

称号及び氏名 博士（工学） 丹羽 祐平

学位授与の日付 平成 25 年 3 月 31 日

論文名 複数成分のオーダーパラメータを持つナノサイズ超伝導体  
における渦糸周りの準粒子構造

論文審査委員 主査 教授 魚住 孝幸  
副査 教授 岩住 俊明  
教授 大同 寛明  
教授 石田 武和  
准教授 加藤 勝

## 論文要旨

銅酸化物超伝導体等の従来のフォノンを介した相互作用では説明できない物質が発見されている。そうした物質においてメカニズムは未だ確立されていない。その為、その超伝導特有の現象の基礎研究がなされている。特に量子磁束内部のような閉じ込められた系での準粒子構造は、超伝導の対称性を反映する点で重要である。そして、銅酸化物超伝導体では、準粒子構造が従来の超伝導体中のものとは異なっている。その後、多成分のオーダーパラメータを持つ超伝導体が発見されており、オーダーパラメータが多成分である故の現象が予測されている。そういった理論から予測される新たな現象の観測は、超伝導のメカニズムを解明するのに役立つと考えられる。

更に、ナノサイズ超伝導体が注目を集めている。なぜなら、ナノサイズで臨界温度の上昇やデバイスへの応用が理論と実験から示唆されているからである。ナノサイズでは電子が閉じ込められる為に、系の形状の対称性の影響によって、ナノサイズ特有の物性が現れる事が期待される。このようなナノサイズ超伝導体における研究の一つとして磁束構造についての研究がある。バルクでは単一量子磁束がAbrikosov三角格子を作るが、ナノサイズでは形状に依存して磁束構造が変化する事が理論と実験により明らかになってきている。

本研究の主題は、複数成分のオーダーパラメータを持つ超伝導体で起こりうる現象を微視的な理論から予言し、実験でその現象を発見できる為の特徴を見つける事である。本研究の第一の対象は、**Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>**を例とするスピン三重項超伝導体である。そこでは、スピン自由度がある為、オーダーパラメータは三成分を持つ。このスピン三重項超伝導体で起こる現象の中で、特に半整数量子磁束について整数量子磁束と比較し、半整数量子磁束を実験で発見できるようにする事が、第一の目的である。第二の対象は、**MgB<sub>2</sub>**を例とする電子バンドとホールバンドからなる2バンド超伝導体であ

る。この  $\text{MgB}_2$  は、二成分のオーダーパラメータを持つ。その為、特異な渦糸間相互作用が期待され、第 1.5 種超伝導体と呼ばれている。ナノサイズに加工した場合、この第 1.5 種超伝導で起こりうる現象を調べる事が第二の目的である。本論文は以上の研究の結果をまとめたものである。

本論文は、全 10 章で第 I 部、第 II 部、第 III 部に分けて構成されており、第 I 部では超伝導の導入を行い、第 II 部ではトリプレット超伝導体についての研究をまとめ、第 III 部では第 1.5 種超伝導体についての研究をまとめた。以下に章ごとの概要を示す。

第 I 部第 1 章では、超伝導の基本的性質に関して GL 理論と微視的な理論、BCS 理論を説明した。渦糸の周りの準粒子構造を求める Bogoliubov-de Gennes 方程式を紹介し、更にその準粒子構造を観測する実験方法として走査型トンネル分光の方法を紹介した。そして、超伝導において準粒子構造が渦糸との関連や実験でどのように観測されているのかを述べ、本研究の導入を行った。

第 II 部第 2 章では、スピン自由度を持つトリプレット超伝導体においてはオーダーパラメータがスピンの方向を表す  $\mathbf{d}$ -vector を持つ事を説明し、その為オーダーパラメータの位相が半回転になるような磁束、すなわち半整数量子磁束が可能になる事を示した。この時、半整数量子磁束は必ず対で現れる。なぜなら、一本の半整数量子磁束が存在する場合、その周りでは  $\mathbf{d}$ -vector が無限遠方で回転する事になり、エネルギーが高くなる為である。例として  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  についてトリプレット超伝導体であるという実験事実をのべ、更に半整数量子磁束を示唆する実験を紹介した。このようなトリプレット超伝導体における一对の半整数量子磁束の特徴を微視的な計算から導くという第一の研究目的を示した。

第 3 章では、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  が持つ対称性として考えられているカイラル  $\mathbf{p}(p_x \pm ip_y)$ -波超伝導体において一本の半整数量子磁束を考えた。その周りの準粒子構造を求める為の円柱座標における Bogoliubov-de Gennes 方程式を導出し、Fourier-Bessel 級数展開を用いた数値計算方法を導いた。

第 4 章では、第 5 章で考える一对の磁束がある時、二つの位相特異点が現れる為、その周りの準粒子構造の計算に楕円座標を導入し、運動エネルギーだけの Schrödinger 方程式を導き、その固有解を(変形) Mathieu 関数によって展開する数値計算方法を説明した。

第 5 章では、一对の整数量子磁束、または一对の半整数量子磁束を考えた。一对の整数量子磁束周りの Bogoliubov-de Gennes 方程式を  $s$ -波、カイラル  $\mathbf{p}(p_x \pm ip_y)$ -波に対して楕円座標に変換した。そして、二つの磁束中心が楕円座標における焦点にあるとして、一对の整数量子磁束のオーダーパラメータの構造を仮定し、(変形) Mathieu 関数展開による数値計算方法を導いた。更に、カイラル  $\mathbf{p}(p_x \pm ip_y)$ -波超伝導体中の一对の半整数量子磁束に対して、その周りのオーダーパラメータの構造を仮定し、Bogoliubov-de Gennes 方程式を導いて、(変形) Mathieu 関数展開による数値計算方法を導いた。

第 6 章では、第 3 章で導出した Bogoliubov-de Gennes 方程式から一本の整数量子磁束、半整数量子磁束周りの局所状態密度を比較した。パラメータとして、コヒーレンス長  $\xi$  でスケールリングして、半径  $r/\xi=6.0$ 、フェルミ波数  $k_F \cdot \xi=3.0$ 、ギャップエネルギー  $\Delta/E_c=0.2$ 、 $k_B T/E_c=0.01$  として計算を行った。ここで  $k_B$  はボルツマン定数、 $T$  は温度、 $E_c$  はカットオフエネルギーである。その結果、半整数量子磁束は整数量子磁束と比べて局所状態密度のピークが半分程度になるという定量的な違いを発見できた。これは、スピン↑かスピン↓のどちらかの準粒子のみが磁束を作るためであ

る。更に、第5章で導出した **Bogoliubov-de Gennes** 方程式から、**s**-波、カイラル  $p(p_x \pm ip_y)$ -波超伝導体中の一对の整数量子磁束とカイラル  $p(p_x \pm ip_y)$ -波超伝導体中の一对の半整数量子磁束周りの局所状態密度を示し、それらを比較した。パラメータとして、コヒーレンス長  $\xi$  でスケーリングして、磁束間の距離  $2\hbar v_F/\xi=2.0$ 、長軸半径  $r/\xi=4.0$ 、フェルミ波数  $k_F x=3.0$ 、ギャップエネルギー  $\Delta/E_c=0.2$ 、 $k_B T/E_c=0.01$  として計算を行った。その結果、**s**-波、カイラル  $p(p_x \pm ip_y)$ -波では整数量子磁束間で局所状態密度の小さなピークがみられた。これは、それぞれの磁束に置ける束縛状態同士の干渉の結果である。しかし、半整数量子磁束間では状態密度のピークは整数量子磁束の場合に比べて小さい。これは束縛状態同士の干渉がなく、互いに独立に束縛状態を作るからである。この時、一方の半整数量子磁束でスピン↑の準粒子のみが束縛状態を作り、もう一方の半整数量子磁束でスピン↓の準粒子のみが束縛状態を作る。その為、スピンを持った準粒子の分布が偏って、磁化も半整数量子磁束の特徴として現れると考え、磁化分布の数値計算を行った。パラメータとしてフェルミ波数  $k_F \xi=2.0$  から  $4.0$  まで、磁束間の距離  $2\hbar v_F/x=1.2, 1.6, 2.0, 2.4$  について計算を行った。その結果、アップまたはダウンスピンが作る束縛状態の位置に、逆向きのスピンの準粒子密度が高くなる事が分かった。これは  $k_F x$  が有限なので、束縛状態が離散的で少なくなり、半整数量子磁束における超伝導電子の欠如を補償できなかった為である。更に、 $k_F x$  が大きくなっても磁化分布は単調にはピークが減少せず、振動しただしたので、磁化の振る舞いの詳細を知る為に  $x$  軸に沿った磁気モーメントの計算も行った。その結果、 $k_F x$  が増えると磁気モーメントは振動しながら増加した。これらの結果が **STS** 実験や磁化分布の測定で観測されると結論を出した。

第Ⅲ部第7章では、ナノサイズ超伝導体では電子が閉じ込められる為に、新奇な現象が起こる事が理論的に予測されている事を紹介した。更に、超伝導体 **MgB<sub>2</sub>** について、その発見と、電子バンド ( $\pi$ バンド) とホールバンド ( $\sigma$ バンド) からなる2バンド超伝導体である事、更に第1.5種超伝導体という提案がされた実験を紹介した。この第1.5種超伝導体をナノサイズに加工した時の新奇な現象を微視的に研究するという第二の研究目的を示した。

第8章では、電子バンドとホールバンドからなる2バンド超伝導体について、バンド間の相互作用が超伝導に寄与する事も考慮に入れた **Bogoliubov-de Gennes** 方程式とセルフコンシステント方程式を導いた。そして、有限要素法を用いて **Bogoliubov-de Gennes** 方程式、ギャップ方程式、**Maxwell** 方程式をセルフコンシステントに解く数値計算方法を示した。

第9章では、第8章で求めた数値計算方法をナノサイズの第1.5種超伝導体に適用し、磁場下での安定な超伝導状態におけるオーダーパラメータ、ベクトルポテンシャル、準粒子波動関数をセルフコンシステントに求めた。パラメータとして、系の一辺の長さ  $L/x_s = L/x_p = 5.0$ 、**GL** パラメータ  $\kappa_\sigma=3.0$ 、 $\kappa_\pi=0.7$ 、フェルミ波数  $k_{Fs}x = k_{Fp}x = 3.0$ 、質量比  $m_s/m_p = 1.0$ 、バンド下端エネルギー  $E_B/E_c=0.4$ 、ギャップエネルギー  $\Delta_s/E_c=0.2$ 、 $\Delta_p/E_c=0.1$ 、相互作用定数、 $g_s = 0.0066$ 、 $g_p = 0.002$ 、 $g_{sp}^e = 0.002$ 、 $g_{sp}^d = 0.0$  とした。ここで添字の  $\sigma$  と  $\pi$  はそれぞれホールバンドと電子バンドを示している。計算結果では、磁場  $H/(\Phi/L^2) = 8.0, 10.0$  をかけると量子磁束は境界と結合しようとする結果がみられた。これは  $\pi$ バンドが第1種超伝導で境界エネルギーが正の為、境界面積が小さい方が低いエネルギーを取れるからである。ここで  $\Phi = hc/2e$  である。更に、 $\pi$ バンドが持つ波数  $\mathbf{K}$  に対する依存性も  $\mathbf{K} = (0.1p, 0), (0.2p, 0), (0.1p, 0.1p)$  について調べた結果、 $\mathbf{K} = (0.1p, 0), (0.2p, 0)$  で  $x$  方向に、 $\mathbf{K} = (0.1p, 0.1p)$  で対角線方向にオーダーパラメータは振動し、 $\mathbf{K}$  が大きくなればより細かい

振動がみられた。これは電子が閉じ込められて定在波を作る為に、波数  $\mathbf{K}$  の大きさや方向に依存して振動しているという事である。これらの結果が第 1.5 種超伝導で観測される事が期待できる。

第 10 章では、本研究で得られた結果の総括を行った。

## 審査結果の要旨

銅酸化物高温超伝導体の発見以来、多数の超伝導物質が探索・発見され、工学的応用ならびに基礎物質科学の観点から盛んに研究されている。本論文はそれら新奇超伝導体のうち、スピン自由度を持つ  $p$  波超伝導体  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  ならびに 2 バンド超伝導体  $\text{MgB}_2$  を対象とする。超伝導状態は電子のクーパー対の巨視的波動関数である秩序変数で特徴付けられるが、従来型の超伝導体が 1 成分の秩序変数を持つのに対し、本論文で対象とするこれらの物質は複数成分の秩序変数を持つことから、新奇な現象が期待されている。本論文は、そのような新奇超伝導体の性質を微視的理論によって明らかにしようとするものであり、以下の成果を得ている。

(1) トリプレット超伝導体のうち、 $p$  波超伝導体においては、現象論的理論から半整数磁束の出現が予想されており、実験的にもナノサイズに加工したリング内の量子磁束の半分の磁化変化が観測され、その存在が注目されている。本論文では、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  を対象に、微視的理論を用いて電子構造を解析、半整数磁束を実験的に直接観測する方法を提案した。その際、半整数量子磁束が必ず対になって現れることから、楕円座標とマッシュレー関数を用いる理論計算手法を新たに開発した。その結果、半整数量子磁束中に束縛された電子状態密度が整数量子磁束と比べて半分になること、また、1 対の半整数量子磁束のまわりに磁化構造が現れることを示した。

(2) 最近発見された多バンド超伝導体  $\text{MgB}_2$  は、タイプ I、タイプ II の超伝導体の中間の性質を示すことが理論的に予測され、また実験的にも間接的に観測され、注目を集めている。本論文では、このタイプ 1.5 と呼ばれる超伝導体をナノサイズに加工した場合に現れる性質を微視的理論に基づいて明らかにした。このとき、電子バンドとホールバンドを露に取り入れる理論枠組みを新たに構築した。その結果、超伝導状態に振動構造が現れること、また磁束が境界に束縛されることを示した。

以上の諸成果は、複数成分の秩序変数を持つ超伝導体の性質に関する重要な知見を与えるとともに、今後の超伝導体中の磁束線物理の基礎研究や、それを用いた応用研究に大きく貢献するものである。また、申請者が自立して研究活動を行うのに必要な能力と学識を有することを証したものである。学位論文審査委員会は、本論文の審査の結果から、博士（工学）の学位を授与することを適当と認める。