

令和 3 年 4 月 23 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2020

課題番号：19K14654

研究課題名（和文）従来型・非従来型超伝導体に対する超伝導密度汎関数理論の開発と応用

研究課題名（英文）Development of superconducting density functional theory for conventional and unconventional superconductors

研究代表者

野本 拓也（Nomoto, Takuya）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・助教

研究者番号：60804200

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,600,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題では、非経験的第一原理計算に基づく超伝導計算手法の開発を行った。特に、超伝導密度汎関数理論へのスピン軌道相互作用の導入・奇パリティ超伝導計算の実装を行い、 $\text{Sn}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ および $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ の超伝導発現機構の解析を行った。また、中間表現基底+スパースサンプリングの手法を適用し、従来困難だった転移温度の低い超伝導体において、第一原理的Migdal-Eliashberg計算からその転移温度を定量評価することに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

超伝導密度汎関数理論へのスピン軌道相互作用の導入や奇パリティ超伝導計算の実装は、トポロジカル超伝導をはじめとする非従来型超伝導を第一原理的に計算する枠組みを提供する点で意義深い。また、本研究課題で、高精度な超伝導計算手法である第一原理Migdal-Eliashberg計算を転移温度の低い超伝導体に適用することが可能になった。これにより今まで超伝導密度汎関数理論では説明できなかった超伝導体の発現機構に、別手法からアプローチすることが可能となった。

研究成果の概要（英文）：In this project, we have developed a non-empirical method to calculate superconductivity. In particular, we have introduced the spin-orbit interaction into the superconducting density functional theory and implemented the odd-parity pairing to analyze the mechanism of superconductivity in $\text{Sn}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ and $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$. We have also succeeded in quantitatively evaluating the transition temperature of superconductors with low transition temperatures. This has been achieved using the ab initio Migdal-Eliashberg calculation combining with the intermediate representation basis and the sparse sampling method.

研究分野：物性物理学

キーワード：超伝導 第一原理計算 超伝導密度汎関数理論 Migdal-Eliashberg理論

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

近年、鉄系超伝導体をはじめとする強相関電子系において有効模型を用いた微視的理論が急速に進展しており、系の対称性やスピン・軌道および格子などの自由度の超伝導発現機構に対する影響が徐々に明らかになってきた。これに対し、マヨラナゼロモードやパリティ混成などの特異な性質で実験・理論ともに大きな関心を集めるトポロジカル超伝導体や空間反転対称性の破れた超伝導体では、強いスピン軌道相互作用や副格子の存在により、これらの自由度がより中心的な役割を担うと期待される。

一方、第一原理的な超伝導理論である超伝導密度汎関数理論 (SCDFT) は、弱結合領域における従来型超伝導体の転移温度を精度よく見積もることに成功し、近年でも様々な質的進展が見られるものの、多自由度性が生み出す新奇な現象を解明する方面には用いられていない。また、既存の SCDFT は、 MgB_2 や $Li_xHfNiCl$ に代表される比較的高い転移温度を持つ従来型超伝導体の転移温度を正しく予測できないという問題も知られており、その改良が望まれる。

2. 研究の目的

SCDFT は経験的パラメータを全く必要としない稀有な第一原理的計算手法であり、その転移温度予測能力の向上が物質探索やマテリアルデザインといった応用面で必須となるばかりでなく、トポロジカル超伝導体や MgB_2 の理解といった基礎物理学的問題に対しても他の手法にはない多くの利点を持つ。そこで、本研究課題では SCDFT の改良と発展を通じて、スピン・軌道・格子自由度の融合という近年の超伝導研究におけるホットトピックスおよび MgB_2 などの高い転移温度を持つ従来型超伝導体の理解といった基本的問題に非経験的計算手法の立場から切り込み、その解明を試みる。

3. 研究の方法

本研究課題は主に、(1)SCDFT を用いた非従来型超伝導体の第一原理計算、および(2)既存の SCDFT で説明できない従来型超伝導体の理解を目的としている。以下、それぞれの具体的な研究手法について記述する。

(1) SCDFT を用いた非従来型超伝導体の第一原理計算

SCDFT は経験的パラメータを必要としない優れた超伝導理論であるが、様々な問題点も指摘されている。中でもスピン軌道相互作用を取り入れた実質的なコードが存在しない点は即急に解決すべき課題である。ドーピングしたトポロジカル絶縁体 $Cu_xBi_2Se_3$ における奇パリティ超伝導や空間反転対称性の破れた二次元物質におけるイジング超伝導など、スピン軌道相互作用が重要とされる超伝導物質は枚挙にいとまがなく、SCDFT をこれら非従来型超伝導に拡張することは重要な課題である。本課題では、特にトポロジカル超伝導体や空間反転対称性の破れた超伝導体への適用を念頭に、スピン軌道相互作用や奇パリティ超伝導を取り扱えるように理論の定式化を行い、第一原理計算パッケージへの実装を行う。

(2) 既存の SCDFT で説明できない従来型超伝導体の理解

SCDFT の持つもう一つの問題点として、高い転移温度を持つ代表的な従来型超伝導体である MgB_2 などの転移温度が正確に予測できない点が挙げられる。通常の Migdal 近似で無視されるバーテックス補正や非調和フォノンの効果など様々な要因が考えられるが、SCDFT における電子質量繰り込みの取り扱いが自己無撞着になっていないなど、定式化の上での問題点も知られている。一方、SCDFT と同様に第一原理的に超伝導転移温度を予測できる計算手法として知られている第一原理 Migdal-Eliashberg 理論は、電子質量繰り込みに対してより正確な取り扱いが可能であるものの、低温での計算コストが膨大になることから、高圧下水素化物超伝導のような例外的な場合を除いて適用することが難しかった。本研究課題では、このような効果が低温超伝導の転移温度に対して与える影響を調べることを目的として、第一原理 Migdal-Eliashberg 理論の拡張を行う。

4. 研究成果

研究の方法(1)、(2)で述べたそれぞれの問題に対する研究成果について記述する。

(1) SCDFT を用いた非従来型超伝導の第一原理計算

研究の方法(1)で述べたようにスピン軌道相互作用と奇パリティ超伝導計算の SCDFT への実装を行い、開発した手法を用いてトポロジカル超伝導の候補物質である $Sn_{1-x}In_xTe$ と $Cu_xBi_2Se_3$ の計算を行った[1]。NaCl 構造を持つ $Sn_{1-x}In_xTe$ は、 $x=0$ においてはトポロジカル結晶絶縁体として知られているが、In ドーピングによってゼロバイアスコンダクタンスピークが観測され、マヨラナゼロモードを有するトポロジカル超伝導の候補物質と考えられている。また、 $Cu_xBi_2Se_3$ はトポロジカル絶縁体 Bi_2Se_3 に Cu をインターカレートした系であるが、この系ではゼロバイアスピー

クだけでなく、超伝導転移に伴う回転対称性の低下も指摘されており、非従来型超伝導の実現が示唆されている。しかしながら、これらの系ではマヨラナゼロモードの存在と矛盾する実験事実も存在するなど議論が続いており、また理論の面においてもスピン軌道相互作用の導入や奇パリティ超伝導計算が必須であるため、第一原理的な超伝導計算は行われていなかった。

$\text{Sn}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ において、偶パリティおよび奇パリティ対称性を仮定して計算した超伝導ギャップを図 1(a), (b) に示す。それぞれの超伝導ギャップに対応する転移温度を求めたところ、奇パリティ超伝導は偶パリティ超伝導に比べ非常に不安定で、少なくとも電子格子相互作用を媒介とするトポロジカル超伝導の発現は現実的でないことが示された。また、転移温度の Ir 濃度依存性も、スピン軌道相互作用をきちんと考慮することで、偶パリティ超伝導でも実験的な転移温度を定量的に再現することが可能であり(図 1(c))、このことから $\text{Sn}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ におけるトポロジカル超伝導の発現は本質的なものではないことが示唆された。一方、 $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ については、我々の手法で奇パリティ超伝導解を得ることができなかったが、偶パリティ解で Cu ドープ依存性を説明することもできなかった。このことから、 $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ においては電子格子相互作用や SCDFT の枠組みを超えた非従来型超伝導が実現している可能性がある。

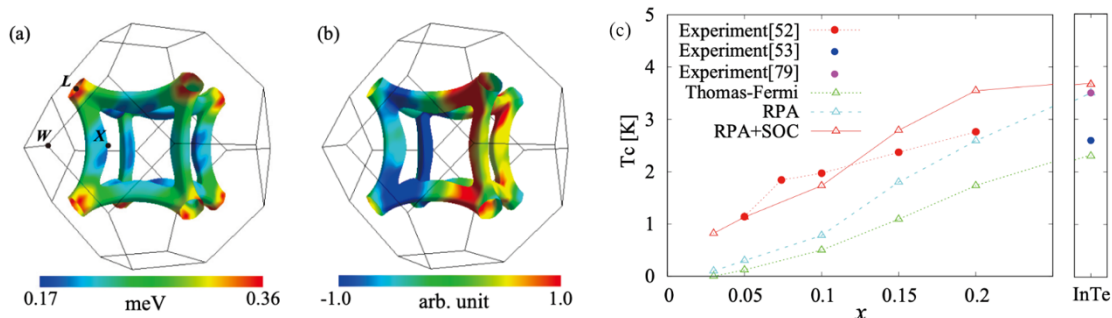


図 1 $\text{Sn}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{Te}$ の偶パリティ超伝導ギャップ(a)および奇パリティ超伝導ギャップ(b)。(c) 偶パリティ超伝導転移温度の Ir 濃度依存性。丸点は実験値を表す。[1]から転載。

(2) 既存の SCDFT で説明できない従来型超伝導体の理解

第一原理 Migdal-Eliashberg 理論の低温計算の困難は、計算において必要な松原周波数の数 N_M が膨大となる点に起因する。これを克服するため、近年開発された温度グリーン関数の中間表現基底+スパースサンプリングの方法を用いて計算コストの改善を行い、ベンチマークとして高圧下 LaH_{10} と従来計算が困難であった bcc-Nb に適用した。

第一原理 Migdal-Eliashberg 理論の線形化ギャップ方程式の固有値 λ を bcc-Nb および高圧下 (250GPa) LaH_{10} に対して計算した例を図 2(a), (b) に示す。図 2(a) は従来の手法を用いたものであるが、高温で計算している LaH_{10} では $N_M=512$ でだいたいの収束しているものの、 Nb の計算で $N_M=4096$ でもまだ収束しているか判断できない。これに対して、図 2(b) に示す中間表現基底+スパースサンプリングの方法だと、 $\Lambda=10^4$ (基底数 $L=138$) ですでに完全に収束した値が得られており、30 倍程度メモリが節約され、20 倍程度の計算速度が改善された。実際に bcc-Nb の転移温度を計算したところ(図 2(c))、実験値 9.3K に対して計算値 11.4K が得られたが、これは第一原理 Migdal-Eliashberg 理論で低温超伝導体の転移温度計算に成功した最初の例である。

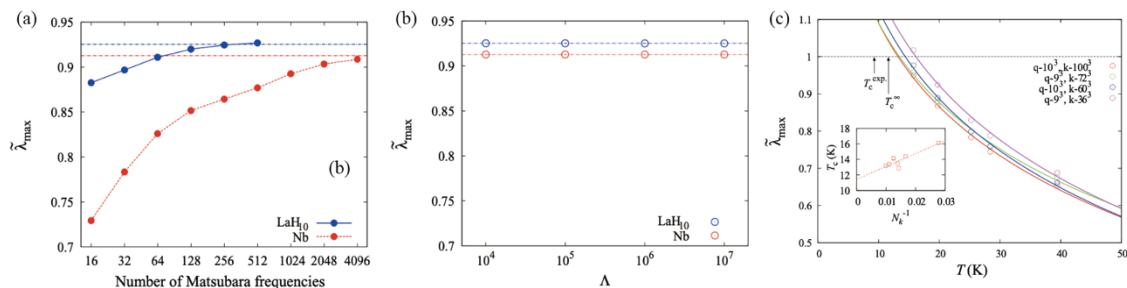


図 2 (a) (b) Nb および LaH_{10} に対する線形化ギャップ方程式の固有値 λ の基底数依存性。(c) Nb の固有値 λ の温度依存性。[2]より転載。

<引用文献>

- [1] T. Nomoto, M. Kawamura, T. Koretsune, R. Arita, T. Machida, T. Hanaguri, M. Kriener, Y. Taguchi, and Y. Tokura, Phys. Rev. B **101**, 014505 (2020).
- [2] T. Wang, T. Nomoto, Y. Nomura, H. Shinaoka, J. Otsuki, T. Koretsune, and R. Arita, Phys. Rev. B **102**, 134503 (2020).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Nomoto T., Kawamura M., Koretsune T., Arita R., Machida T., Hanaguri T., Kriener M., Taguchi Y., Tokura Y.	4. 巻 101
2. 論文標題 Microscopic characterization of the superconducting gap function in Sn _{1-x} In _x Te	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 14505
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.101.014505	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 Wang Tianchun, Nomoto Takuya, Nomura Yusuke, Shinaoka Hiroshi, Otsuki Junya, Koretsune Takashi, Arita Ryotaro	4. 巻 102
2. 論文標題 Efficient ab initio Migdal-Eliashberg calculation considering the retardation effect in phonon-mediated superconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 134503
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.102.134503	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 Uchida Masaki, Nomoto Takuya, Musashi Maki, Arita Ryotaro, Kawasaki Masashi	4. 巻 125
2. 論文標題 Superconductivity in Uniquely Strained RuO ₂ Films	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 147001
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevLett.125.147001	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1件（うち招待講演 1件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 野本拓也
2. 発表標題 第一原理 Migdal-Eliashberg 理論と遅延効果
3. 学会等名 京都大学基礎物理学研究所研究会 「高温超伝導・非従来型超伝導研究の最前線：多様性と普遍性」（招待講演）
4. 発表年 2020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
--	---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------