

報告番号	甲 第 14044 号
------	-------------

主 論 文 の 要 旨

論文題目 トポロジカル物質における輸送現象の理論
(Theory of transport in Topological
Materials)

氏 名 大島 大介

論 文 内 容 の 要 旨

近年、物質科学に数学のトポロジーの考えが導入されるようになった。トポロジーでは切ったり、貼ったりすることなく連続変形で移り変わることでできるもの同士を同相と見なす。例を挙げると、湯飲みは球と同相である。また、マグカップはトーラスと同相である。このようにトポロジーにおいて形の詳細は重要では無い。ここで重要になるのが、連続変形をしても変化しない量“トポロジカル不変量”である。このようなトポロジカル不変量の例としては穴の数や面の数が挙げられる。先の湯飲みとマグカップの例では湯飲みが穴の数が0個の相、マグカップが穴の数が1個の相としてトポロジカル不変量で分類される。物質系のハミルトニアンを一種の形を持つものと見なすことで、このトポロジーの考えが物質科学の分野に導入された。その結果として、物質内部は絶縁体であるにもかかわらず、表面は金属的なトポロジカル絶縁体と呼ばれるトポロジカルに非自明な絶縁体の発見に至った。近年では、絶縁体におけるトポロジーの議論が拡張されトポロジカル半金属やトポロジカル超伝導体などの新たなトポロジカル物質の発見に繋がっている。

本論文は近年注目されているトポロジカルに非自明な物質・系及びそれに関連する系の輸送現象に関する自身の研究成果[1-4]をまとめたものである。本論文の構成は以下の通りである。

第1章では、研究全体の背景としてトポロジカル物質について理解するために必要な事項を紹介する。まず、最初に一般的な超伝導についての基礎事項を紹介する。次に相対論的な方程式であるディラック方程式とそこから導かれるスピン軌道相互作用について紹介する。最後にトポロジカル物質について紹介する。

第2章ではラシュバ型スピン軌道相互作用(RSOC)とゼーマン磁場の共存する二次元電子系の電子状態と電気伝導に関係について研究成果をまとめる[1,2]。近年、人工的にトポロジカル超伝導を実現しようとする試みがある。その一つとして、Sauらによってトポロジカル超伝導を実現する系としてRSOCとゼーマン磁場の共存する系に超伝導体を接合した系が提案された[5]。これ以降スピン軌道相互作用とゼーマン磁場の共存する系がトポロジカル超伝導を実現するプラットフォームとして注目されるようになった。これらの系はトポロジカル超伝導を実現するプラットフォームとしてだけでなく、それ単独で興味深い系である。スピン軌道相互作用を持つ系ではスピン軌道相互作用に起因してバンド分裂や、電子のスピンが運動量に依存するスピン-運動量ロッキングが生じる。その結果、フェルミ準位に依存して波数空間中のスピン構造[図1]や状態密度のエネルギー依存性の異なる複数の電子状態が生じる。また、ゼーマン磁場によってエネルギーギャップが開くことによってスピンの自由度が半分になった特殊な電子状態が現れる。

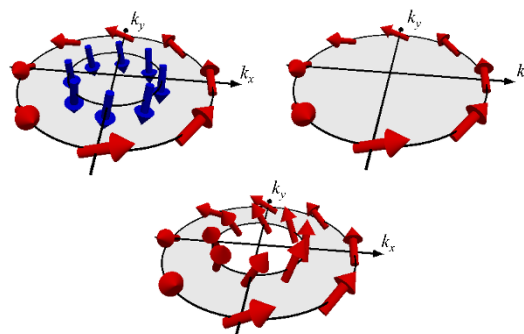


図1 RSOCとゼーマン磁場の共存する系で現れる複数の電子状態を持つ波数空間中におけるスピン構造 [自身の論文[1,2]より転載]。灰色の領域は占有状態を表す。

これらの電子状態の違いが電気伝導にどのような影響を及ぼすかは自明ではない。そこで接合系においてゲート電圧を用いて電子状態を変えることでコンダクタンスがどのように変化するかを計算した。その際、RSOCとゼーマン磁場の共存する系の波動関数がゼーマン磁場により生じるギャップ内で変化することを発見した。この変化を踏まえないと正しくコンダクタンスを計算することが出来ない。この波動関数の変化はエネルギーと波数の二乗の分散関係を考慮することで理解できることを明らかにした。また、コンダクタンスにRSOCとゼーマン磁場の共存する系の状態密度のエネルギー依存性とエネルギーに対するフェルミ面の非単調な変化が反映されていることを明らかにした。

第3章ではトポロジカルディラック半金属(TDSM)におけるスピンホール効果に関する研究成果をまとめる[3]。一般に自由電子系ではエネルギーは波数の二乗に比例することがよく知られている。一方、トポロジカル絶縁体表面やグラフェンでは、エネルギーが波数に比例した分散関係を持つことが知られている。この線形分散はディラックコーンと呼ばれ、電子はシュレディンガー方程式ではなく、相対論的な方程式であるディラック方程式に従うと期待されている。従来ディラックコーンはトポロジカル絶縁体表面やグラフェンといった二次元系でのみ見られたが、近年バルクにディラックコーンが対になって現れる三次元物質としてTDSMが発見され、注目されている。TDSMについて様々な電磁気学的応答が調べられてきたおり、その一つとしてBurkovとKimによってスピンホール効果が調べ

られた。スピンホール効果とは非磁性物質に外部電場を印加すると電場に対し垂直方向にスピンの流れであるスピン流が生成される現象である。この現象の強さを表す量としてスピンホールコンダクタンス(SHC)を定義することができる。Burkov と Kim は TDSM のモデルをフェルミ準位上のディラック点近傍で線形近似したモデル[図 2(b-1)]を用いて低温極限で SHC を計算した。その結果として SHC がディラック点間の距離に比例することを示した[図 2(b-2)] [6]。

このような計算が行われた背景には低温極限ではフェルミ準位近傍のみが物理量に寄与するという暗黙の期待がある。しかし、量子ホール効果に見られるように、物理量にフェルミ準位近傍以外からの寄与がある場合が存在する[7]。そのため、Burkov と Kim の線形近似が正しいかは明らかでない。本研究では TDSM のフェルミ準位近傍以外からの寄与も考慮するために、格子モデル[図 2(a-1)]から SHC の計算を行った。その結果として、先行研究と定性的に同じパラメータ依存性を示すパラメータ領域が存在する一方、先行研究とは異なるパラメータ依存性を示す領域があることを明らかにした[図 2(a-2)]。また、異なるパラメータ依存性を示す場合にはエネルギーギャップの開いたディラックコーンが生じており、このディラックコーンがパラメータ依存性を変化させることを明らかにした。このギャップの開いたディラックコーンが現れることは、TDSM の持つトポロジカル不変量であるミラーチャーン数の変化と対応しており、TDSM の SHC のパラメータ依存性の変化はミラーチャーン数の値の変化に対応したものであることを明らかにした。ミラーチャーン数はフェルミ準位近傍だけでなく、系全体で決まる量なので、先行研究で得られた SHC のパラメータ依存性のとの差異は線形近似モデルでフェルミ準位近傍以外を無視したことによって生じたと言える[3]。

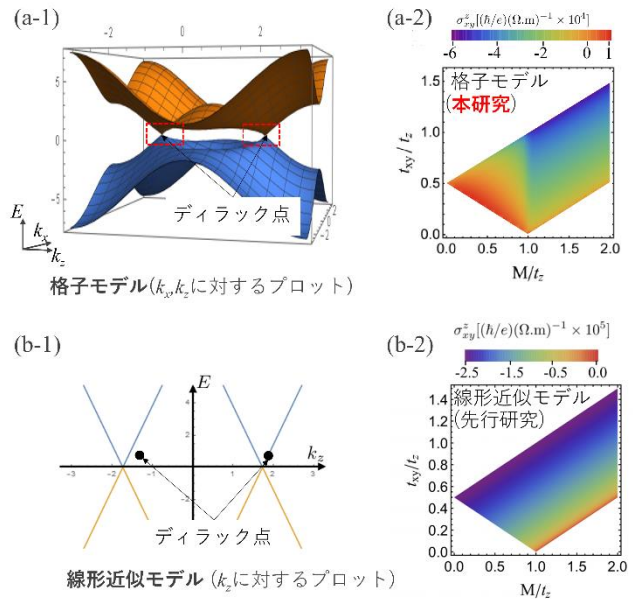


図 2 (a-1) TDSM の格子モデルのバンド構造。(a-2) 格子モデルでの SHC の計算結果。(b-1) TDSM の格子モデルをディラック点近傍で線形近似したモデルのバンド構造。(b-2) 線形近似したモデルで計算した TDSM の SHC。(a-2),(b-2)で SHC のパラメータ依存性が定性的に異なるパラメータ領域が存在する。[(a-2),(b-2)は自身の論文[3]より転載。]

第 4 章では三次元トポロジカルジョセフソン接合におけるフラットバンドゼロエネルギー状態についての研究成果をまとめる[4]。トポロジカルに非自明な絶縁体と同様にトポロ

ジカル超伝導体も表面に状態(エッジ状態)を持つ。このエッジ状態にもいくつかの種類があることが分かっている。それらのエッジ状態の中でもスピン三重項 p_x 波超伝導体などで見られるフラットバンドゼロエネルギー状態はフェルミ準位に高い縮退度を持つ。そのため、フラットバンドゼロエネルギー状態を持つ超伝導体においては低エネルギーの電磁気学的応答が劇的になることが期待される。しかし、現在 p_x 波超伝導体の確固たる候補物質はない。この候補物質の不足に対し、人工的な p_x 波超伝導体を作り出す提案が複数行われている[8,9]。しかし、これらの人工的な p_x 波超伝導体は①トポロジカル超伝導を実現するためにペアポテンシャルに比べ強いゼーマン磁場が必要である、②面直方向の対称性の破れに起因して生じるRSOCがフラットバンドゼロエネルギー状態を壊す[9]という二つの問題点を持つ。しかし、①の問題点については近年、解決策として二次元のトポロジカルジョセフソン接合が提案された。この系では、位相差に依存した束縛状態に着目することで、弱いゼーマン磁場でトポロジカル超伝導が実現する[10]。

本研究では①,②の問題を解消すべく、人工的な p_x 波超伝導体である図3(a)の系[8]とトポロジカルジョセフソン接合のアイデアを組み合わせ

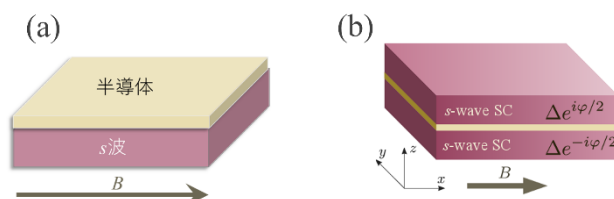


図3(b)の三次元のトポロジカルジョセフソン接合を提案した。この系ではトポロジカルジョセフソン接合の性質として弱いゼーマン磁場でトポロジカル超伝導が実現するだけでなく、トポロジカル超伝導の実現する半導体薄膜近傍では面直方向の対称性が保たれているため、フラットバンドゼロエネルギー状態を壊すRSOCも十分小さくなると期待される。そこで本研究では図3(b)の系においてフラットバンドゼロエネルギー状態が現れるかを明らかにするため、局所状態密度を数値的に計算した。その結果として、確かに弱いゼーマン磁場を印加することでエッジ状態としてフラットバンドゼロエネルギー状態が現れることが明らかになった。

図3 (a) 人工的な p_x 波超伝導体の例。(b) 本研究で提案する三次元のトポロジカルジョセフソン接合[自身の論文[4]より転載]。B はゼーマン磁場。半導体には一軸的なスピン軌道相互作用が働いている。半導体の部分でトポロジカル超伝導が実現している。

第5章は論文全体のまとめを行う。本論文ではトポロジカル物質とそれに関連する系における輸送現象の研究を行った。第2章ではラシュバ型スピン軌道相互作用とゼーマン磁場の共存する系の波動関数の関数形はバンド構造からでは自明でなく、数学的構造を考慮することで初めて分かるものだった。また、第3章ではトポロジカルディラック半金属におけるスピンホールコンダクタンスのパラメータ依存性の変化を、第4章では三次元のトポロジカルジョセフソン接合においてフラットバンドゼロエネルギー状態が現れることを明らかにした。これらもまたバンド構造からは自明でなく、系の持つ数学的構造から導かれる現象であった。

参考文献

- [1] **D. Oshima**, K. Taguchi, and Y. Tanaka, J. Phys. Soc. Jpn., **87**, 034710 (2018)
- [2] **D. Oshima**, K. Taguchi, and Y. Tanaka, Physica E, **114**, 113615 (2019)
- [3] K. Taguchi, **D. Oshima**, Y. Yamaguchi, T. Hashimoto, Y. Tanaka, and M. Sato, Phys. Rev. B, **101**, 235201 (2020)
- [4] **D. Oshima**, S. Ikegaya, A. P. Schnyder, and Y. Tanaka, arXiv:2111.03880 (Phys. Rev. Research に投稿中)
- [5] J. D. Sau, R. M. Lutchyn, S. Tewari, and S. D. Sarma, Phys. Rev. Lett., **104**, 040502 (2010)
- [6] A. Burkov and Y. B. Kim, Phys. Rev. Lett. **117**, 136602(2016)
- [7] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett., **49**, 405 (1982)
- [8] J. Alicea, Phys. Rev. B, **81**, 125318 (2010)
- [9] C. Wong, J. Liu, K. T. Law, and P. A. Lee, Phys. Rev. B, **88**, 060504 (2013)
- [10] F. Pientka, A. Keselman, E. Berg, A. Yacoby, A. Stern, and B. I. Halperin, Phys. Rev. X, **7**, 021032 (2017)