

町田 昌彦

(独) 日本原子力研究開発機構システム計算科学センターシミュレーション技術開発室・
室長／研究主幹

超伝導新奇応用のためのマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションの 基盤構築

§1. 研究実施の概要

超伝導とは、20 世紀初めに発見された、人類がこれまでに目にしてきた最も劇的な量子現象の 1 つである。その産業応用への高い潜在的可能性は誰もが認めるところであるが、超伝導研究開発分野では現在、その基礎から応用まで解決すべき課題を多く抱えており、その積極的産業利用は未だ十分ではない。本研究実施者らはそれらの課題を解決するため、シミュレーションをツールとして、マイクロ・メゾ・マクロの異なる 3 つのスケール(あるいは必要に応じそれらを統合し)で代表的課題を見定め、地球シミュレータクラスの超並列計算機を利用して課題解決の糸口を探ることとした。尚、本研究課題は平成 18 年度 10 月より各スケールでの研究に実績を有する 5 大学・2 研究機関の体制にて研究を開始し、平成 19 年度はそれらを整理統合し、4 大学・2 研究機関としたが、21 年度、大学機関を 1 つ追加し、5 大学・2 研究機関にて研究を行っている。

22 年度の成果としては、まず、マイクロレベルの研究において、密度行列繰り込み群(DMRG)法と呼ばれる高精度な量子状態計算手法の超並列化を進め、クラスターマルチチェーン法と呼ぶオリジナルな発展版を考案し、これまでの規模を遥かに上回るサイズの格子系での計算を行った。また、DMRG の発展版である動的 DMRG コードを用いて、光学格子上のフェルミ原子ガスのスペクトルを詳細に計算した。今後は京速計算機利用を目標とし、更なる超大規模並列化(高速化を含む)を進め、物理量の計算ルーチン等を整備する。また、強結合超流動理論にフェルミ原子ガス特有のトラップ効果を考慮し、光電子分光スペクトルに相当する量を超流動転移温度以上の幅広い相互作用領域で理論的に計算した。その結果、実験で観測された「BCS-BEC クロスオーバー領域における 1 粒子スペクトルの異常」が、トラップ効果に起因する非一様な擬ギャップに因るものとして

説明できることを示すことに成功した。それらの計算結果はフィティングパラメータなしで定量的に実験結果を再現可能で、この事実は、我々の強結合理論の正しさと、この系における擬ギャップ現象の存在を共に証明するものである。

メゾレベルの研究においては、高温超伝導体からの電磁波発振特性をシミュレーションするコードを改良し、超並列化も進め、発振機構解明に至る糸口を見出した他、量子ダイナミクスにおいて、量子トンネル確率の増強効果など、応用上、重要な知見を得ることに成功した。また、最近、発見された鉄系超伝導体のジョセフソン効果を調べ、複数の新しい理論的知見を得ることに成功している。更に、グラフェンの超伝導近接効果、ナノ超伝導体の特異な性質についてのシミュレーション研究を継続させ、系に特有な複数の知見を得ることができた。

マクロレベルの研究については、時間依存ギンツブルク・ランダウ方程式のシミュレーションを高度化させ、単一光子超伝導検出器の検出過程をシミュレーションし、検出過程の詳細をギンツブルク・ランダウ理論の枠組みの中で初めて明らかにすることに成功した。今後は、検出器の検出ダイナミクスのシミュレーション研究を更に進める一方、超伝導輸送特性を支配する磁束量子ピン止めダイナミクス研究も本格化させる。

§ 2. 研究実施体制

(1)「原子力機構・町田」グループ

①研究分担グループ長:町田 昌彦(日本原子力研究開発機構システム計算科学センター、室長・研究主幹)

②研究項目

(1)ミクロ(超伝導発現機構):

- 1)フェルミ原子ガスを通して見る室温超伝導の姿
- 2)2次元強相関電子系への超並列シミュレーションによるアプローチ

(2)メゾ(デバイス):

- 1)高温超伝導体・固有ジョセフソン接合
- 2)各種超伝導体を幾何学的に配置することで得られる新奇デバイス機能
- 3)超伝導放射線検出

(3)マクロ(線材):

- 1)磁束量子と複合欠陥とのマルチスケール・シミュレーション

(2)「秋田大・林」グループ

①研究分担グループ長:林 正彦(東北大学大学院情報科学研究科、准教授)

②研究項目

・微小超伝導系の電気伝導特性に関する理論解析とマルチスケールの理論構築

- ・ネットワーク及び層状ジョセフソン接合系における磁化特性と渦糸のダイナミクスに関する理論解析

(3)「東北大・小山」グループ

- ①研究分担グループ長:小山 富男(東北大学金属材料研究所、助教)
- ②研究項目
 - ・磁束ピン止めマルチスケール・シミュレーションの基礎理論構築
 - ・固有ジョセフソン接合の量子論的位相ダイナミクス

(4)「慶応大・大橋」グループ

- ①研究分担グループ長:大橋 洋士(慶應義塾大学理工学部、准教授)
- ②研究項目
 - ・BCS-BEC クロスオーバー理論における擬ギャップ現象
 - ・フェルミ原子ガスにおける磁性効果
 - ・スピン1BEC における異常トンネル現象

(5)「大阪府立大・加藤」グループ

- ①研究分担グループ長:加藤 勝(大阪府立大学大学院工学研究科、准教授)
- ②研究項目
 - (1)ラチェット効果を調べるため、サブミクロンサイズの超伝導ネットワークにおける渦糸の運動を有限要素法を用いて現象論的 Ginzburg-Landau 方程式を解き、シミュレーションを行う。
 - (2)d-dot と呼ぶ複数の種類の超伝導体を組み合わせた超伝導複合体における磁束運動の制御を、2成分の Ginzburg-Landau 方程式を有限要素法を用いて数値的に解き調べ、新しい論理回路の提案を行う。
 - (3)異方的ナノサイズの超伝導体の超伝導対称性の形状依存性やエネルギーギャップ内の準粒子構造を微視的な Bogoliubov-de Gennes 方程式を数値的に解くことで研究する。
 - (4)微小な超伝導板において生じる巨大磁束に関して、そのまわりの準粒子構造を微視的な Bogoliubov-de Gennes 方程式を数値的に解くことで調べ、走査型トンネル分光の実験で観測できる可能性を示す。
 - (5)現象論的な Ginzburg-Landau 方程式を数値的に解いて得られた超伝導ネットワークにおける磁束構造を、超伝導ネットワークを作成し、SQUID 顕微鏡で磁束を測定することで実証する。

(6)「大阪府立大・林」グループ

- ①研究分担グループ長:林 伸彦(大阪府立大学ナノ科学・材料研究センター、講師)
- ②研究項目

・アンコンベンショナル超伝導体でのクーパー対称性および磁束に関する研究

(7)「産総研・柳澤」グループ

①研究分担グループ長:柳澤 孝(産業技術総合研究所エレクトロニクス研究部門、グループ長)

②研究項目

1. 2次元強相関係の超並列シミュレーションによる研究
2. 高温超伝導体固有ジョセフソン接合の研究

§3. 研究実施内容

(文中に番号がある場合は(4-1)に対応する)

超伝導とは 20 世紀初めに発見された、人類がこれまでに目にしてきた最も劇的な量子現象の 1 つである。その産業応用への高い潜在的可能性は誰もが認めるところであるが、発見以後、100 年あまりも経過したにもかかわらず、その積極的産業利用は未だ十分に進んでいない。これは超伝導発現機構や其の現象自体の理解が未だに進んでいない(例えば、高温超伝導体の高温超伝導発現機構については、未だ解決されていない問題が残る。また、ジョセフソン効果や量子化磁束の運動という最も基本的な現象においても、未だに解明されていない部分がある)ためであり、その性質を利用することで得られる圧倒的利便性の多くが未だに理解されていないからである。

本研究実施担当者らはこうした状況を打破すべく、様々な課題をシミュレーションによって解決することを目指し、マイクロ・メゾ・マクロの異なる 3 つのスケールで代表的課題を定め(問題に応じてはそれらの異なるスケールを統合して)、地球シミュレータクラスの超並列計算機を用いて大規模並列シミュレーションを行い、課題解決の糸口を探ることとした。尚、本研究課題は平成 18 年度 10 月より 5 大学・2 研究機関の体制にて始動したが、19 年度は一部改編して 4 大学・2 研究機関とし、21 年度は更に 1 つのグループを追加し、5 大学・2 研究機関とした。

22 年度の具体的研究成果としては、まずマイクロレベルで、原子力機構・町田 G の山田・五十嵐・山本、理研の奥村らが 19 年度より進めてきた密度行列繰り込み群(DMRG)法と呼ばれる高精度な量子状態計算手法の準 2 次元及び動的 DMRG の超並列化版を基に、光学格子上的フェルミ原子ガスの研究を展開した。特に、準 2 次元版では、クラスターマルチチェーン法というオリジナルな方法を発展させ、従来の最大 6-Leg 梯子系の計算を 10-Leg 以上に拡大した(これは DMRG 史上、最大の計算である)。動的 DMRG 法においては、トラップされた強相関 1 次元系の一粒子励起スペクトルを詳細に調べ、如何にスペクトルがトラップポテンシャルの影響により豊かなものとなるかを明らかにした。超伝導体の電子構造計算(第一原理計算)においては、原子力機構・町田 G の中村らは、厚いブロック層を持つ鉄系超伝導体 $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_3$ に対し、従来の第一原理計算でブロック層が金属になり、超伝導に大きな影響を与える可能性が指摘されていたが、強相関効果を適切に考慮することによってブロック層は絶縁層となり、超伝導は他の鉄系超伝導体とほぼ同様であることを明らかにした(後に行われた実験は、ほぼ中村らの計算を支持している)(論文 1.14)。更に、鉄系超

伝導体に水素を混入させることによって転移温度が上昇することが実験により発見されていたが、この水素混入の状態に対しても第一原理計算を行ない、結晶構造や電子状態への水素の影響を調べ、転移温度上昇の理由に迫る結果を示した。慶応大・大橋Gは、フェルミ原子ガス ^{40}K で近年観測された光電子分光型スペクトルの異常な振る舞いを理論的に解明すべく研究を実施した。これまで本プロジェクトの中で積み上げてきた強結合超流動理論にフェルミ原子ガス特有のトラップ効果を加え、光電子分光スペクトルに相当する量を超流動転移温度以上の幅広い相互作用領域で理論的に計算した。結果、実験で観測された「BCS-BEC クロスオーバー領域における1粒子スペクトルの異常」が、トラップ効果に起因する非一様な擬ギャップに因るものとして説明できることを示した(論文 4.4, 4.5, 4.7, 4.8)。その計算結果はフィティングパラメータなしで定量的に実験結果を再現することが可能であり、これは用いた強結合理論の正しさと、この系における擬ギャップ現象の存在を共に証明するものである。擬ギャップ現象は銅酸化物高温超伝導においても発現機構に密接に関係する現象として注目されているが、本研究成果により、この問題解明にフェルミ原子ガスが極めて有効な系であることが示されたと言える(この成果を発表した慶応大・大橋Gの渡邊は、基研研究会「熱場の量子論とその応用」においてポスター賞を受賞した)。また、フェルミ原子ガス超流動は、従来、超伝導研究における重要テーマの1つである「磁性効果」の研究ができない、という弱点があったが、スピン分極したフェルミ原子ガス超流動体中に非磁性ポテンシャルを導入すると、その近傍に余剰原子が局在、あたかも磁性不純物のように振舞うことで模擬できることを明らかにした。更に、この「磁性体」を層状に配置することで、超伝導で議論されている「超流動/強磁性/超流動接合」と同じ接合が実現でき、結果、接合をはさんで左右の超流動秩序パラメータの位相が π ずれる現象(π -phase)が原子気体でも実現可能であることを示している(論文 4.2)(この成果を発表した慶応大・大橋Gの柏村は、基研研究会「熱場の量子論とその応用」においてポスター賞を受賞した)。一方、産総研・柳澤Gは、研究当初より開発及び改良を進めている量子モンテカルロ法に対し、絶対零度でスピン磁化率などの感受率を計算する方法を定式化した。この手法を用いることで、2次元ハバードモデルのスピン磁化率、超伝導ペアー感受率を計算し、それらのサイズ依存性を求めた。その結果、ハーフフィリングでスピン磁化率はサイズが $L \times L$ の系に対して、 L^4 の依存性を示すことを見出した。これに対し、超伝導ペアー感受率は L^2 の依存性を示し、コストリッツ・サウレス型の相転移とコンシステントであることが分かる。更に、量子モンテカルロ対角化法により、超伝導相関等の相関関数を計算する手法を開発した。並列化された変分モンテカルロ法により、Bi系高温超伝導体などで観測されている 4×4 のチェッカーボード状態が安定になりうることを明らかにした。

メゾレベルでの研究においては、原子力機構・町田Gの太田らは、鉄系超伝導に代表される多バンド・多ギャップ超伝導を用いたジョセフソン接合デバイスについて、多トンネル径路ジョセフソン接合という概念を構築してきたが、22年度は、そのデバイス特性の予測と応用可能性を調べた。主な成果は、レグット・モード共鳴による新奇シャピロ・ステップの予測とそれを応用した鉄系超伝導に対する超伝導対称性の同定法の提案(論文 1.12)と、当該デバイスにおける巨視的量子トンネル効果に関する初めての理論的記述(レグット・モードによるトンネル確率の増大を明らかにした)で

ある(論文 1.4)。東北大・小山Gは、固有ジョセフソン接合からのテラヘルツ波発振に対して極めて有効なマルチスケール・シミュレーション法の開発に成功した。この系で励起される電磁場の空間スケールは、 10^{-3} から 10^2 マイクロメートルに渡り、極めて広い範囲に分布している。こうした系のシミュレーションを行うため、FDTD(Finite Difference Time Domain)法を用いるが、22年度の研究では、接合内部、接合外部の近接場領域、および、その外側の真空領域の3つの領域でメッシュサイズを変え、マルチスケールでシミュレーションができるようにFDTD法を拡張することに成功した。この新しい方法を用いてシミュレーションを行うと、電流—電圧特性に現れるブランチ間の動的転移に伴って、強いテラヘルツ波発振が起きることが分かり、これは実験事実と符合する等、現実の系が示す現象を極めて良く再現できることが分かった。秋田大・林Gは、昨年度に引き続きグラフェン(単層、2層および多層)と超伝導体とのナノ接合における電気伝導特性について、理論的解析を行った。22年度新しく分かった事実は、1) 近接効果のコヒーレンス長の温度依存性には、グラフェンの特異なバンド構造(ディラック・コーン)の影響が顕著であり、通常の正常金属の場合と違う幕の温度依存性が現れるのは、化学ポテンシャルが電荷中性点付近に位置する場合には限ること、2) 2層グラフェンにおける特異な干渉効果はグラフェンの AB 副格子の構造に敏感に依存し、平均化されると別の幕依存性が現れること等である(論文 2.2, 2.3)。また、超伝導磁束観測を行うための SQUID 顕微鏡の画像処理技術について、これまでの成果を更に進める新しい方法を考案した。これについては現在、特許出願準備中である。大阪府立大・加藤Gは、ナノ構造超伝導体の電子構造を数値的に求めるために、これまでの2次元有限要素法を用いたシミュレーション方法を拡張し、3次元ナノ構造超伝導体をシミュレーションするプログラムを開発した(論文 5.8)。シミュレーションによる成果としては、ナノサイズの超伝導正方板において、磁束構造が低温では、現象論的なシミュレーション方法にて得られる結果と異なることを明らかにした(論文 5.6)。また、層状構造をもつ酸化物高温超伝導体中のジョセフソン磁束まわりの準粒子構造を求めた他、更に超伝導体中の磁束間の相互作用を微視的にシミュレーションするために、楕円座標系と Mathieu 関数を用いた方法を開発し(論文 5.7)、s-波超伝導体中の2本の磁束まわりの準粒子構造を解析し、準粒子間の干渉効果を調べた。今後、この方法を半整数量子磁束の対に対して適用し、半整数量子磁束の安定性等を議論する。また、超伝導ネットワークに関しては、乱れのある超伝導ネットワークにおける、磁束構造が乱れによってピン留めされるのではなく、非局所的に全体の構造が変化することを明らかにした(論文 5.2, 5.4)。大阪府立大・林Gは超伝導体に磁場を印加し、その印加方向を回転させ際の物理量の変動から、超伝導発現機構に関係した異方的クーパー対についての情報を得られるという仮説の下、その理論解析を行った(論文 6.1)。その結果、渦糸コア内の準粒子散乱率が示す新奇な現象を発見することに成功した。すなわち、その準粒子散乱率の印加磁場方向への依存性において、クーパー対波動関数の“位相”の情報が反映されるという現象である。この理論結果により、その準粒子散乱率の測定(マイクロ波を使った表面インピーダンス測定)が、クーパー対のペアリング対称性に対する新しい位相敏感な実験プローブとして使えるという、将来の可能性への道が拓かれる。また、超伝導体 Sr_2RuO_4 での 3K 相と呼ばれる状態に対して、超伝導オーダーパラメーターについて互いに異なった実空間構造をもつ複数の種類の相とそれらの間

のエネルギー的安定性について解析し、その結果、3K 相で実現する2つの互いにトポロジーの異なった超伝導相とそれらの間での1次相転移の存在を明らかにした(論文 6.2)。一方、産総研・柳澤Gの川畑らは、強磁性絶縁体及び強磁性金属を介したジョセフソン接合の量子輸送及び巨視的量子現象に関する研究を行い、熱的 $0-\pi$ 相転移現象が発現することを理論的に明らかにした(論文 7.3)。また固有ジョセフソン接合における協力的量子トンネル現象に関して理論的に解析を行い、量子トンネル脱出率の異常増大がキャパシティブ結合の結果生じることを明らかにし、実験結果を定性的に再現することに成功している。

マクロスケールレベルでの超伝導体の電流輸送特性の研究では、原子力機構・町田Gの太田らが19年度に開発した時間依存のギンツブルク・ランダウ方程式の3次元シミュレーションコードを窒化ニオブの薄膜に適用することで、光子検出器の検出過程をシミュレーションした。その結果、典型的な検出過程の再現に成功した一方、シミュレーションにより、検知初期に、従来知られていなかった複雑なダイナミクスを示すことが分かった。今後は、これらのシミュレーションにより、詳細な光子検出過程の全貌を初めて明らかにする。一方、本プロジェクトの重要テーマである磁束ピン止めの超並列シミュレーションコード開発に際しては、類似方程式である非線形シュレディンガー方程式の超大規模シミュレーションを行い、量子渦糸乱流の解析を行った。更に、ピン止めの3次元シミュレーションを実現させるべく、マルチスケール・コードの開発を引き続き目指すこととする。

§4. 成果発表等

(4-1) 原著論文発表

●論文詳細情報

「原子力機構・町田」グループ

- 1.1. Y. Nagai , H. Nakamura and M. Machida, “Superconducting gap function in the organic superconductor (TMTSF)₂ClO₄ with anion ordering; First-principles calculations and quasiclassical analysis for angle-resolved heat capacity”, Physical Review B, vol. 83, 104523, (2011) (DOI: 10.1103/PhysRevB.83.104523).
- 1.2. M. Okumura, S. Yamada, M. Machida, and H. Aoki, “Phase-separated ferromagnetism in a spin-imbalanced system of Fermi atoms loaded in an optical ladder: A density-matrix renormalization-group study”, Physical Review A, vol. 83, 031606(R), (2011) (DOI: 10.1103/PhysRevA.83.031606).
- 1.3. Y. Ota, M. Machida, T. Koyama, and H. Aoki, “Collective Modes in Multiband Superfluids and Superconductors: Multiple Dynamical Class”, Physical Review B, vol. 83, 060507(R) (2011) (DOI:10.1103/PhysRevB.83.060507).
- 1.4. Y. Ota, M. Machida, and T. Koyama, “Macroscopic quantum tunneling in multigap superconducting Josephson junctions: Enhancement of escape rate via

- quantum fluctuations of Josephson-Leggett mode”, *Physical Review B*, vol. 83, 060507(R) (2011) (DOI:10.1103/PhysRevB.83.060503).
- 1.5. Y. Imai, H. Takahashi, K. Kitagawa, K. Matsubayashi, N. Nakai, Y. Nagai, Y. Uwatoko, M. Machida, and A. Maeda, “Microwave surface impedance measurements of LiFeAs single crystals”, *Journal of Physical Society of Japan*, vol. 80, 013704 (2011) (DOI:10.1143/JPSJ.80.013704).
 - 1.6. Y. Ota, M. Machida, and T. Koyama, “Theory of Josephson effects in iron-based multigap superconductor junctions”, *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 248, 012040 (2010) (DOI: 10.1088/1742-6596/248/1/012040).
 - 1.7. T. Imamura, T. Kano, S. Yamada, M. Okumura, and M. Machida, “High-Performance Quantum Simulation for Coupled Josephson Junctions on the Earth Simulator: a Challenge To the Schrödinger Equation On 256^4 Grids”, *The International Journal of High Performance Computing Applications*, vol. 24, 319 (2010) (DOI: 10.1177/1094342009352483).
 - 1.8. M. Machida, Y. Ota, N.Sasa, T.Koyama, and H.Matsumoto, “Theory and Simulation of Electromagnetic Wave Emission from Intrinsic Josephson Junctions”, *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 248, 012037 (2010) (DOI: 10.1088/1742-6596/248/1/012037).
 - 1.9. M. Okumura, H. Onishi, S. Yamada, and M. Machida, “Anomalous non-equilibrium electron transport in one-dimensional quantum nano wire at half-filling: time-dependent density matrix renormalization group study”, *J. Phys.: Conf. Ser.*, vol. 248, 012031 (2010) (DOI: 10.1088/1742-6596/248/1/012031).
 - 1.10. Y. Nagai and Y. Kato, “Impurity scattering rate and coherence factor in vortex core of sign-reversing s-wave superconductors”, *Physical Review B*, vol. 82, 174507 (2010) (DOI: 10.1103/PhysRevB.82.174507).
 - 1.11. H. Nakamura, M. Machida and M. Kato, “Effects of spin-orbit coupling and strong correlation on the paramagnetic insulating state in plutonium dioxides”, *Physical Review B*, vol. 82, 155131 (2010) (DOI: 10.1103/PhysRevB.82.155131).
 - 1.12. Y. Ota, M. Machida, and T. Koyama, “Shapiro steps as a direct probe of $\pm$ s-wave symmetry in multigap superconducting Josephson junctions”, *Physical Review B* vol. 82, 140509(R) (2010) (DOI:10.1103/PhysRevB.82.140509).
 - 1.13. J.-H. Hu, J.-J. Wang, G. Xianlong, M. Okumura, R. Igarashi, S. Yamada, M. Machida, “Ground-state properties of the one-dimensional attractive Hubbard model with confinement: A comparative study”, *Physical Review B* vol. 82, 014202 (2010) (DOI: 10.1103/PhysRevB.82.014202).
 - 1.14. H. Nakamura and M. Machida, “Magnetic ordering in blocking layer and highly

- anisotropic electronic structure of high- T_c iron-based superconductor $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_3$: LDA+U study”, *Physical Review B*, vol. 82, 094503 (2010) (DOI: 10.1103/PhysRevB.82.094503).
- 1.15. N. Nakai, H. Nakamura, Y. Ota, Y. Nagai, N. Hayashi, and M. Machida, “First-principles-based $s\pm$ -wave modeling for iron-based superconductors: Specific heat and nuclear magnetic relaxation rate”, *Physical Review B*, vol. 82, 094501 (2010) (DOI:10.1016/j.physc.2010.05.060).
 - 1.16. Y. Ota, N. Nakai, H. Nakamura, M. Machida, D. Inotani, Y. Ohashi, T. Koyama, and H. Matsumoto, “Ambegaokar-Baratoff relations of Josephson critical current in heterotic junctions with multigap superconductors”, *Physical Review B*, vol. 81, 214511 (2010) (DOI: 10.1103/PhysRevB.81.214511).
 - 1.17. 山田進、五十嵐亮、奥村雅彦、今村俊幸、町田昌彦、“量子多体系・高精度シミュレーションの研究開発：密度行列繰り込み群法の超並列化と大規模計算”、*応用数理*、Vol. 20, No.2, 2010.
 - 1.18. H. Nakamura, M. Machida, T. Koyama and N. Hamada, “First-principles calculations for anisotropy of iron-based superconductors”, *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, pp.1066-1069 (2010) (DOI: 10.1016/j.physc.2010.05.037).
 - 1.19. M. Machida and H. Nakamura, “Two-dimensionality of electronic structure and strong Fermi surface nesting in highly anisotropic iron-based superconductors”, *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, pp.1002-1006 (2010) (DOI: 10.1016/j.physc.2010.05.020).
 - 1.20. N. Nakai and M. Machida, “Simulation study on the vortex penetration in the presence of the square antidot array”, *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, pp.1148-1151 (2010) (DOI:10.1016/j.physc.2010.05.060).
 - 1.21. Y. Ota, M. Machida, T. Koyama, and H. Matsumoto, “Anomalous Josephson vortex solutions in Josephson junctions with multiple tunneling channels”, *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, pp.1137-1140 (2010) (DOI: 10.1016/j.physc.2010.05.057).
 - 1.22. H. Nakamura and M. Machida, “Pressure effects on iron-based superconductors: A first-principles study”, *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, Supplement 1, pp. S387-S388, 2010 (doi:10.1016/j.physc.2009.12.024).
 - 1.23. H. Nakamura, M. Machida, A. Q.R. Baron, T. Fukuda and S. Shamoto, “Magnetic structure and phonon spectra of iron-based superconductors: A first-principle study”, *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, Supplement 1, pp. S430-S432, 2010 (doi:10.1016/j.physc.2009.10.138).

- 1.24. M. Machida, Y. Nagai, Y. Ota, N. Nakai, H. Nakamura, and N. Hayashi, "Phenomenological theory for $\pm s$ -wave superconducting states of iron-based superconductors", *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, Supplement 1, pp. S372-S374, 2010 (doi:10.1016/j.physc.2009.10.087).
- 1.25. N. Nakai, H. Nakamura, Y. Ota, Y. Nagai, N. Hayashi, and M. Machida, "Small Jump of Specific Heat and Small Gap in Iron Pnictide Superconductors", *Physica C: Superconductivity* vol. 470, Supplement 1, pp. S368-S369 (2010) (doi:10.1016/j.physc.2010.01.055.)
- 1.26. Y. Nagai, N. Hayashi, and M. Machida, "Surface-angle dependence of the tunneling spectroscopy in iron-based superconductors: Sign-reversing s -wave scenarios", *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, Supplement 1, pp. S504-S505, 2010 (doi:10.1016/j.physc.2009.10.043).
- 1.27. Y. Ota, M. Machida, and T. Koyama, "Inter-grain Josephson Currents in Two-gap Superconductors", *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, Supplement 1, pp. S489-S490 (2010) (DOI:10.1016/j.physc. 2009.11.016).
- 1.28. Y. Ota, M. Machida, T. Koyama, and H. Matsumoto, "Collective modes and Josephson vortices in a heterotic Josephson junction between single- and two-gap superconductors", *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, Supplement 1, pp. S882-S883 (2010) (DOI:10.1016/j.physc. 2009.10.023).
- 1.29. M. Okumura, H. Onishi, S. Yamada, M. Machida, "Dynamics of Attractively-Interacting Fermi Atoms in One-Dimensional Optical Lattices: Non-Equilibrium Simulations of Fermion Superfluidity", *Physica C: Superconductivity* 470, pp. S952-S953 (2010) (DOI: 10.1016/j.physc.2009.11.178).
- 1.30. M. Okumura, S. Yamada, M. Machida, "Density-matrix renormalization-group studies for one-dimensional polarized Anderson-Hubbard model", *Physica C: Superconductivity* 470, pp. S949-S950 (2010) (DOI: 10.1016/j.physc.2009.11.003).
- 1.31. N. Nakai, N. Hayashi, and M. Machida, "Direct numerical confirmation of pinning-induced sign change in the superconducting Hall effect in type-II superconductors", *Physical Review B*, vol. 83, 024507 (2011) (DOI: 10.1103/PhysRevB.83.024507).
- 1.32. H. Nakamura, and M. Machida, "First-Principles Study of Light-Element Doping Effects on Iron-Based Superconductors", *Physica C: Superconductivity* (accepted)
- 1.33. A. Yamamoto, S. Yamada, and M. Machida, "Emergence of non-equilibrium superconductivity originated from repulsive interaction: demonstration using optical lattices and implication to solid-state matter system", *Physica C: Superconductivity* (accepted).

- 1.34. Y. Ota, M. Machida, and T. Koyama, "Theory of phase dynamics in intrinsic Josephson junctions with multigap superconducting layers", *Physica C: Superconductivity* (accepted).
- 1.35 Y. Ota, M. Machida, and T. Koyama, "Variety of c-axis collective excitations in layered multigap superconductors", *Physical Review Letters* (accepted).

「秋田大・林」グループ

- 2.1. Masahiko Hayashi, Hiromichi Ebisawa, "Topological defect and quasi-particle dynamics in charge density waves", *Physica C*, Vol. 470, Supplement 1, Pages S962-S963, 2010.
- 2.2. Masahiko Hayashi, Hideo Yoshioka, Akinobu Kanda, "Theoretical study of superconducting proximity effect in single and multi-layered graphene Original Research Article", *Physica C: Superconductivity*, Volume 470, Supplement 1, December 2010, Pages S846-S847
- 2.3. Masahiko Hayashi, Hideo Yoshioka, Akinobu Kanda, "Superconducting proximity effect in graphene nanostructures", *Journal of Physics: Conference Series*, Volume 248, Number 1, 2010, 012002.

「東北大・小山」グループ

- 3.1. Tomio Koyama, Yukihiro Ota and Masahiko Machida, "I-V Characteristics in Multi-gap Intrinsic Josephson Junction Stacks", *Physica C* 470 (2010) 1481-1484.
- 3.2. Hideki Matsumoto, Tomio Koyama and Masahiko Machida, "Terahertz Wave Emission and Phase Motion in Intrinsic Josephson Junctions", *Physica C* 470 (2010) 1485-1488.
- 3.3. Tomio Koyama, Yukihiro Ota and Masahiko Machida, "Electromagnetic and Intrinsic Josephson Effects in Multi-gap Superconductors", *J. Phys. Conf. Ser.* 248 (2010) 012036/1-6.
- 3.4. Tomio Koyama, Hideki Matsumoto and Masahiko Machida, "Numerical Simulations for THz Wave Emission from High-Tc Intrinsic Josephson Junctions", *Physica C* 470 (2010) S230-S231.
- 3.5. Masashi Tachiki, K. Ivanovic, Kazuo Kadowaki and Tomio Koyama, "Emission of Terahertz Electromagnetic Waves from Intrinsic Josephson Junction Arrays Embedded LCR Circuits", *Phys. Rev. B* 83 (2011) 014508/1-7.

「慶応大・大橋」グループ

- 4.1. Y. Kato, and S. Watabe. "Dynamical density fluctuations of superfluids near the

critical velocity" Phys. Rev. Lett. 105 (2010) 035302 (1-4).

- 4.2. T. Kashimura, S. Tsuchiya, and Y. Ohashi, "Superfluid-ferromagnet-superfluid junction and π -phase in a superfluid Fermi gas," Phys. Rev. A. 82 (2010) 033617 (1-9).
- 4.3. S. Watabe, and T. Nikuni, "Dynamical structure factor of the normal Fermi gas from the collisionless to the hydrodynamic regime," Phys. Rev. A. 82 (2010) 033622 (1-8).
- 4.4. S. Tsuchiya, R. Watanabe, and Y. Ohashi, "Photoemission spectrum and effect of inhomogeneous pairing fluctuations in the BCS-BEC crossover regime of an ultracold Fermi gas," Phys. Rev. A 82 (2010) 033629(1-5).
- 4.5. R. Watanabe, S. Tsuchiya, and Y. Ohashi, "Superfluid density of states and pseudogap phenomenon in the BCS-BEC crossover regime of a superfluid Fermi gas," Phys. Rev. A 82 (2010) 043630(1-9).
- 4.6. D. Inotani, and Y. Ohashi, "Theoretical proposal of a method to identify the pairing symmetry of Fe-pnictide superconductors using ac-josephson effect," Physica C 470 (2010) S499-S501.
- 4.7. R. Watanabe, S. Tsuchiya, and Y. Ohashi, "Pairing fluctuations and pseudogap effects in the BCS-BEC crossover regime of a superfluid Fermi gas," Physica C 470 (2010) S980-S981.
- 4.8. S. Tsuchiya, R. Watanabe, and Y. Ohashi, "Pseudogap behaviors of atomic Fermi gases above T_c in the BCS-BEC crossover," Physica C 470 (2010) S986-S988.
- 4.9. S. Watabe, Y. Kato, and Y. Ohashi, "Tunneling properties of Bogoliubov mode and spin wave modes in supercurrent states of a spin-1 ferromagnetic spinor Bose-Einstein condensate," Phys. Rev. A 83 (2011) 033627 (1-12).

「大阪府立大・加藤」グループ

- 5.1. M. Kato, T. Koyama, M. Machida, S. Kawamata, T. Ishida, "Magnetic flux structures in various shaped composite structures with d- and s-wave superconductors (d-dots)", J. Phys.: Conf. Ser., vol. 248 012028 (8pages), 2010. (DOI: 10.1088/1742-6596/248/1/012028)
- 5.2. Masaru Kato, Yoshiteru Iwamoto, Osamu Sato, "Vortex structures in nano-scaled superconducting networks", Physica C, vol. 470, pp. 747-749, 2010 (DOI: 10.1016/j.physc.2010.02.046)
- 5.3. Y. Niwa, M. Kato, K. Maki, "Quasi-particle excitations around a pair of Half-Quantum Vortices in p-wave superconductors", Physica C, vol. 470, pp.1151-1152, 2010 (DOI: 10.1016/j.physc.2010.05.061)

- 5.4. Masaru Kato, Yoshiteru Iwamoto, Osamu Sato, “Non-local effects in finite superconducting networks”, *Physica C*, vol. 470, S797-S798, 2010. (DOI:10.1016/j.physc.2009.12.035)
- 5.5. Takekazu Ishida, Kohei Arai, Yukio Akita, Mitsunori Miyanari, Yusuke Minami, Tsutomu Yotsuya, Masaru Kato, Kazuo Satoh, Mayumi Uno, Hisashi Shimakage, Shigehito Miki, Zhen Wang, “Scanning laser microscope for imaging nanostructured superconductors”, *Physica C*, pp. S207-S208, 2010. (DOI: 10.1016/j.physc.2010.02.044)
- 5.6. H. Suematsu, T. Ishida, T. Koyama, M. Machida, M. Kato, “Vortex molecule in a Nanoscopic Square Superconducting Plate”, *J. Phys. Soc. Jpn.* Vol. 79, 124704 (6 pages), (2010) (DOI: 10.1143/JPSJ.79.124704)
- 5.7. Y. Niwa, M. Kato, K. Maki, “A new numerical method for quasi-particle spectroscopy around a pair of vortices in triplet superconductors”, *J. Phys. Chem. Solids*, in press
- 5.8. S. Oshima, M. Kato, “Three-dimensional simulation of quasi-particle structures in nano-scaled superconductors”, *J. Phys. Chem. Solids*, in press

「大阪府立大・林」グループ

- 6.1. N. Hayashi, Y. Nagai, and Y. Higashi, “Analysis of field-angle dependent specific heat in unconventional superconductors: a comparison between Doppler-shift method and Kramer-Pesch approximation”, *Physica C* 470 (2010) S865-S867. (DOI:10.1016/j.physc.2009.10.045)
- 6.2. H. Kaneyasu, N. Hayashi, B. Gut, K. Makoshi, and M. Sigrist, “Phase transition in the 3-Kelvin phase of eutectic $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$ ”, *J. Phys. Soc. Jpn.* 79 (2010) 104705 [6 pages]. (DOI: 10.1143/JPSJ.79.104705)
- 6.3. Y. Nagai, N. Hayashi, and M. Machida, “Surface-angle dependence of the tunneling spectroscopy in iron-based superconductors: sign-reversing s-wave scenarios”, *Physica C* 470, S504-S505 (2010). (DOI: 10.1016/j.physc.2009.10.043)

「産総研・柳澤」グループ

- 7.1. S. Kawabata and Y. Asano, "Theory of quantum transport in Josephson junctions with a ferromagnetic insulator", *Low Temp. Phys.* Vol. 36, pp.1143-1148, 2010.
- 7.2. S. Kawabata, H. Kashiwaya, and S. Kashiwaya, "Effect of Strong Coupling on Collective Macroscopic Quantum Tunneling in Intrinsic Josephson Junctions", *Physica C* vol. 470, pp. S848-S850, 2010.
- 7.3. S. Kawabata, S. Kashiwaya, Y. Tanaka, A. A Golubov and Y. Asano, "A tunneling

- Hamiltonian theory of 0- π transition in d-wave superconductor /ferromagnetic-insulator heterostructures", *Journal of Physics: Conference Series* vol. 248, p. 012039, 2010.
- 7.4. S. Kawabata, Y. Asano, Y. Tanaka, A. A. Golubov, and S. Kashiwaya, "Thermally induced 0- π phase transition in Josephson junctions through a ferromagnetic oxide film", *Physica C* vol. 470, pp. 1496-1498, 2010.
 - 7.5. A. S. Vasenko, S. Kawabata, A. A. Golubov, and F. W. J. Hekking, "Dissipative current in SIFS Josephson junctions", *Physica C* 470, 863-866, 2010.
 - 7.6. H. Kashiwaya, T. Matsumoto, H. Shibata, H. Eisaki, Y. Yoshida, S. Kawabata, and S. Kashiwaya, "Multi-junction switching in Bi₂Sr_{1.6}La_{0.4}CuO_{6+ δ} intrinsic Josephson junctions", *Appl. Phys. Exp.* 3, p. 043101, 2010.
 - 7.7. S. Koikegami and T. Yanagisawa, "Three-Dimensional Multi-Band d-p Model of Superconductivity in Spin-Chain Ladder Cuprate", *Journal of the Physical Society of Japan* vol. 79, p. 064701, 2010.
 - 7.8. T. Yanagisawa, "Kosterlitz-Thouless transition in the two-dimensional Hubbard model evidenced by Quantum Monte Carlo calculations of susceptibility", *Journal of the Physical Society of Japan* vol. 79, p. 063708, 2010.
 - 7.9. T. Yanagisawa, K. Odagiri, K. Yamaji, I. Hase et al., "Reply to Comment on 'Isotope Effect in Multi-Band and Multi-Channel Attractive Systems and Inverse Isotope Effect in Iron-Based Superconductor'", *Journal of the Physical Society of Japan* vol. 79, p. 126002, 2010.
 - 7.10. Y. Tanaka and T. Yanagisawa, "Chiral Ground State in Three-Band Superconductors", *Journal of the Physical Society of Japan* vol. 79, p. 114706, 2010.
 - 7.11. Y. Tanaka and T. Yanagisawa, "Chiral State in Three-Gap Superconductors", *Solid State Communications* vol. 150, Pp.1980-1984, 2010.
 - 7.12. I. Hase and T. Yanagisawa, "Effect of the Distortion of FeX₄ (X=P, AS) Tetrahedron for the Electronic Structure of Iron-Pnictide System", *Physica C* vol. 470, pp. 538-542, 2010.
 - 7.13. K. Yamaji, T. Yanagisawa and I. Hase, "3-Band Theory of Fe Pnictide Superconductors", *Physica C* vol. 470, pp. 1060-1063, 2010.
 - 7.14. M. Miyazaki, K. Yamaji, T. Yanagisawa and R. Kadono, "Coexistence between Checkerboard Charge and Striped Spin in the Two-Dimensional Hubbard Model", *Physica C* vol. 470, pp. 5919-5923, 2010.
 - 7.15. 岡林潤、近藤剛、千葉大地、野崎隆行、清水大雅、川畑史郎、秋永広幸, "磁性・スピントロニクス", *応用物理* Vol. 79 No. 8, pp.720-722, 2010.

- 7.16. K. Yamaji, T. Yanagisawa, M. Miyazaki, R. Kadono, “Superconducting Condensation Energy of the 2D Hubbard Model with $U=6t$ and $t'=-2t$ ”, $t''=-0.25t$ ”, Physica C (accepted).
- 7.17. T. Yanagisawa, Y. Tanaka, I. Hase and K. Yamaji, “Ginzburg-Landau Theory of Multi-Band Superconductivity and Applications to Fe Pnictides”, Physica C (accepted).
- 7.18. I. Hase and T. Yanagisawa, “Electronic structure of LaF_2X_2 ($\text{X}=\text{Ge}, \text{Si}$)”, Physica C (accepted).
- 7.19. Y. Chizaki, H. Kashiwaya, S. Kashiwaya, T. Koyama, and S. Kawabata, "Macroscopic quantum tunneling induced by a spontaneous field in intrinsic Josephson junctions", Physica C, 2011 (accepted).
- 7.20. S. Kawabata, Y. Tanaka, A. A. Golubov, A. S. Vasenko, S. Kashiwaya, and Y. Asano, "Tunneling Hamiltonian description of the atomic-scale $0-\pi$ transition in superconductor/ferromagnetic-insulator junctions", Physica C, 2011 (accepted).
- 7.21. S. Kawabata and Y. Asano, " Atomic scale $0-\pi$ transition in a high- T_c superconductor / ferromagnetic-insulator / high- T_c superconductor Josephson junction", Physica E vol. 43, pp. 722-725, 2011.
- 7.22. Y. Tanaka, T. Yanagisawa, A. Crisan, P. M. Shirage, A. Iyo, K. Tokiwa, T. Nishio, A. Sandaresan, N. Terada, “Domains in multi-band superconductors”, Physica C, 2011 (accepted).