域 R と結合定数 J' で相互作用している。

遍歴マヨラナ粒子の励起が領域 R に流入していることが確認できるが、(111)方向の磁場によってエネルギーギャップが開いた場合 (図 2 (b)) においては、マヨラナ粒子の流入が著しく抑制されていることが見てとれる。したがって、領域 R の外部磁場方向を変化させることによって、磁気励起伝播のスイッチング効果が得られることが明らかになった。

ここで得られたスイッチング効果は、系を一種の量子ホール状態に転移させることによって生じるものであり、このような原理を活用したスイッチング効果はそれ自体が新奇性を伴う、キタエフ模型特有の現象であると言える。

(2) p 波キタエフ模型におけるジョセフソン効果：

p 波キタエフ模型を 2 本平行に配置してこれを一つのユニットとみなす。さらにこのユニット同士をジョセフソン接合した系を考える (図 3)。

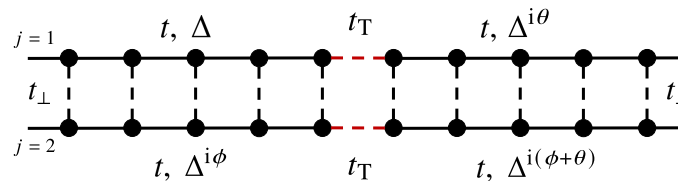


図 3 2 本の p 波キタエフ模型からなるユニットをジョセフソン結合した系。

事前の予備的な研究により、この系において鎖間の位相 θ やジョセフソン結合定数 t_t を変化させると、p 波キタエフ模型特有の 4π 周期をもつジョセフソン効果のみならず、通常の 2π 周期をもつ特性や π 接合と呼ばれる特性が得られることが明らかになった。ただし、これは数値対角化を用いて得られた限定的な結果であり、有限サイズ効果や有限温度の効果については未知であった。

そこで、recursive Green 関数法を用いて定式化を行い、より一般的な解析を行なったところ、ジョセフソン電流の位相-電流特性について詳細な情報が得られ (図 4 (a), (b))、さらに多彩なジョセフソン効果が得られる物理的な起源を、アンドレーエフ束縛状態の解析から明らかにすることができた (図 4 (c))。

さらに、図 3 の接合系において、空間反転対称性を破るような位相配置を考えると、

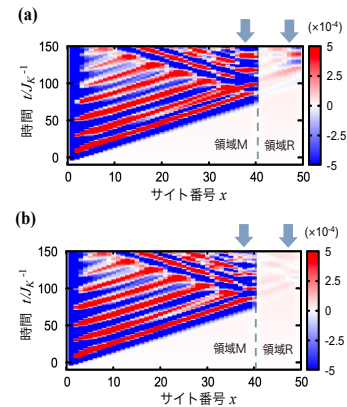


図 2 遍歴マヨラナ粒子の伝播の実時間解析結果。領域 R に (a) (001) 方向、(b) (111) 方向の磁場が印加されている場合を示している。

最近注目されている超伝導ダイオード効果が見られることを見出した (図 5).

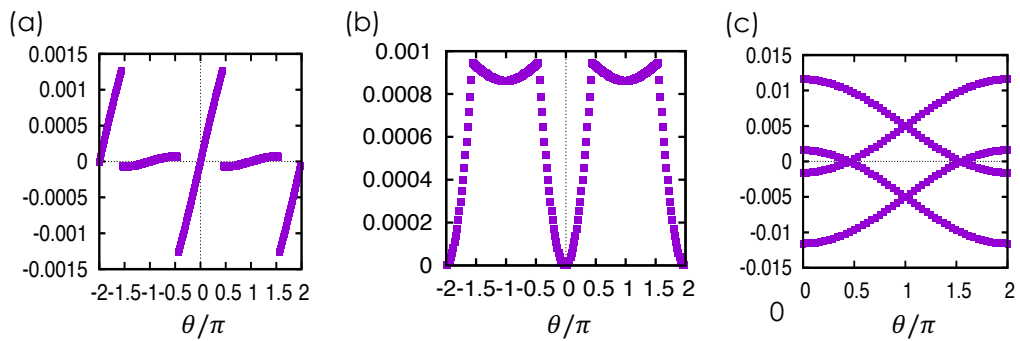


図 4 (a), (b) 図 3 の系において得られる多彩なジョセフソン位相-電流関係. (c) アンドレーエフ束縛状態のエネルギーのジョセフソン位相依存性.

このように、p 波キタエフ模型を平行に配置した系からなるジョセフソン接合素子には、制御性の高い様々な伝導特性が期待されることが明らかになり、この系がデバイス应用到極めて適していることが示された。研究期間の最後期に見出された超伝導ダイオード効果については、現在その物理的機構に関する理論的解析がほぼ終了しつつあり、超伝導回路における新規制御デバイスの提案を行う予定である。

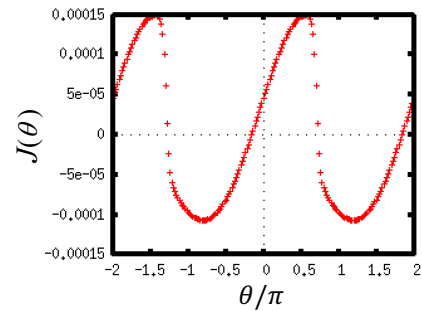


図 5 図 3 の系で見られた超伝導ダイオードの例.

(3) キャリア注入されたキタエフ模型における新規超伝導状態：

キタエフスピン模型が非自明な基底状態をもつことから、これにキャリアを注入すると新たな量子状態、特に超伝導状態が発現するのではないかと早期から期待されていた。本研究の解析の結果、キャリア密度が 15%程度の領域において、空間的な回転対称性が破れた超伝導状態が安定化することを明らかにした。これは、先行研究では見出されなかった新しい超伝導状態であり、その空間的異方性から、圧力効果によるジョセフソンスイッチング素子としての活用が期待される。

(4) まとめ

本研究で得られた成果により、2 種類のキタエフ模型はともに制御性の高い新奇デバイスとして活用可能であることが明らかになった。これにより、トポロジカル物質のデバイス应用到従来とは異なる可能性が提示され、新たな研究の潮流が創出されるものと期待される。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 S. Kobayashi, D. Ogawa, X. D. Xu, Y. K. Takahashi, A. Martin-Cid, K. Ishigami, Y. Kotani, M. Suzuki, T. Yoshioka, H. Tsuchiura, H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, K. Hono, S. Hirose, T. Nakamura	4. 巻 242
2. 論文標題 Multimodal analysis of Zr substitution effects on magnetic and crystallographic properties in (Sm _{1-x} Zr _x)(Fe _{0.8} Co _{0.2}) ₁₂ compounds with ThMn ₁₂ structure	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 118454 ~ 118454
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2022.118454	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 R. Uda, K. Koike, N. Inaba, H. Kato, M. Itakura, S. Okubo, H. Ohta, H. Tsuchiura	4. 巻 13
2. 論文標題 Maximum energy product of exchange-coupled Sm(FeCo) ₁₂ -Fe nanocomposite particle	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 025311 ~ 025311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/9.0000506	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 Matsubara Toranosuke, Koga Akihisa, Coates Sam	4. 巻 2461
2. 論文標題 Confined states in the tight-binding model on the hexagonal golden-mean tiling	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012003 ~ 012003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2461/1/012003	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 S. Tomita, D.-P. Yao, H. Tsuchiura, K. Nomura	4. 巻 12
2. 論文標題 Ab initio study on the possible magnetic topological semimetallic state in MnMg ₂₀	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 035331 ~ 035331
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/9.0000317	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 T. Yoshioka, H. Tsuchiura, P. Novak	4. 巻 105
2. 論文標題 Effect of element doping and substitution on the electronic structure and macroscopic magnetic properties of SmFe12-based compounds	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 14402
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.014402	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 H. Tsuchiura, T. Yoshioka, P. Novak, J. Fischbacher, A. Kovacs, T. Schrefl	4. 巻 22
2. 論文標題 First-principles calculations of magnetic properties for analysis of magnetization processes in rare-earth permanent magnets	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 748 ~ 757
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14686996.2021.1947119	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 該当する

1. 著者名 H. Sato, T. Yoshioka, H. Tsuchiura, Y. Mizuno, K. Koike, K. Takahashi, H. Kato	4. 巻 545
2. 論文標題 Rare-earth moment reduction and local magnetic anisotropy in Pr ₂ Fe ₁₄ B and Tm ₂ Fe ₁₄ B	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Magnetism and Magnetic Materials	6. 最初と最後の頁 168684 ~ 168684
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmmm.2021.168684	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 H. Taguchi, Y. Murakami, A. Koga	4. 巻 105
2. 論文標題 Thermally enhanced Majorana-mediated spin transport in the Kitaev model	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 125137
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.125137	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7件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 7件）

1. 発表者名 Hiroki Tsuchiura
2. 発表標題 Josephson effects between the Kitaev ladder superconductors
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2022 (SCES2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 C.-R. Xie, S. Fukuda, H. Tsuchiura, and Y. Tanaka
2. 発表標題 Majorana zero modes on parallel one-dimensional p-wave superconducting wires
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2022 (SCES2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 C.-R. Xie, S. Fukuda, H. Tsuchiura, and Y. Tanaka
2. 発表標題 Josephson current-phase relations between paired parallel one-dimensional p-wave superconducting wires
3. 学会等名 29th International Conference on LOW TEMPERATURE PHYSICS (LT29) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Fukuda, H. Tsuchiura and S. Suga
2. 発表標題 Real-space analysis of hole-doped spin liquid states based on an extended Kitaev model
3. 学会等名 29th International Conference on LOW TEMPERATURE PHYSICS (LT29) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Fukuda, H. Tsuchiura, and S. Suga
2. 発表標題 Real-space analysis of hole-doped spin liquid states based on an extended Kitaev model
3. 学会等名 The 34th International Symposium on Superconductivity (ISS2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. Tomita, D.-P. Yao, H. Tsuchiura, and K. Nomura
2. 発表標題 Ab-initio study on the possible magnetic topological semimetallic state in MnMg2O4
3. 学会等名 2022 Joint MMM-INTERMAG conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 O. Kanehira, H. Tsuchiura, and A. Koga
2. 発表標題 Spin current rectifier based on the Kitaev spin model
3. 学会等名 2022 Joint MMM-INTERMAG conference (国際学会)
4. 発表年 2022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
研究分担者	古賀 昌久 (Koga Akihisa) (90335373)	東京工業大学・理学院・准教授 (12608)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------