Ginzburg-Landau 理論に基づいた数値シミュレーションによる超伝導の磁場依存性の研究

兼安 洋乃、大塚 剛生、春名 信吾

兵庫県立大学 大学院理学研究科

1. 磁場中の chiral 安定性と常磁性 chiral 電流

超伝導では 2 電子が対を組んでおり、電子対のスピンと軌道の状態が超伝導の特性を決めている。スピン状態は、平行と反平行のスピン一重項と三重項があり、軌道の状態との組み合わせも様々である。その中でも、電子対の軌道角運動量がゼロでなく、内部磁化を持つ状態を chiral 状態といい、chiral な d 波や p 波の状態などがある。（図 1）chiral 状態の内部磁化が外部磁場と常磁性結合すると、chiral 安定化やそれに伴う chiral 電流を生じることが理論から示されている。（図 2）[1,2] この様な磁場誘起 chiral 現象は、特に超伝導が不均一である場合に顕著となる。そのため、磁場誘起 chiral 現象の特徴を理論的に調べて、実験事実と比較した考察を行うことは、chiral 超伝導を探る手掛かりとなる。[3]

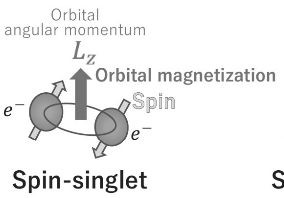

図 1 : 超伝導電子対と chiral 状態

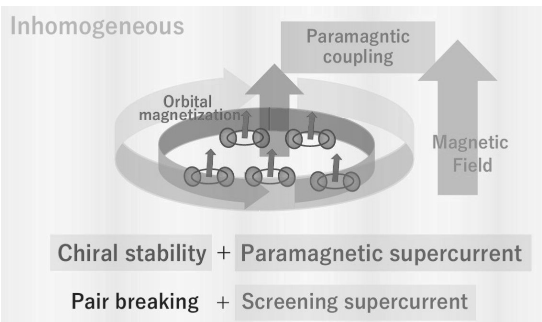

図 2 : 磁場中の chiral 安定性と常磁性 chiral 電流

本研究では不均一系の磁場誘起 chiral 現象について、Ginzburg-Landau 理論に基づいた研究を行った。[3] ２成分の超伝導秩序変数で表された chiral 状態の Ginzburg-Landau 方程式を大阪大学サイバーメディアセンターの SQUID を用いて数値的に解き、磁場中の秩序変数成分と超伝導電流の解析を行った。[4]

2. chiral 状態の秩序変数と不均一超伝導

磁場誘起 chiral 現象の候補となる不均一な超伝導状態として、自発磁化が μSR 測定などから報告されている超伝導体 Sr_2RuO_4 の共晶系が挙げられる。

[5,6] 共晶で、析出した金属 Ru と母物質 Sr_2RuO_4 の接合モデルを考える。（図 3）[6] Sr_2RuO_4 の結晶構造は D_{4h} 対称性であり、群論で許される既約 E_g と E_u の chiral 状態を考える。この chiral 状態の超伝導秩序変数は２成分で表現され、その成分を超伝導 / 金属 - 接合境界に垂直な成分 η_p と平行成分 η_t とする。[4,6]

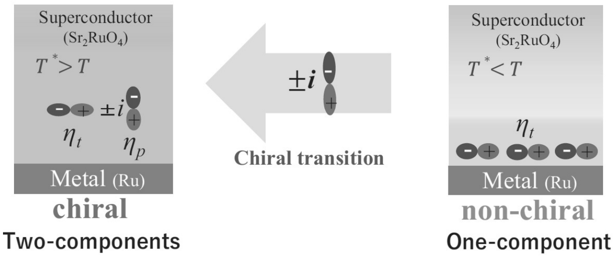

図 3 : 秩序変数における chiral 状態と chiral 転移

図 3 の RuO_2 面上の接合モデルの左図は、その 2 成分秩序変数の chiral 状態を示している。超伝導の不均一性として、超伝導体端からの距離 x において、接合面近くで臨界温度が高くなる不均一な超伝導臨界温度を設定している。ゼロ磁場では、不均一超伝導の生じ始める高い温度で、一成分 η_t のみが生じて non-chiral 状態（図 3 右側）となるが、温度が下がると 2 成分目の η_p が生じて、2 成分状態の chiral 状態（図 3 左側）に転移する。[4,6]

このゼロ磁場での non-chiral 状態に、chiral 磁化軸に平行な磁場を印加する場合を設定して、磁場による 1 成分状態から 2 成分状態への chiral 転移、及び chiral 安定化を Ginzburg-Landau 方程式の数値計算で調べた。又、この chiral 安定化に伴う常磁性 chiral 電流の振る舞いを解析した。[3,4]

3. Ginzburg-Landau 方程式の数値解析

3.1 磁場中の chiral 安定性と超伝導秩序変数

方程式の数値解として得た超伝導秩序変数成分とベクトルポテンシャルから、chiral 転移、chiral 安定化とそれに伴う常磁性 chiral 電流の磁場・温度依存性を解析した。不均一系接合モデルとして、接合面近くで高い超伝導臨界温度のパラメータは、ゼロ磁場で超伝導のオンセット温度 T_{onset}=3K で接合面近くに non-chiral 状態が生じ、低温になると T*=2.3K で chiral 転移して、Tc,bulk=1.5K で均一バルクの超伝導転移温度と一致するように設定した。[3,4]

計算結果として、図 4 は超伝導秩序変数成分 (η_t, $i\eta_p$) の温度ごとの磁場依存性を示している。超伝導のオンセット温度 T_{onset}=3K で接合面近くに 1 成分 η_t のみの non-chiral 状態が生じ、温度が下がり T^*=2.3K になると、2 成分目の η_p が誘起して chiral 転移し、2 成分状態 $\eta_t+i\eta_p$ の chiral 状態となる。この温度により chiral 転移が起こる T^*=2.3K よりも高い温度にある non-chiral 状態（η_t のみの 1 成分状態）に対して、chiral 磁化軸に平行な磁場 H_z をかけると、第 2 成分の η_p が誘起されて 2 成分状態 $\eta_t+i\eta_p$ の chiral 状態に転移する。[4]

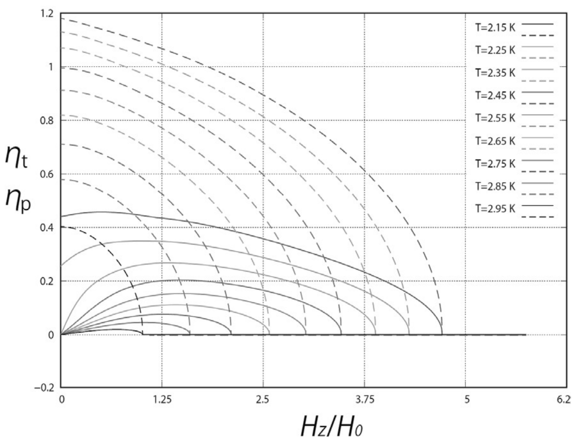

図 4 : 磁場による chiral 安定化の磁場・温度依存性

図 5 は、T=2.65 K>T^* の距離 x における超伝導秩序変数成分 (η_t, $i\eta_p$) の磁場依存性を示している。T^*=2.3K 以上の T=2.65 K では non-chiral 状態（η_t のみの 1 成分状態）となっている。この non-chiral 状態に chiral 磁化軸に平行な磁場 H_z をかけると、第 2 成分の η_p が誘起されて、2 成分状態 $\eta_t+i\eta_p$ の chiral 状態に転移する。この秩序変数の磁場依存性は、磁場による chiral 状態の安定化を示している。[4]

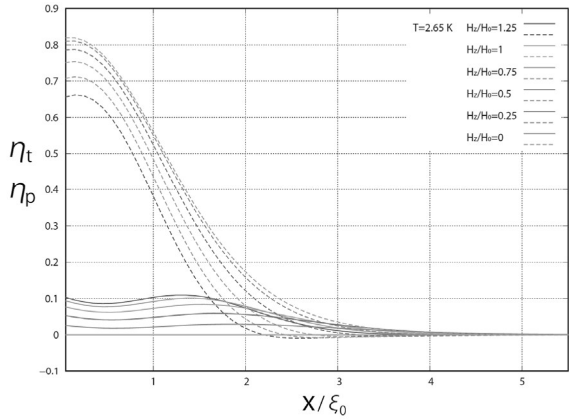

図 5：T=2.65 K >T^* における磁場誘起 chiral 転移に対応した秩序変数の第 2 成分 η_p の誘起

3.2 chiral 状態安定化による chiral 電流の誘起

図 6 は、数値解の超伝導秩序変数とベクトルポテンシャルを用いて計算した、T=2.65 K の距離 x における常磁性 chiral 電流 $J_{par,\,c}$ とスクリーニング電流 J_{scr} の磁場依存性である。ゼロ磁場では non-chiral 状態のために chiral 電流 $J_{par,\,c}$ は生じていないが、磁場が印加されると chiral 状態に転移して常磁性 chiral 電流 $J_{par,\,c}$ が誘起される。この常磁性 chiral 電流の誘起は、前述の図 5 における磁場による秩序変数第 2 成分 η_p の誘起の chiral 安定化と対応している。[4]

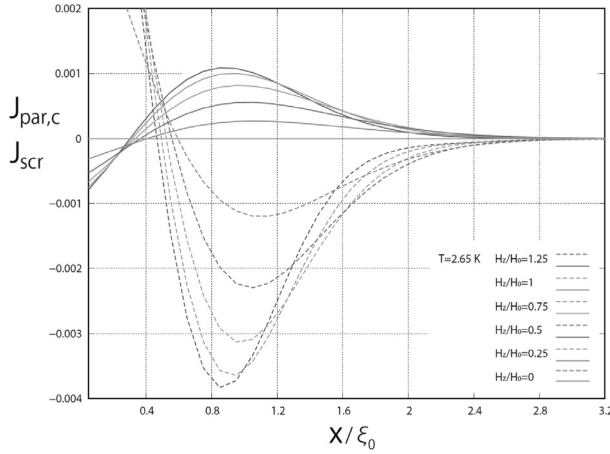

図 6：T=2.65 K >T^* における chiral 安定化による常磁性 chiral 電流の誘起

このように数値計算で示した磁場誘起 chiral 転移の振る舞いは、トンネルコンダクタンスの磁場依存性と定性的に整合しており、Sr_2RuO_4 共晶の低温バルク状態において chiral 状態が期待出来る。[3,4]

4. 不均一系における chiral 状態の磁場中の解析

4.1 Ginzburg–Landau 方程式による磁場中の chiral 安定化と超伝導電流の解析

超伝導秩序変数とベクトルポテンシャルに対する変分で導かれた Ginzburg-Landau 方程式を数値的に解き、数値解の超伝導秩序の２成分とベクトルポテンシャルを得る。又、超伝導電流が得られる。

Ginzburg-Landau 方程式は秩序変数による変分から、

$$a\eta_p + \frac{3}{4}b\eta_p^3 + \frac{1}{4}b\eta_t^2\eta_p - K_1\partial_x^2\eta_p + \gamma K_{3,4}\partial_x A_y\eta_t + \gamma A_y K_{3,4}\partial_x\eta_t + K_2\left(\gamma A_y\right)^2\eta_p = 0$$

$$a\eta_t + \frac{3}{4}b\eta_t^3 + \frac{1}{4}b\eta_p^2\eta_t - K_2\partial_x^2\eta_t - \gamma K_{3,4}\partial_x A_y\eta_p - \gamma A_y K_{3,4}\partial_x\eta_p + K_1\left(\gamma A_y\right)^2\eta_t = 0$$

が得られる。[3,4,6] 又、ベクトルポテンシャルによる変分から超伝導電流の式、

$$j_y(x) = 8\pi[-\gamma^2 A_y(K_1|\eta_t|^2 + K_2|\eta_p|^2) + \gamma K_{3,4}(\eta_t\partial_x\eta_p - \eta_p\partial_x\eta_t)]$$

が得られる。秩序変数成分とベクトルポテンシャルは x のみに依存している。z 軸方向の磁化 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ を導くベクトルポテンシャルは、$\boldsymbol{A}=(0,Ay(x),0)$ と設定した。又、$a(T,x)=a'(T-T_c(x))/T_{c,bulk}(x)$ で、超伝導臨界温度は境界面付近で高い $T_c(x)=T_c+T_0/\cosh(x/w)$ で設定される。係数比は $b=4a'/15$ と $K_1/3=K_2=K_3=K_4$ である。

超伝導電流は y 軸に沿って流れ､1 項目はスクリーニング電流、2 項目が常磁性 chiral 電流である。接合面の境界条件は秩序変数成分について、

$$K_1\partial_x\eta_p\big|_{x=0} = g_p\eta_p(0) + \gamma A_y(0)K_3\eta_t(0)$$

$$K_2\partial_x\eta_t|_{x=0} = -\gamma A_y(0)K_4\eta_p(0)$$

である。係数 g_p は接合面から金属側への超伝導の侵入の幅 $1/\sqrt{g_p}$ に関係する。ベクトルポテンシャルについての境界条件は、超伝導体端の外部磁場との連続性により設定される。[3,4,6]

この境界条件付き連立微分方程式の Ginzburg-Landau 方程式を、quasi-Newton 法に従って数値的に解き、自己無撞着に超伝導秩序成分とベクトルポテンシャルを数値解として得て、超伝導電流を計算する。この数値計算のフローチャートを図 7 に示している。[4]

このような常磁性結合による磁場誘起 chiral 現象の数値解析では、chiral 安定化と常磁性 chiral 電流に加えて、距離上の chiral 磁化反転の現象も同時に導かれる。（図 8）[3,4,8] 常磁性結合による自由エネルギー利得から導かれる chiral 安定化と常磁性 chiral 電流、chiral 磁化反転と、Ginzburg-Landau 方程式の数値解である秩序変数、ベクトルポテンシャルとの関係を図 8 に示している。[4]

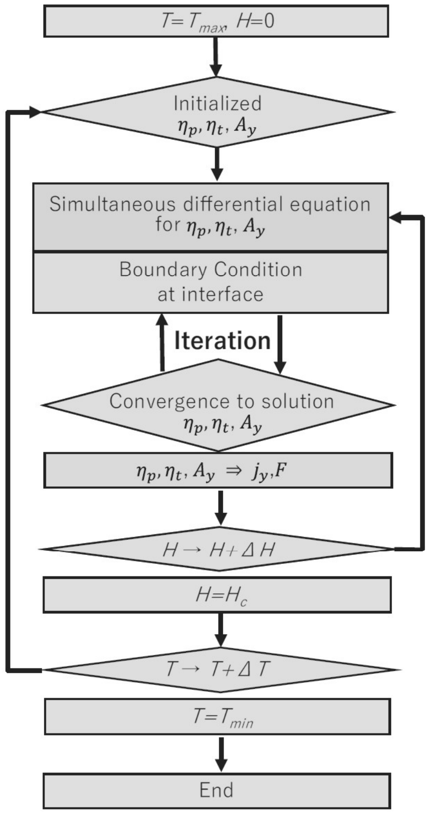

図 7 : Ginzburg-Landau 方程式の quasi-Newton 法による計算フローチャート

4.2 Ginzburg–Landau 方程式の計算高速化

内部磁化と外部磁場の常磁性結合により、外部磁場の印加で chiral 安定化する様子を調べるには、外部磁場を小幅で変化させた解析が必要となる。この様な解析を、Ginzburg-Landau 方程式で超伝導秩序変数とベクトルポテンシャルを自己無撞着に求める数値計算（図 7）において行うと計算時間が長くなり、計算の高速化を行う必要がある。そのため、秩序変数とベクトルポテンシャルの超伝導体端からの距離上のデータの計算について、大阪大学サイバーメディアセンターの SQUID; SX-Aurora TSUBASA でベクトル化 [9,10] を用いた高速化を行った。[4,11]

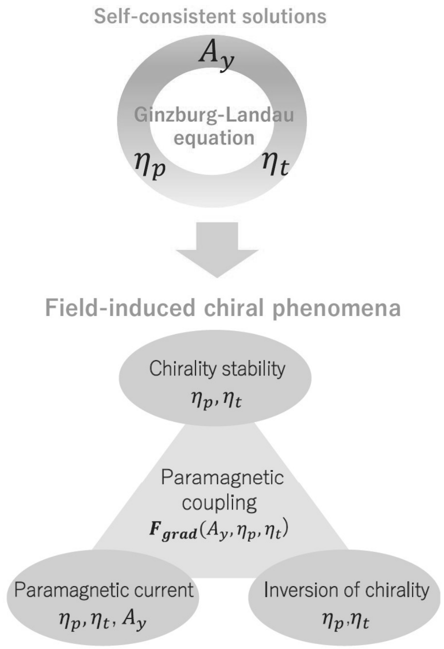

図 8：常磁性結合による磁場誘起 chiral 現象の Ginzburg-Landau 方程式によるシミュレーション

5. おわりに

数値計算で示した磁場誘起 chiral 転移の振る舞いは Sr_2RuO_4 共晶に限らず、一軸圧下 Sr_2RuO_4 や圧力下 UTe_2 についても、不均一な状態が考えられる場合には磁場誘起 chiral 現象の可能性がある。[12,13]

今後は chiral 状態に限らず、時間反転対称性の破れた幾つかの状態についても、Ginzburg-Landau 方程式による磁場中シミュレーションを発展させることが考えられる。[4]

この研究報告は今年度の公募利用の成果である論文 [4] の一部をまとめたものである。また、春名の卒業論文 [14] に関係する。SQUID; SX-Aurora TSUBASA での計算高速化について、大阪大学サイバーメディアセンターの伊達進氏と大阪大学工学部博士課程前期の吉田薪史氏に協力して頂き、chiral 状態の現象論について ETH Zurich の M. Sigrist 氏に議論して頂きました。感謝致します。

参考文献

(1) A. Furusaki, M. Matsumoto, and M. Sigrist, Phys. Rev. B 64, 054514 (2001).

(2) M. Matsumoto, C. Belardinelli, M. Sigrist, J. Phys. Soc. Jpn. 72, 1623 (2003).

(3) H. Kaneyasu, Y. Enokida, T. Nomura, Y. Hasegawa, T. Sakai, and M. Sigrist, Phys. Rev. B 100, 214501, (2019).

(4) H. Kaneyasu, K. Otuka, S. Haruna, S. Yoshida, and S. Date, Sustained Simulation Performance 2021; Proceedings of the Joint Workshop on Sustained Simulation Performance, 31th and 32nd,15 pages, in print.

(5) Y. Maeno, T. Ando, Y. Mori, E. Ohmichi, S. Ikeda, S. NishiZaki, S. Nakatsuji, Phys. Rev. Lett. 81, 3765 (1998)

(6) M. Sigrist, and H. Monien, J. Phys. Soc. Jpn. 70, 2409, (2001).

(7) M. Kawamura, H. Yaguchi, N. Kikugawa, Y. Maeno, H. Takayanagi, J. Phys. Soc. Jpn. 74, 531 (2005).

(8) H. Kaneyasu, Y. Enokida, T. Nomura, Y. Hasegawa, T. Sakai, M. Sigrist, JPS Conf. Proc. 30, 011039, (2020).

(9) R. Egawa, K. Komatsu, S. Momose, Y. Isobe, A. Musa, H. Takizawa, and H. Kobayashi, J. Supercomput. 73(9), 3948, (2017).

(10) K. Komatsu, S. Momose, Y. Isobe, O. Watanabe, A. Musa, M. Yokokawa, T. Aoyama, M. Sato, and H. Kobayashi, in SC18: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 685–696, (2018).

(11) S. Yoshida, A. Endo, H. Kaneyasu, and S. Date, Supercomput. Front. and Innov. 8(2), 43-58, (2021).

(12) V. Grinenko, et al., Nature Phys. 17, 748 (2021).

(13) S. Ran, et al., Science 365, 684 (2019).

(14) 春名信吾、“局所的に高い Tc を持つ chiral 超伝導の磁場中における軌道磁化反転の機構”、卒業論文（兵庫県立大学理学部）、2022 年 3 月。