

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 12 日現在

機関番号：82110

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26800197

研究課題名(和文) マルチバンド超伝導体に対する擬ポテンシャルを用いた次元縮約有効理論の構築と応用

研究課題名(英文) Multi-band Eilenberger theory of superconductivity with systematic low-energy projection

研究代表者

永井 佑紀 (Nagai, Yuki)

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究職

研究者番号：20587026

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：鉄系高温超伝導体やトポロジカル超伝導体など、近年発見され積極的に研究されている超伝導体の多くは、通常の超伝導体よりも記述するために必要な自由度が多く、マルチバンド超伝導体と呼ばれる。超伝導体をシミュレーションする手法の一つとして準古典Eilenberger理論があり、磁場中の超伝導体や超伝導常伝導接合の振る舞いを理解する上で強力な手法であった。しかし、マルチバンド超伝導体にこの理論を適用することは困難であった。本研究では、マルチバンド超伝導体に適用可能な非常に汎用性のある準古典マルチバンドEilenberger理論を構築することに成功した。

研究成果の概要(英文)：Recent-discovered superconductors, such as iron-based high-Tc superconductors or topological superconductors, have many degrees of freedom to describe the material properties. These are called the multi-band superconductors. The quasiclassical Eilenberger theory is a powerful theory to understand the properties of superconductors in magnetic fields and superconductor-normal junctions. But, This theory could not be applied to the multi-band superconductors. We extend this quasiclassical Eilenberger theory to multi-band superconductors.

研究分野：物性理論

キーワード：超伝導 マルチバンド超伝導 非一様超伝導 準古典近似

1. 研究開始当初の背景

MgB₂ や鉄系超伝導体などのマルチバンド超伝導体は、そのマルチバンド性に起因する高い超伝導転移温度や多彩な物性によって着目されている。しかしながら、マルチバンド超伝導体はバンドの数が多いために計算負荷が高く、そしてその複雑さから物理的解釈が難しいことが問題となっている。

磁場中の超伝導体、あるいは超伝導-常伝導接合のような接合系を理論的に取り扱うための一つの手法として、準古典 Eilenberger 理論がある。この理論は、量子化磁束における準粒子束縛状態の空間依存性や d 波超伝導体を始めとする非従来型超伝導体における界面束縛状態等の様々な非一様超伝導体の物性を調べる為に用いられてきた。しかしながら、この理論はシングルバンドであることを仮定しており、マルチバンド超伝導体への適用に困難があった。

2. 研究の目的

本研究では、準古典 Eilenberger 理論を拡張し、「マルチバンド性」を擬ポテンシャルとして扱う次元縮約有効理論を構築し、実験との比較可能な簡便な理論的計算手法の提案を行うことが目的である。そして、構築した理論手法を用いて、マルチバンド超伝導体の様々な物理量を調べ、マルチバンド特有の物理現象を統一的に理解することも目的の一つである。

3. 研究の方法

準古典 Eilenberger 理論が低エネルギー有効理論であり、対応するマルチバンド Eilenberger 理論も同様に低エネルギー有効理論であることが期待されるため、フェルミ面付近の情報だけを取り出す射影演算子を導入し、新しい次元縮約有効理論を構築する。その際、以下の二点：理論構築「Eilenberger 理論の射影演算子を用いた拡張による次元縮約有効理論の構築と検証」、具体例蓄積「具体的な系（トポロジカル超伝導体、鉄砒素系超伝導体）での応用可能性の提示」を通して、マルチバンド超伝導体に対する低エネルギー有効理論を構築する。

理論構築においては、射影された有効理論における一般的な境界条件の導出、射影後のギャップ方程式の解法、自己エネルギーの次元縮約後の取り扱い、などについて調べる必要がある。また、これらの理論手法の正当性を確かめるためには、次元縮約をしない場合の理論との詳細な比較が必要であり、具体的な系を通じての相違点の把握が必要である。

具体例蓄積としては、トポロジカル超伝導体等のマルチバンド超伝導体を扱う。特に、トポロジカル超伝導体においては、通常の理論では説明できない不純物効果が実験で観測されており、この不純物効果の理論的説明が、構築したマルチバンド理論の有用性を調

べる上で有用である。

4. 研究成果

(1) トポロジカル超伝導体における低エネルギー有効理論の構築

準古典 Eilenberger 理論のマルチバンド超伝導体への拡張の前段階として、マルチバンド Bogoliubov-de Gennes 方程式を出発点とした低エネルギー有効理論の構築を行い、その理論をトポロジカル超伝導体候補物質 CuxBi₂Se₃ に適用した。その結果、軌道とスピンの計 4 自由度を持つこの物質のトポロジカル超伝導を、2 自由度のみを持つスピントリプレット超伝導にマップすることができた。これにより、準古典理論の範囲内では、フルギャップを持つトポロジカル超伝導状態はヘリウム 3 の B 相の超伝導状態は等価であることが示され、マルチバンド超伝導体に従来の準古典理論を適用できることが示された。

(2) トポロジカル超伝導体における超伝導磁束周りでの電子状態の解析と磁場回転比熱・熱伝導率測定の理論的解析

(1) で構築した低エネルギー有効理論を用いることで、トポロジカル超伝導体候補物質 CuxBi₂Se₃ の超伝導磁束周りでの電子状態の準古典グリーン関数の近似的解析解を構築し、磁束周りでの局所状態密度分布のエネルギー依存性を計算した。また、特定のトポロジカル超伝導状態は磁場を面内で回転させながら比熱や熱伝導率を測定することで検出することが可能であることを示した。

(3) トポロジカル超伝導体の不純物効果における相対論効果の発見と理論的解析

トポロジカル超伝導とスピントリプレット超伝導の類似性から、トポロジカル超伝導状態もスピントリプレット超伝導状態と同様に非磁性不純物に弱いと素朴には予想されるにも関わらず、実際の物質での平均自由行程は短く dirty な超伝導体であると報告されていた。この問題に対して、トポロジカル超伝導体候補物質 CuxBi₂Se₃ の不純物効果を理論的に調べた。その際、強いスピン軌道相互作用を持つ母物質 Bi₂Se₃ の有効モデルが、質量のあるディラック方程式で記述されることに着目し、超伝導状態においては相対論的粒子が超伝導状態にあると考えることで理論の見通しが良くなることを発見した。この時、母物質の絶縁体ギャップがディラック方程式の質量に対応しており、フェルミ波数が運動量に対応する。そして、この質量とフェルミ波数の比によって、トポロジカル超伝導体の非磁性不純物効果が大きく変化することを明らかにした。質量が小さい場合（あるいはフェルミ波数が大きい場合、高ドーピング領域）では、有効モデルは超相対論的ディラック方程式となり、トポロジカル超伝導は相対論的 s 波超伝導とみなすことができ、不純物に強い。一方、質量が大きい場合（ある

いはフェルミ波数が小さい時。低ドーピング領域)では、非相対論的方程式となり、トポロジカル超伝導体はp波超伝導体にマップされ、不純物に弱くなる。そのため、ドーピング量等が不純物耐性を決めていることがわかった。

(4) ノードのあるトポロジカル超伝導体の不純物効果の理論的解析

トポロジカル超伝導体候補物質である $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ はマルチバンド超伝導体であり、その強いスピン軌道相互作用によってトポロジカル超伝導の可能性が示唆されている。そして、候補となるトポロジカル超伝導状態のうちいくつかの超伝導状態にはポイントノードがあると示唆されている。従来の理解では、ポイントノードが超伝導ギャップに存在している場合、不純物が存在するとそのノード周りでの準粒子励起が生じやすいため、その超伝導は不純物に弱いと考えられていた。しかし、 $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ においては、その強いスピン軌道相互作用によって、例えば超伝導ギャップにポイントノードが存在していたとしても不純物に強くなりうることを理論的に明らかにした。そして、不純物耐性は、 Bi_2Se_3 の質量ギャップによって生じる軌道インバランスによる軌道ゼーマン効果が決定していることがわかった。この効果は、マルチバンド超伝導体特有の効果である。

(5) トポロジカル超伝導体における核磁気緩和率の負のコヒーレンスピーク

トポロジカル超伝導体候補物質 $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ における核磁気緩和率の理論的解析を行った。その結果、転移温度直下において負のコヒーレンスピークが現れることを理論的に明らかにした。また、このコヒーレンスピークの大きさは、質量ギャップとフェルミ波数の比によって特徴づけられており、有効模型がディラック方程式によって記述されていることが本質的であることがわかった。このようなコヒーレンスピークはトポロジカル超伝導特有のものであり、この負のコヒーレンスピークを観測することでトポロジカル超伝導かどうかを判別できることを意味している。

(6) トポロジカル超伝導体の磁束状態におけるスピン偏極マヨラナ準粒子状態

トポロジカル超伝導体候補物質 $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ の磁束周りでの準粒子束縛状態について、ディラック Bogoliubov-de Gennes 方程式を用いて理論的に解析を行った。その結果、トポロジカル超伝導状態の磁束周りではマヨラナ準粒子束縛状態が生じ、その準粒子のスピンが偏極していることを明らかにした。これは、トポロジカル超伝導体における強いスピン軌道相互作用が原因であり、磁束周りでは軌道角運動量が保存せずスピン角運動量と軌道角運動量の和である全角運動量が保存す

ることの帰結である。

(7) 二次元トポロジカル超伝導体の不純物効果

マルチバンド超伝導体の低エネルギー有効理論を構築するためには、マルチバンド超伝導体特有の現象についてよく理解している必要がある。二次元s波超伝導体にゼーマン磁場とラシュバ型スピン軌道相互作用が存在する場合、ある磁場以上でトポロジカル超伝導体になることが知られている。この系はスピン軌道相互作用とゼーマン磁場によってフェルミ面が二枚に分裂しており、最も単純なマルチバンド超伝導体と考えることができる。この系における不純物効果について、理論的に調べた。その結果、不純物効果はトポロジカル転移前後で劇的に変化するわけではなく、ゼーマン磁場に対して連続的に変化することがわかった。また、不純物が一つ導入された場合、そこにはミッドギャップ束縛状態が生じ、そのミッドギャップのエネルギーが低ければ低いほど、超伝導状態が不純物に弱いことを明らかにした。

(8) 次元縮約有効理論の構築による準古典マルチバンド Eilenberger 方程式の一般的導出

マルチバンド超伝導体における準古典マルチバンド Eilenberger 方程式を導出した。その際、一般的な境界条件の方程式の導出、有効ギャップ方程式の導出、不純物効果による自己エネルギーの方程式の導出を行った。この理論を、様々なマルチバンド超伝導体に適用し、低エネルギー有効理論を使わずに導出した結果と等しい結果が得られることを確認した。つまり、当初の研究目的である、次元縮約有効理論構築に成功した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計25件)全て査読有

1. S. L. Goertzen, K. Tanaka, and Yuki Nagai, Self-consistent study of Abelian and non-Abelian order in a two-dimensional topological superconductor, PHYSICAL REVIEW B, 95, 2017, 64509, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.064509

2. Yuki Nagai, Yasushi Shinohara, Yasunori Futamura, and Tetsuya Sakurai, Reduced-Shifted Conjugate-Gradient Method for a Green's Function: Efficient Numerical Approach in a Nano-Structured Superconductor, Journal of the Physical Society of Japan, 86, 2017, 14708, DOI: 10.7566/JPSJ.86.014708

3. Shingo Yonezawa, Kengo Tajiri, Suguru

- Nakata, Yuki Nagai, Zhiwei Wang, Kouji Segawa, Yoichi Ando and Yoshiteru Maeno, Thermodynamic evidence for nematic superconductivity in $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$, *Nature Physics*, 13, 2017, 123-126, DOI: 10.1038/nphys3907
4. Yuki Nagai and Yukihiro Ota, Nuclear magnetic relaxation rates of unconventional superconductivity in doped topological insulators, *PHYSICAL REVIEW B*, 94, 2016, 134516-1-8, DOI: 10.1103/PhysRevB.94.134516
 5. Howon Kim, Shi-Zeng Lin, Matthias J. Graf, Yoshinori Miyata, Yuki Nagai, Takeo Kato, and Yukio Hasegawa, Electrical Conductivity through a Single Atomic Step Measured with the Proximity-Induced Superconducting Pair Correlation, *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 117, 2016, 116802-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.116802
 6. Evan D. B. Smith, K. Tanaka, and Yuki Nagai, Manifestation of chirality in the vortex lattice in a two-dimensional topological superconductor, *PHYSICAL REVIEW B*, 94, 2016, 064515-1-13, DOI: 10.1103/PhysRevB.94.064515
 7. Yuki Nagai, Shintaro Hoshino, and Yukihiro Ota, Critical temperature enhancement of topological superconductors: A dynamical mean-field study, *PHYSICAL REVIEW B*, 93, 2016, 220505(R)-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevB.93.220505
 8. Yuki Nagai and Hiroki Nakamura, Multi-band Eilenberger Theory of Superconductivity: Systematic Low-Energy Projection, *Journal of the Physical Society of Japan*, 85, 2016, 074707-1-18, DOI: 10.7566/JPSJ.85.074707
 9. Atsuo Shitade and Yuki Nagai, Orbital angular momentum in a topological superconductor with Chern number higher than 1, *PHYSICAL REVIEW B*, 93, 2016, 174517-1-9, DOI: 10.1103/PhysRevB.93.174517
 10. Y. Higashi, Y. Nagai, T. Yoshida, Y. Masaki, and Y. Yanase, Robust zero-energy bound states around a pair-density-wave vortex core in locally noncentrosymmetric superconductors, *Physical Review B*, 93, 2016, 104529-1-10, DOI: 10.1103/PhysRevB.93.104529
 11. Y. Nagai, Y. Ota, and M. Machida, Inverse coherence effects in nuclear magnetic relaxation rates as a sign of topological superconductivity, *Physical Review B*, 92, 2015, 180502(R)-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevB.92.180502
 12. A. Shitade and Y. Nagai, Orbital angular momentum in a nonchiral topological superconductor, *Physical Review B*, 92, 2015, 024502-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevB.92.024502
 13. Y. Nagai, H. Nakamura, M. Machida and K. Kuroki, First-principle study of antimony doping effects on the iron-based superconductor $\text{CaFe}(\text{Sb}_x\text{As}_{1-x})_2$, *Journal of the Physical Society of Japan*, 84, 2015, 093702-1-4, DOI: 10.7566/JPSJ.84.093702
 14. Y. Nagai, Robust superconductivity with nodes in the superconducting topological insulator $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$: Zeeman orbital field and non-magnetic impurities, *Physical Review B*, 91, (2015), 060502(R)-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevB.91.060502
 15. Y. Nagai, Y. Ota, and M. Machida, Topological s-wave pairing superconductivity with spatial inhomogeneity: Mid-gap-state appearance and robustness of superconductivity, *Journal of the Physical Society of Japan*, 84, 2015, 034711-1-8, DOI: 10.7566/JPSJ.84.034711
 16. Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, Surface states around a vortex in topological superconductors: Intersection of a surface and a vortex, *Journal of the Physical Society of Japan*, 84, 2015, 033703-1-4, DOI: 10.7566/JPSJ.84.033703
 17. S. Yoshizawa, H. Kim, T. Kawakami, Y. Nagai, T. Nakayama, X. Hu, Y. Hasegawa, and T. Uchihashi, Imaging Josephson vortices on the surface superconductor $\text{Si}(111)$ -(7×3)-In using a scanning tunneling microscope, *Physical Review Letters*, 113, 2014, 247004-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.247004
 18. Y. Nagai, Y. Ota, and M. Machida, Impurity effects in a two-dimensional topological superconductor: A link of Tc-robustness with a topological number, *Journal of the Physical Society of Japan*, 83, 2014, 094722-1-5, DOI: 10.7566/JPSJ.83.094722
 19. Y. Nagai, Y. Ota, and M. Machida, Nonmagnetic impurity effects in a three-dimensional topological superconductor: From p- to s-wave behaviors, *Physical Review B*, 89, 2014, 214506-1-6, DOI: 10.1103/PhysRevB.89.214506
 20. T. Kawakami, Y. Nagai, S. Yoshizawa, H. Kim, Y. Hasegawa, T. Nakayama, T. Uchihashi and X. Hu, Excitation spectrum of Josephson vortices on surface superconductor, *Journal of Physics: Conference Series*, 568, 2014, 022022-1-5, DOI: 10.1088/1742-6596/568/2/022022

21. Y. Higashi, Y. Nagai, T. Yoshida and Y. Yanase, Vortex Core Structure in Multilayered Rashba Superconductors, Journal of Physics: Conference Series, 568, 2014, 022018-1-5, DOI: 10.1088/1742-6596/568/2/022018
22. Y. Nagai, Y. Ota and M. Machida, Robustness against non-magnetic impurities in topological superconductors, 568, 2014, 02230-1-5, DOI: 10.1088/1742-6596/568/2/022030
23. Y. Nagai, Field-angle-dependent Low-energy Excitations around a Vortex in the Superconducting Topological Insulator $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$, Journal of the Physical Society of Japan, 83 2014, 063705-1-4, DOI: 10.7566/JPSJ.83.063705
24. Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, Spin-polarized Majorana Bound States around a Vortex in Topological Superconductors, Journal of the Physical Society of Japan, 83 2014, 064703-1-7, DOI: 10.7566/JPSJ.83.064703
25. Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, Quasiclassical Treatment and Odd-parity/Triplet Correspondence in Topological Superconductors, Journal of the Physical Society of Japan, 83, 2014, 053705-1-4, DOI: 10.7566/JPSJ.83.053705

〔学会発表〕(計 23 件)

1. 永井佑紀, 太田幸宏, ドープされたトポロジカル絶縁体の超伝導状態での核磁気緩和率の理論的解析, 2016年日本物理学会秋季大会, 2016年09月13日~2016年09月16日, 金沢大学(石川県金沢市)
 2. Yuki Nagai, From p- to s-wave behaviors in topological superconductors with non-magnetic impurities, Workshop on Probing and Understanding Exotic Superconductors (EXS2014), 2014年10月27日~2014年10月31日, Trieste, Italy
 3. Yuki Nagai, Robustness against non-magnetic impurities in topological superconductors, 27th International Conference on Low Temperature Physics (LT-27), 2014年08月06日~2014年08月13日, Buenos Aires, Argentina
- 他 20 件

6. 研究組織

(1) 研究代表者

永井 佑紀 (Nagai Yuki)

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構
 構・システム計算科学センター・研究職
 研究者番号: 20587026