

主論文の要約

論文題目 空間反転対称性の破れとスピン軌道相互作用のある 2次元電子系における異軌道間トポロジカル超伝導に関する理論研究
(Theory of interorbital topological superconductivity in spin-orbit coupled two-dimensional electron system with inversion symmetry breaking)

氏名 深谷 優梨

論文内容の要約

本研究では、空間反転対称性の破れたスピン軌道相互作用のある複数の軌道を有する 2次元電子系において、異軌道間トポロジカル超伝導に関する以下の理論研究をまとめる。

第 1 章では、本研究における序論として本研究の全体の流れを述べる。

第 2 章では、全体のイントロダクションとして初めにスピン軌道相互作用について述べる。特に、空間反転対称性の破れたスピン軌道相互作用のある系では Rashba 型スピン軌道相互作用[1]のような反対称スピン軌道相互作用が働く。次に BCS 理論と異方的超伝導に関する基礎的な理論を紹介し、その応用となる Josephson 接合を含む超伝導の接合系について記述する。この時、超伝導ペア対称性が Cooper 対の持つ自由度によって様々な対称性をもちうることを示し、超伝導接合系において Andreev 反射と呼ばれる特殊な粒子の反射が起こり、その干渉効果によって(表面)Andreev 束縛状態が現れ得ることを紹介する。更に、物性物理学におけるトポロジーの概念とトポロジカル超伝導、スキルミオンのようなスピンのトポロジカルな構造について述べる。本研究では、主に超伝導体にノードがある場合にその超伝導状態がトポロジカル超伝導とみなすことができる場合に着目し、カイラル対称性からノードの周りでトポロジカル不変量である巻き付き数を定義できることを示す[2,3,4]。最後に、本研究で対象としている空間反転対称性の破れたスピン軌道相互作用のある 2次元電子系について紹介する。ここでは、遷移金属由来の t_{2g} 軌道と空間反転対称性の

破れたスピン軌道相互作用のある 2 次元系として、 $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ のような 2 つの酸化物接合界面に 2 次元電子ガスが現れる系について述べる。酸化物界面系では 2007 年に $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ が超伝導となることが発見された[5]。また、この系の持つ電子状態の特徴を紹介し、本研究で用いる常伝導状態のハミルトニアンと異軌道間 Cooper 対の分類について示す。

第 3 章では、空間反転対称性の破れたスピン軌道相互作用のある 2 次元系において、異軌道間 Cooper 対のみが形成される場合に超伝導転移温度近傍でギャップ方程式を解き、どのような超伝導ペア対称性が実現するか調べる[6]。本研究では、同一サイト上でのみ電子対を形成すると仮定する。その実現する超伝導ペア対称性がトポロジカル超伝導とまっているかどうか明らかにする。超伝導転移温度近傍において、軌道の自由度を考慮した線形化 Eliashberg 方程式に弱結合近似と平均場近似を与えることで、軌道の自由度を持つギャップ方程式を得ることができる。このギャップ方程式を異軌道間引力相互作用のみがあると仮定して解くと、フルギャップ構造を示す超伝導ペア対称性と Brillouin 域内の対角方向にノード点が現れる超伝導ペア対称性が安定化しうることが判明した。特に後者のノード点がある場合において、バルクではトポロジカル不変量である巻き付き数がノード点の周りで有限となり、この超伝導ペア対称性がトポロジカル超伝導とまっていることが明らかになった。更に超伝導体の(110)方向に表面を作ると、ノード点の持つ巻き付き数によってゼロエネルギーにフラットバンドとなる表面 Andreev 束縛状態が現れる。その結果、トポロジカル超伝導の特徴である表面状態密度のゼロエネルギーにピークが生じる。この表面状態密度のゼロエネルギーピークは、超伝導ギャップの大きさの増大(=温度の低下)によって互いに逆の符号の巻き付き数を持つ 2 つのノード点対消滅し、多軌道の効果によってトポロジカル Lifshitz 転移が生じ、超伝導のギャップ構造がフルギャップ構造へ転移することで、消失する場合がある。

第 4 章では、ノード点のある 2 次元超伝導体においてスピン及び軌道がノード点の周りで非自明な構造を持ち得るかどうか調べる[7]。この時、スピン及び軌道分極はスピン及び軌道演算子の期待値から求める。初めに、1 軌道模型においてノード点の周りで非自明な構造がどのように出現するか摂動法を用いて解析的及び数値的に求める。解析計算から、常伝導状態における反対称スピン軌道相互作用を記述する \mathbf{g} ベクトルとスピン 3 重項超伝導状態を記述する \mathbf{d} ベクトル間の相対的な角度が Brillouin 域内で連続的に変化する、即ち \mathbf{g} ベクトルと \mathbf{d} ベクトルが Γ 点周りで巻く向きが異なることで、ノード点の周りでスピンが巻く構造が現れ、ノード点の周りでスピン巻き付き数を定義できる。数値計算においても、解析計算と同様にノード点の周りでスピン巻き付きが現れる。応用として 3 軌道模型において異軌道間トポロジカル超伝導実現する場合にノード点の周りでスピン及び軌道の構造を調べる。異軌道間トポロジカル超伝導状態では軌道に関しては 1 重項となっているため、軌道は非自明な構造を持たない。一方で、スピンに関しては 3 重項となっているためノード点の周りでスピンの巻き付きが現れるが、すべてのノード点で現れなかった。しか

し、スピン巻き付き数は保存されるため、化学ポテンシャルの変化のような超伝導ギャップ構造が変化しなくてもスピン巻き付き数はノード点や対称点のような特異点間を移動することができる。

第 5 章では、空間反転対称性の破れた系における Josephson 接合を考え、この接合を流れる Josephson 電流の電流・位相特性や温度依存性を計算する。多軌道系を取り扱うことで解析的に Josephson 電流を導出することは困難であるため、本研究ではリカーシブグリーン関数法を用いて Josephson 電流を数値的に導出する。考える Josephson 接合は 3 軌道超伝導体/絶縁体/1 軌道 s 波超伝導体 Josephson 接合と、3 軌道系/絶縁体/3 軌道系 Josephson 接合であり、方向については(100)方向を考える。ここでは初めに、フーリエ変換を施したハミルトニアンを示す。このハミルトニアンを用いてリカーシブグリーン関数法から Josephson 電流の電流・位相特性を計算する。(100)方向における 3 軌道系/絶縁体/1 軌道 s 波超伝導体接合では、3 軌道模型において異軌道間トポロジカル超伝導が実現する場合に、3 軌道模型側の Fermi 準位における最も大きい状態密度を持つ t_{2g} 軌道によって、得られる電流・位相特性が変化する。また、異軌道間トポロジカル超伝導による表面 Andreev 束縛状態によって、表面状態密度が顕著にみられる低温では電流・位相特性の $\sin 2\phi$ の項が増大することを示す。異軌道間トポロジカル超伝導が実現する場合の最大 Josephson 電流の温度依存性は、(100)方向ではゼロエネルギーにおける表面 Andreev 束縛状態の有無と接合界面での遷移の大きさによって、低温での Josephson 電流の振る舞いが異なる。ゼロエネルギーに表面 Andreev 状態があれば、低温で最大 Josephson 電流は増大する。加えて、状態密度の最も大きい軌道と界面での遷移の大きさの違いによって、Josephson 電流の低温における電流・位相特性が異なる。 t_{2g} 軌道の d_{xy} 軌道が支配的となる場合には Josephson 電流は 0 接合となるが、化学ポテンシャルの増大によって d_{yz} 軌道の寄与が増大すると、Josephson 電流の $\sin\phi$ の項の係数の符号が変わることで Josephson 電流の電流・位相特性は π 接合となる。即ち、ゲート電圧をかけることで、Josephson 電流の振る舞いが変化するとと言える。更に、転移温度が高くなるとトポロジカル Lifshitz 転移が生じる状況を考えることができる。その時、最大 Josephson 電流はトポロジカル Lifshitz 転移よるフルギャップ構造へ転移によって温度に対する振る舞いが劇的に変化する。次に、3 軌道系/絶縁体/3 軌道系 Josephson 接合において両方の超伝導体で異軌道間トポロジカル超伝導が実現すると考える。最大 Josephson 電流の温度依存性は表面 Andreev 束縛状態によって大きく異なる。異軌道間トポロジカル超伝導によるゼロエネルギー表面 Andreev 束縛状態が存在することで、最大 Josephson 電流は低温で増大する。特に、ゼロエネルギーにフラットバンドとなる表面 Andreev 束縛状態が存在する場合、界面の透過率が低くなると最大 Josephson 電流は低温で急激に増大する。また、超伝導体のフェルミ面の違いによって、最大 Josephson 電流の振る舞いは劇的に変化する。この章の最後に、これらの計算結果を用いて最近の $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ 同士の Josephson 接合の実験[8]における最大 Josephson 電流の温度依存性の異常な振る舞いを説明することができるか試みる。

最終章では、本博士論文のまとめと今後の課題を提示する。本研究では、酸化物界面系のような空間反転対称性の破れと強いスピン軌道相互作用のある 2 次元超伝導体に対するトポロジカル超伝導及びスピン・軌道のトポロジカルな構造というトポロジカルな電子状態の可能性、トポロジカル超伝導により引き起こされる特異な Josephson 電流は多軌道の効果によって生じていることを提案する。酸化物界面系 $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ では、どのような超伝導状態が発現しているかは現在までによくわかっていない。しかし、最近の実験で、通常の s 波超伝導では説明できないような異方的な超伝導状態を示唆する結果が報告された[8,9]。よって、空間反転対称性の破れと強いスピン軌道相互作用のある 2 次元においてトポロジカルな超伝導状態が実現している場合にどのような現象が見られるか調べることは意義がある。また、本研究によって $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ 以外の酸化物界面系及び空間反転対称性の破れとスピン軌道相互作用のある 2 次元に対して、軌道の自由度に由来した新奇量子現象の予言が可能となる。加えて、超伝導ペア対称性の視点においては本研究によって異軌道間 Cooper 対の性質を明らかにすることができるので、異軌道間ペアという多軌道の自由度によって生じる超伝導に対して理解が深まり関連研究が発展することが期待できる。

参考文献

- [1] E. I. Rashba, *Sov. Phys. Solid States* **2**, 1109 (1960).
- [2] K. Yada, M. Sato, Y. Tanaka, and T. Yokoyama, *Phys. Rev. B* **83**, 064505 (2011).
- [3] M. Sato, Y. Tanaka, K. Yada, and T. Yokoyama, *Phys. Rev. B* **83**, 224511 (2011).
- [4] P. M. R. Brydon, A. P. Schnyder, and C. Timm, *Phys. Rev. B*, **84**, 020501 (2011).
- [5] N. Reyren, et al., *Science*, **317**, 1196 (2007).
- [6] Y. Fukaya, S. Tamura, K. Yada, Y. Tanaka, P. Gentile, and M. Cuoco, *Phys. Rev. B* **97**, 174522 (2018).
- [7] Y. Fukaya, S. Tamura, K. Yada, Y. Tanaka, P. Gentile, and M. Cuoco, *Phys. Rev. B*, **100**, 104524 (2019).
- [8] D. Stornaiuolo, D. Massarotti, R. Di Capua, P. Lucignano, G. P. Pepe, M. Salluzzo, and F. Tafuri, *Phys. Rev. B* **95**, 140502(R) (2017).
- [9] L. Kuerten, C. Richter, N. Mohanta, T. Kopp, A. Kampf, J. Mannhart, and H. Boschker, *Phys. Rev. B* **96**, 014513 (2017).