

平成 29 年 6 月 7 日現在

機関番号：15301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2016

課題番号：25400373

研究課題名(和文) 電場誘起表面超伝導の局所電子状態解明と物性評価の理論研究

研究課題名(英文) Theoretical study of local electronic states and physical properties in electric-field-induced surface superconductivity

研究代表者

市岡 優典 (Ichioka, Masanori)

岡山大学・異分野基礎科学研究所・教授

研究者番号：90304295

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,000,000円

研究成果の概要(和文)：電場誘起表面超伝導の系について、ボゴリウボフ-ドジャン方程式による計算を行い、表面付近に束縛された電子の局所的な超伝導状態や電子状態を解明した。特に、表面に平行な磁場による超伝導破壊効果について、常磁性による効果に加え、新たに反磁性による効果を理論評価する手法を開発した。これにより、超伝導の磁場依存性において、この系の持つサブバンド構造や多ギャップ超伝導の特徴が物性に顕著に反映することを明らかにした。

研究成果の概要(英文)： Spatial structures of the local superconductivity and the bound electronic state near the surface are theoretically studied based on calculations of the Bogoliubov-de Gennes equation, focusing electric-field-induced surface superconductivity. Especially, in the pair-breaking effect by magnetic fields parallel to the surface, new mechanism by the diamagnetic effect is considered in addition to the paramagnetic effect. From the results, it is clarified that contributions by the sub-band structure and multi-gap superconductivity eminently appear in the magnetic field dependence of the superconductivity.

研究分野：数物系科学

キーワード：物性理論 超伝導・密度波 電界効果 表面・界面物性 電場誘起表面超伝導 多バンド超伝導 磁場中の超伝導物性 量子閉じ込め

1. 研究開始当初の背景

電界効果型トランジスタ(FET)構造により、界面に電場をかけて、表面付近にキャリア電子を誘起すると、絶縁体の表面を金属状態とすることができる(図1参照)。この系の最大のメリットは電場をかけるゲート電圧により、誘起されるキャリア密度を自在に制御できることである。そのため、これまでの化学ドーピングに代わる物性制御の手法として非常に注目されている。その中でも、岩佐(東大工)らのグループは電気2重層トランジスタ(EDLT)構造を用いて強い電場を印加することに成功しキャリア密度を大きく変化させる手法を確立した。これにより、絶縁体であるSrTiO<sub>3</sub>[引用文献①], ZrNCl[②], KTaO<sub>3</sub>[③]等において表面電子状態の超伝導を実現し、そのキャリア密度依存性を報告している。別の手法の関連研究としては、LaTiO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub>[④]などのヘテロ接合界面におけるSrTiO<sub>3</sub>の表面超伝導のゲート電圧制御も報告されている。また、高温超伝導体の転移温度のゲート電圧制御も実現している。このように、電場誘起キャリア制御の手法は今後の物性研究の重要な研究手段であり、様々な系の研究に応用されていくと期待される。

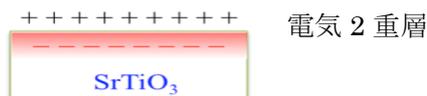


図1. 電場誘起表面金属状態の模式図

電場誘起キャリア制御による研究の今後の発展のために必要なことを、物理学研究の立場から考えると、電場誘起表面金属状態の局所構造(特に深さ方向依存性)がどうなっているか解明することが急務となっていた。当時は、金属状態となっている表面の厚さの評価も不明確な状況であった。本来は、実験と理論が連携して解明にあたるべきであるが、この系に関する理論研究は、ほとんどない状況であった。このような理論研究の現状と必要性を知り、本研究代表者は専門分野の超伝導状態の解明を通して、電場誘起による物性制御を理解するための理論研究を約1年前から開始しており、予備的な研究成果が出始めていた[⑤]。

電場誘起表面超伝導の系は、電場による表面近くの閉じ込めポテンシャルに束縛された電子系であり、理論の立場から見ると「閉じ込めポテンシャル中に束縛されたフェルミ粒子の超伝導」である。これは、調和振動子ポテンシャルに束縛された冷却フェルミ原子気体の超伝導と本質的に同じであり、研究代表者の原子気体での研究実績が適用できる。また、磁場中の超伝導体の物性やスピン3重項超伝導に関する申請者の研究実績も、この系の本質的な特性の理解のために、重要な役割を果たすと考えられた。これらの背景と実績をもとに、本研究を立案するに至った。

2. 研究の目的

電場誘起表面超伝導とバルクの超伝導の特性の相違を明らかにすることを第一の目的とする。そのため、まずはs波超伝導の基本ケースにおいて、Bogoliubov-de Gennes(BdG)方程式から超伝導電子の波動関数をきちんと計算し、電場誘起表面超伝導の局所電子状態と物性評価のための理論計算手法を開発して確立させる。そして、局所的な電荷分布や超伝導ギャップの空間構造を表面からの深さの関数として理論評価するとともに、この系の特徴であるサブバンドに依存した多ギャップ超伝導の構造と物性への寄与を解明する。

特に、磁場により超伝導が破壊される様子から、超伝導の特徴を詳しく知ることができるとの期待から、この系の超伝導状態の磁場依存性を理論計算する手法を開発する。そして、磁場依存性の中から、この系の特徴であるサブバンド構造や多ギャップ超伝導が反映した振る舞いを見出すことを目的とする。

また、多ギャップ超伝導としては、MgB<sub>2</sub>や鉄系超伝導などの多バンド超伝導体の磁場依存性の研究がこれまでに進行しており、これらの多バンド超伝導体と表面超伝導とを比較しての研究も進める。

3. 研究の方法

電場誘起表面超伝導に関する理論計算手法を確立するため、まずは、s波超伝導引力の基本ケースを考え、電場誘起表面超伝導の局所電子状態計算のための手法を開発し、その有効性を検証することから始める。本研究ではシュレディンガー方程式を超伝導の場合に拡張したBdG方程式を数値的に解くことにより、表面近くの超伝導の電子波動関数を正確に求める。これより、電子の分布や超伝導秩序変数の局所的な空間構造が決まり、局所状態密度を計算することにより超伝導ギャップ構造の空間変化もわかる。この計算では、表面からの電場による閉じ込めポテンシャルを考慮する。この過程で、表面金属状態の電子による遮蔽効果も考慮して、局所的な電荷分布と電場分布をセルフコンシステントになるよう決定する手法も開発する。

さらには、磁場により超伝導が破壊される様子を知るため、電場誘起表面超伝導に磁場をかけた状態についての理論計算手法を開発する。これはベクトルポテンシャルを導入してBdG理論による計算を行なうことになり、磁場に垂直方向の空間変調が現れるため、磁場無しの場合より計算規模が大きくなる。そのため、本研究費で購入した多コアのコンピューターを駆使して数値計算を進める。電荷分布や超伝導ギャップが深さ方向に不均一である表面超伝導において、磁場による超伝導対破壊も不均一に起きるか、また、サブバンド毎の超伝導対破壊の様子を調べる。この結果は、MgB<sub>2</sub>の多バンド超伝導の場合との比較も行ない、磁場依存性を通して、表面超伝導ならではの特性を明らかにする。

#### 4. 研究成果

電場誘起表面超伝導の物性の定量的理論評価のため、この系の局所電子状態と超伝導特性についての微視的理論計算手法を確立した。計算手法としては BdG 方程式を数値的に解くことにより、表面付近の閉じ込めポテンシャルに束縛された電子について、超伝導秩序変数の局所的な空間構造を決め、局所電子状態密度を計算することにより超伝導ギャップ構造の空間変化などを評価できるようにした。電場誘起表面超伝導の特徴としては、表面からの深さの関数として電子状態の分布が変化することであり、これに伴う超伝導状態の深さ方向の空間変化の評価を行った。また、表面での量子閉じ込めの効果によるサブバンド依存の多ギャップ超伝導がどのように物性へ寄与するかにも注目して、次のような研究成果を得た。

(1) 磁場を表面に平行にかけた場合を想定し、磁場による超伝導対破壊効果を評価した。ゼーマン効果に起因する常磁性対破壊効果によっては、図 2 のように↑と↓のスピンの電子状態が分裂するが、高次(図中の 5 や 4)のサブバンドでは超伝導ギャップが小さいため、磁場を増加させた場合には高次のサブバンドから順に、分散関係がフェルミエネルギー $E_F$ にかかって超伝導が破壊されていくことがわかった。また、ベクトルポテンシャルを導入して BdG 方程式を解く手法を開発し、磁場を遮蔽しようとする電流による反磁性対破壊効果も計算できるようにした。最初は、常磁性効果のみの超伝導抑制の様子について評価し、さらには反磁性対破壊と常磁性対破壊の両方を考慮した場合の計算へと発展させている。例えば、図 3 では、磁場がゼロの場合の超伝導秩序変数(細線)が、磁場によって太線のように抑制されていく空間構造を示している。

これらの理論計算により、外部磁場の増加に伴う超伝導状態の変化を詳細に調べ、超伝導が磁場で抑制され、一次転移で超伝導が消失する様子を明らかにした。この過程では、サブバンド毎に電子状態が正常相に転移する磁場があり、磁場の上昇とともに高次のサブバンドから順に段階的に正常相へと転移していくことがわかった。この転移により、超伝導秩序変数の平均値(図 4)やフェルミエネルギー状態密度(図 5)、常磁性磁化などの物理量の磁場依存性においても段階的な変化が見られることがわかった。これらの振る舞いは常磁性対破壊のみの場合が顕著である。反磁性対破壊効果を考慮した場合には、反磁性電流の影響で、この振る舞いが鈍って見られることもわかった。これらの結果により、超伝導秩序変数の振幅やゼロエネルギー状態密度、常磁性磁化などの物理量の磁場依存性において、サブバンドが複数あり多ギャップ超伝導である寄与がはっきりと表れることや、常磁性と反磁性の対破壊の役割を理論的に明らかにすることができた。これらの成果の一部は

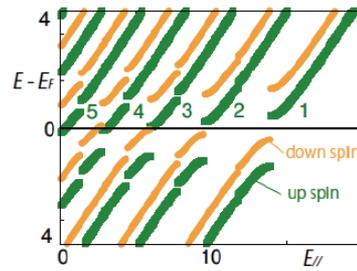


図2 常磁性効果のみの場合のサブバンドの分散関係。横軸 $E_{\parallel}$ は表面に平行な成分の運動エネルギー。

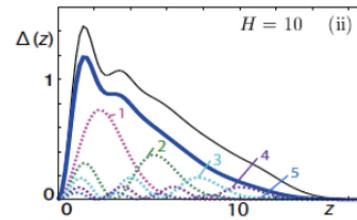


図3 超伝導秩序変数 $\Delta$ の深さz依存性。破線は1~5のサブバンドへ分解した大きさ。

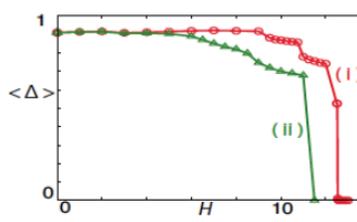


図4 超伝導秩序変数の平均 $\langle \Delta \rangle$ の磁場依存性。(i)は常磁性効果のみ。(ii)は反磁性効果が加わった場合。

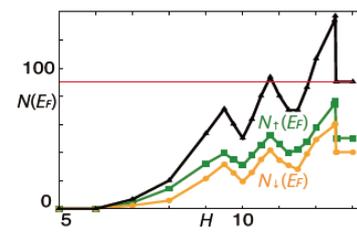


図5 フェルミエネルギー状態密度の磁場依存性。常磁性効果のみ。↑と↓スピンに分けた量も示している。

雑誌論文①に掲載決定しているが、成果全体をまとめた論文も投稿中である。

(2) 表面近くの電子の閉じ込めポテンシャルについては、三角ポテンシャルの場合に加え、表面に集まった電子による電場の遮蔽効果が顕著な場合についての計算手法の拡張を行った。遮蔽効果の顕著な場合には、表面から深い位置にいくにつれ電場が弱まり、電子も深い位置まで分布できるようになる。この場合について、常磁性による超伝導破壊効果の様子を理論計算すると、サブバンドや多ギャップの構造を反映した磁場依存性となるものの、三角ポテンシャルの場合(図 4 と図 5)の場合に比べ、物理量の跳びは鈍る傾向にあることがわかった。この成果は雑誌論文③に発表した。

(3) 多ギャップ超伝導に関する理解を深めるため、 $MgB_2$  の多バンド超伝導の磁場依存性に関する研究も平行して進めた。特に磁場下で渦糸が存在するときに、超伝導ギャップの大きさが異なるバンドで渦糸半径が同じか異なるかの論争に決着をつける必要があり、Eilenberger 理論による渦糸格子での計算を行って渦糸半径の磁場、温度、引力パラメータに関する依存性を調べた。この結果、バンドにより渦半径が異なる場合は、極端な条件のときに限られることを明らかにした。こ

の成果は雑誌論文②に発表している。

(4)この他、SrTiO<sub>3</sub>の表面電子状態を、より正確に扱うことを可能とするため、第一原理電子状態計算の環境(Wien2k)を整備し、スピン軌道相互作用の寄与も含め、多軌道電子状態を考慮した計算手法の開発についての検討も進めた。

<引用文献>

- ① K.Ueno, *et al.* Nature Mater. **7**, 855 (2008).
- ② J.T.Ye, *et al.*, Nature Mater. **9**, 125 (2011).
- ③ K. Ueno, *et al.*, Nature Nanotechnol. **6**, 408 (2011).
- ④ J. Biscaras, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 247004 (2012).
- ⑤ Y. Mizohata, M. Ichioka, and K. Machida, "Multiple-gap structure in electric-field-induced surface superconductivity", Phys. Rev. B **87**, 014505\_1–5 (2013).

#### 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 3 件)

- ① M. Ichioka, M. Nabeta, K. K. Tanaka, and S. Onari, "Paramagnetic and diamagnetic pair-breaking effect in electric-field-induced surface superconductivity under parallel magnetic fields", Journal of Physics: Conference Series, 掲載決定 (2017), 査読有.
- ② M. Ichioka, V. G. Kogan, and J. Schmalian, "Locking of length scales in two-band superconductors", Physical Review B, Vol. **95** No. 6, pp. 064512\_1–7 (2017), 査読有.  
DOI: 10.1103/PhysRevB.95.064512
- ③ M. Nabeta, K. K. Tanaka, S. Onari, and M. Ichioka, "Pair-breaking effects by parallel magnetic field in electric-field-induced surface superconductivity", Physica C: Superconductivity and its Applications, Vol. **530**, pp. 8–10 (2016), 査読有.  
DOI: 10.1016/j.physc.2016.04.006

[学会発表] (計 10 件)

- ① 市岡優典, V. G. Kogan, J. Schmalian, "2 バンド超伝導体におけるバンド毎の渦糸半径の磁場温度依存性", 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 17-20 日, 大阪大学(豊中).
- ② M. Ichioka, M. Nabeta, K. K. Tanaka, and S. Onari, "Paramagnetic and Diamagnetic Pair-Breaking Effect in Electric-Field-Induced Surface Superconductivity under Parallel Magnetic Fields", 29th International Symposium on Superconductivity (ISS2016), 2016 年 12 月 13-15 日, Tokyo International Forum (東京).
- ③ 市岡優典, V. G. Kogan, J. Schmalian, "2 バ

ンド超伝導体におけるバンド毎の渦糸半径", 第 24 回渦糸物理国内会議 -超伝導体における渦糸状態の物理と応用(2016)-, 2016 年 11 月 28-30 日, 角館(仙北).

- ④ 鍋田昌宏, 田中健太, 大成誠一郎, 市岡優典, "平行磁場下での電場誘起表面超伝導中の電子状態と反磁性電流", 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 13-16 日, 金沢大学(金沢).
- ⑤ 鍋田昌宏, 田中健太, 大成誠一郎, 市岡優典, "電場誘起表面超伝導の平行磁場下における電子状態", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学(仙台).
- ⑥ 鍋田昌宏, 市岡優典, 田中健太, "電場誘起表面超伝導での平行磁場における対破壊効果", 第 23 回渦糸物理国内会議 -超伝導体における渦糸状態の物理と応用(2015)-, 2015 年 12 月 7-9 日, 志賀島(福岡).
- ⑦ M. Nabeta, M. Ichioka, and K. K. Tanaka, "Pair-Breaking Effect by Parallel Magnetic Field in Electric-Field-Induced Surface Superconductivity", 28th International Symposium on Superconductivity (ISS2015), 2015 年 11 月 16-18 日, 船堀(東京).
- ⑧ 鍋田昌宏, 田中健太, 市岡優典, "電場誘起表面超伝導での平行磁場による対破壊効果", 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 16-19 日, 関西大学(吹田).
- ⑨ 市岡優典, 溝畑陽介, "電場誘起表面超伝導の平行磁場での局所電子状態", 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月 7-10 日, 中部大学(春日井).
- ⑩ 市岡優典, 溝畑陽介, "電場誘起表面超伝導のサブバンド構造と局所電子状態", 第 22 回渦糸物理国内会議, 2014 年 7 月 10-12 日, ハイランドふらの(富良野).

[その他]

ホームページ等

<http://www.physics.okayama-u.ac.jp/mp/>

#### 6. 研究組織

(1) 研究代表者

市岡 優典 (ICHIOKA, Masanori)

岡山大学・異分野基礎科学研究所・教授

研究者番号: 90304295

(2) 研究協力者

大成 誠一郎 (ONARI, Seiichiro)

岡山大学・異分野基礎科学研究所・准教授

田中 健太 (TANAKA, Kenta)

岡山大学・大学院自然科学研究科・大学院生

鍋田 昌宏 (NABETA, Masahiro)

岡山大学・大学院自然科学研究科・大学院生

Vladimir Kogan

アイオワ州立大学・アメス研究所・研究主幹

Jörg Schmalian

カールスルーエ工科大学・理論凝縮系物理学

研究所・教授