

令和3年度 博士論文

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

名古屋大学大学院工学研究科
応用物理学専攻

田仲・川口研究室

学生番号 481921009

氏名 大島 大介

目次

本論文の要旨	4
第 1 章 研究の背景	6
1.1 超伝導	6
1.1.1 BCS ハミルトニアン	6
1.1.2 超伝導ペアポテンシャル	8
1.1.3 超伝導接合での物理	10
1.2 相対論的な効果	13
1.2.1 ディラック方程式	13
1.2.2 スピン軌道相互作用	15
1.3 物質科学とトポロジー	18
1.3.1 トポロジカル物質	18
1.3.2 トポロジカル超伝導	21
第 2 章 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電子状態と電気伝導の関係	22
2.1 本研究の背景	22
2.2 本研究の目的	23
2.3 バンド構造と各電子状態	24
2.4 コンダクタンスの計算方法	25
2.5 電子状態とコンダクタンスの関係	28
2.6 考察: コンダクタンスの増加について	33
2.7 第 2 章まとめ	36
第 3 章 トポロジカルディラック半金属におけるスピンホール効果	37
3.1 本研究の背景	37
3.2 本研究の目的	38
3.3 格子モデルとその特徴	39
3.4 スピンホールコンダクタンスの計算方法	41
3.5 線形近似モデルで計算したスピンホールコンダクタンス	43
3.6 格子モデルで計算したスピンホールコンダクタンス	44
3.7 考察: $M/t_z = 1$ を境にスピンホールコンダクタンスのパラメータ依存性が変化する理由	45
3.8 第 3 章まとめ	47

第 4 章	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	48
4.1	本研究の背景	48
4.2	本研究の目的	50
4.3	半導体薄膜近傍を記述する有効ハミルトニアン の 導 出	51
4.4	対称性とトポロジカル不変量	53
4.5	局所状態密度の数値計算方法	55
4.6	局所状態密度の数値計算結果	56
4.7	考察: $H_{\delta t}$ でカイラル対称性を破った場合に生じるフラットバンドの由来	61
4.8	第 4 章まとめ	62
第 5 章	全体のまとめ	63
論文リスト		64
謝辞		65
付録 1-1:	グリーン関数を用いた 2 次元 FRM の状態密度の導出	66
付録 2-1:	スピンホールコンダクタンスの導出	68
付録 2-2:	トポロジカルディラック半金属のエッジ状態	69
付録 3-1:	束縛状態の波動関数の導出	70
付録 3-2:	巻きつき数の計算方法	71
参考文献		72

本論文の要旨

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に移り変わることでできるモノ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 [自身の論文 [1],[2],[3],[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。なお、自身の論文の番号については論文リストの番号を参照のこと。

第1章では、研究全体の背景としてトポロジカル物質に関する基礎事項を紹介する。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の関係について研究成果をまとめる [自身の論文 [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 [99]。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で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。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 [自身の論文 [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、粒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ており、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 [25]。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 [25]。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 [124]。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。また、異なるパラメータ依存性を示す場合で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ェ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ェ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。

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 [自身の論文 [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 [5, 134]。しかし、これらの人工的な p_x 波超伝導体は (I) 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、(II) 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 [134] という二つの問題点を持つ。しかし、(II) 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 [89]。本研究では (I),(II) の問題を解消すべく、二次元のトポロジカルジョセフソン接合のアイデアを拡張し、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領域の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。

第 5 章は論文全体のまとめを行う。

第 1 章

研究の背景

研究全体の背景としてトポロジカル物質に関する基礎事項を紹介する。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し、最後にトポロジカル物質について紹介する。

1.1 超伝導

1911 年に Kamerling · Onnes によって、水銀において電気抵抗値が 4.2K 以下でゼロになる現象が発見された。また、1933 年には Meissner と Ochsenfeld によって超伝導体は外部磁場を印加すると、その磁場を排斥する完全反磁性を示すこと (マイスナー効果) が発見された。この抵抗値がゼロになる現象とマイスナー効果の二つの現象は、今日超伝導体と呼ばれる物質の示す重要な性質として知られている。この超伝導体の発現機構は 1957 年に Bardeen, Cooper, Schrieffer によって作られた BCS 理論によって初めて示された [17]。その後、1987 年に BCS 理論の想定を超える転移温度を持つ銅酸化物超伝導体が、2008 年には鉄系超伝導体が発見された。これらの超伝導体の発現機構は BCS 理論では説明することが出来ず、現在も研究が行われている。この節では超伝導体を特徴づける量である超伝導ペアポテンシャルの導入と超伝導体との接合で見られる現象の紹介を行う。

1.1.1 BCS ハミルトニアン

超伝導状態は二つの電子がクーパー対と呼ばれる電子対を形成し、クーパー対がボーズ凝縮することにより引き起こされる。Bardeen, Cooper, Schrieffer はこのクーパー対の形成がフォノンを介した電子格子相互作用によって電子間に引力相互作用が生じることで起こると説明した [17]。ここでは特に電子格子相互作用によってどのように引力相互作用が生じるかという点には立ち入らず、引力相互作用が存在するという仮定の下で超伝導ペアポテンシャルの導入を行う。また、超伝導ペアポテンシャルによってクーパー対が形成される際に準粒子励起バンドに超伝導ギャップが開くことを示す。

二電子間の相互作用を表すハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma, \sigma'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma, \sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}', \sigma'} c_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (1.1)$$

のように書き表される。ここで \mathbf{k} , \mathbf{k}' は電子の波数、 \mathbf{q} はフォノン波数、 $c_{\mathbf{k}, \sigma}^{(\dagger)}$ は波数 \mathbf{k} 、スピン σ の電子の消滅 (生成) 演算子、 $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ は準粒子のエネルギー、 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ は電子の運動エネルギー、 μ は化学ポテンシャル、 $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma, \sigma'}$ は二電子間の相互作用である。BCS 理論ではこの電子間相互作用 $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma, \sigma'}$ は電子格子相互作用に起因する引力であり、 $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma, \sigma'} = -g$ ($g > 0$) のように波数 \mathbf{q} に依存せず、また波数とスピンの向きが互いに逆の電子間に働くものと仮定す

る。この仮定の下で式 (1.1) は

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} - g \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \quad (1.2)$$

となる。式 (1.2) の第二項は四体相互作用であるので一般に解くことは出来ない。そこで式 (1.2) の第二項の中の $c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger}$ と $c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow}$ を

$$c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} = \langle c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle + \delta(c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger}), \quad (1.3)$$

$$c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} = \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle + \delta(c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow}) \quad (1.4)$$

のように平均場 $\langle c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle$, $\langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle$ と平均場まわりでの揺らぎ

$$\delta(c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger}) = c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} - \langle c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle, \quad (1.5)$$

$$\delta(c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow}) = c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} - \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle \quad (1.6)$$

を用いて書き直すと式 (1.2) は

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} - g \sum_{\mathbf{k}} [\langle c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle + \delta(c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger})] [\langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle + \delta(c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow})] \quad (1.7)$$

となる。ここで平均場まわりの揺らぎの項同士の積は十分小さいとして無視すると式 (1.7) は

$$\check{H} \sim \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} - g \sum_{\mathbf{k}} [\langle c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle + \langle c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle \delta(c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow}) + \delta(c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger}) \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle] \quad (1.8)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} + g \sum_{\mathbf{k}} [\langle c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} - c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle] \quad (1.9)$$

と近似される [146, 148]。ここで超伝導ペアポテンシャル Δ を

$$\Delta \equiv -g \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \downarrow} \rangle \quad (1.10)$$

のように導入すると式 (1.9) は

$$\check{H}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} + \Delta \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} + \Delta^* \sum_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} + \frac{|\Delta|^2}{g} \quad (1.11)$$

となる。式 (1.11) は行列の形で書くと

$$\check{H}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} & c_{-\mathbf{k}, \downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \Delta \\ \Delta^* & -\xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} + \text{const.} \quad (1.12)$$

となる。このハミルトニアンを対角化するために以下の式 (1.13) のようにボゴリューボフ変換を行い、電子の演算子 $c_{\mathbf{k}, \sigma}^{(\dagger)}$ からボゴリューボフ準粒子の演算子 $\alpha_{\mathbf{k}, \sigma}^{(\dagger)}$ に基底を変換する。

$$\begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} e^{-i\theta} \\ v_{\mathbf{k}} e^{i\theta} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}, \uparrow} \\ \alpha_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

θ は $\Delta = \Delta_0 e^{i\theta}$ を満たす。また、 $u_{\mathbf{k}}$ と $v_{\mathbf{k}}$ は

$$u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)}, \quad v_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)} \quad (1.14)$$

で与えられ、 $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ を満たす。 $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_0^2}$ である。このように基底を変換することで

$$\check{H}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \\ \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \text{const.} \quad (1.15)$$

のように対角化され、準粒子のエネルギー固有値として $\pm E_{\mathbf{k}}$ を得る。ここで準粒子のエネルギー固有値の分散は超伝導ペアポテンシャルによって $2\Delta_0$ の大きさのエネルギーギャップを持つ [146]。

1.1.2 超伝導ペアポテンシャル

BCS 理論では相互作用 $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\sigma,\sigma'}$ が波数 \mathbf{q} に依存せず、波数とスピンの向きが互いに逆の電子間に働くものと仮定した。その結果として式 (1.10) のような波数とスピンに依存しない超伝導ペアポテンシャルを得た。しかし、実際には波数とスピンに依存した超伝導ペアポテンシャルも考えることが出来る。式 (1.10) に波数とスピンの自由度を取り入れて一般化をすると

$$\Delta_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k}) \equiv \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle c_{\mathbf{k}',\sigma} c_{-\mathbf{k}',\sigma'} \rangle \quad (1.16)$$

となる。式 (1.12) も同様に一般化すると

$$\check{H}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k},\uparrow} & c_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} \hat{\sigma}_0 & \hat{\Delta}(\mathbf{k}) \\ -\Delta^*(-\mathbf{k}) & -\xi_{\mathbf{k}} \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{\mathbf{k},\downarrow} \\ c_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \text{const.} \quad (1.17)$$

となる。ここで行列 $\hat{\Delta}(\mathbf{k})$ は

$$\hat{\Delta}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \Delta_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) & \Delta_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \\ \Delta_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) & \Delta_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \quad (1.18)$$

で与えられる。ここでフェルミ粒子の反交換関係 $\langle c_{\mathbf{k}',\sigma} c_{-\mathbf{k}',\sigma'} \rangle = -\langle c_{-\mathbf{k}',\sigma'} c_{\mathbf{k}',\sigma} \rangle$ を満たす必要があるので、行列 $\hat{\Delta}(\mathbf{k})$ について式 (1.19) が成り立つ。

$$\begin{bmatrix} \Delta_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) & \Delta_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \\ \Delta_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) & \Delta_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\Delta_{\uparrow\uparrow}(-\mathbf{k}) & -\Delta_{\uparrow\downarrow}(-\mathbf{k}) \\ -\Delta_{\downarrow\uparrow}(-\mathbf{k}) & -\Delta_{\downarrow\downarrow}(-\mathbf{k}) \end{bmatrix}. \quad (1.19)$$

この関係式からペアポテンシャルが波数 \mathbf{k} について偶関数即ち $\hat{\Delta}(\mathbf{k}) = \hat{\Delta}(-\mathbf{k})$ であれば

$$\Delta_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) = \Delta_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}) = 0, \quad (1.20)$$

$$\Delta_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) = -\Delta_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) \quad (1.21)$$

が成り立つ。式 (1.21) より、ペアポテンシャルの符号がスピンの入れ替えに対して反転するため、クーパー対のスピンの対称性はスピン一重項であることが分かる。一方、ペアポテンシャルが波数 \mathbf{k} について奇関数即ち $\hat{\Delta}(\mathbf{k}) = -\hat{\Delta}(-\mathbf{k})$ の場合は

$$\Delta_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) = \Delta_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) \quad (1.22)$$

が成り立つ。式 (1.22) より、ペアポテンシャルはスピンの入れ替えに対して符号を変えないため、クーパー対のスピンの対称性はスピン三重項であることが分かる [143]。このようにクーパー対はスピン一重項とスピン三重項に分けられるが、これらはクーパー対の軌道角運動量 l によって更にスピン一重項 s 波 ($l = 0$)、スピン三重項 p 波 ($l = 1$)、スピン一重項 d 波 ($l = 2$)、スピン三重項 f 波 ($l = 3$) のように分類される [図 1.1]。BCS ハミルトニアン節で取り扱ったペアポテンシャルはスピン一重項 s 波である。

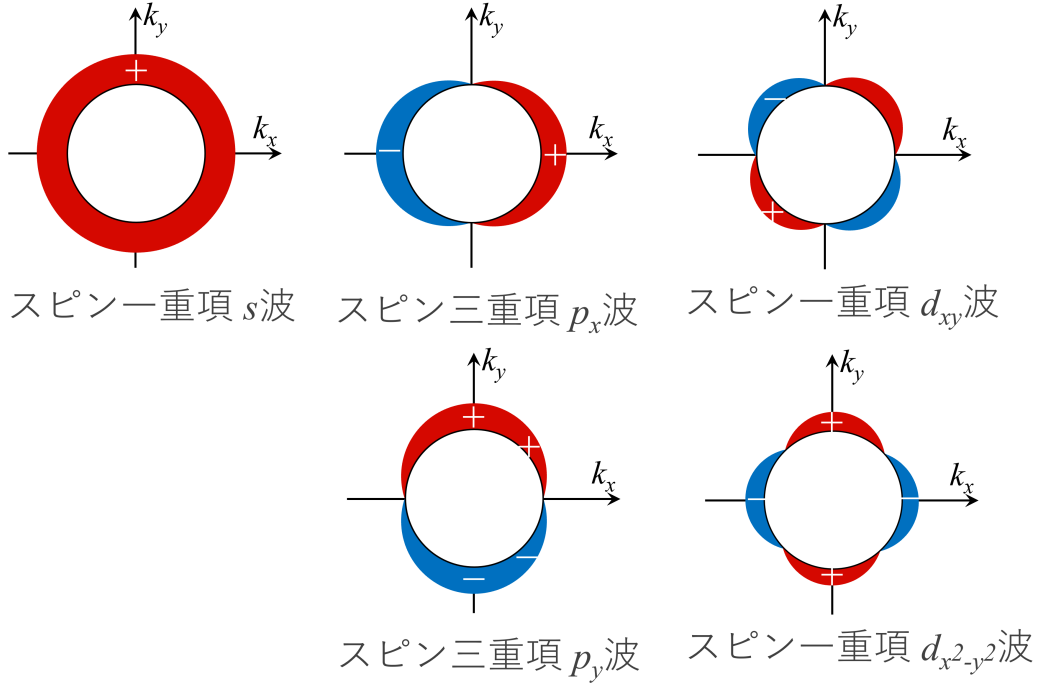


図 1.1 ペアポテンシャルの例。図中の赤と青で色を塗ってある領域はそれぞれペアポテンシャルの符号が正、負の領域。スピン一重項 s 波はペアポテンシャルが波数に依らず一定。スピン三重項 $p_{x(y)}$ 波はペアポテンシャルが波数 $k_x(y)$ に比例する。スピン一重項 d_{xy} 波はペアポテンシャルが $k_x k_y$ に、 $d_{x^2-y^2}$ 波は $k_x^2 - k_y^2$ に比例する [104]。 p_x 波や p_y 波、 d_{xy} 波、 $d_{x^2-y^2}$ 波はペアポテンシャルの符号が変わる "ノード" を点で持つ。

以上の結果を改めて書き直すとペアポテンシャルが波数 \mathbf{k} について偶関数の場合は

$$\hat{\Delta}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} 0 & \psi(\mathbf{k}) \\ -\psi(\mathbf{k}) & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.23)$$

奇関数の場合は \mathbf{d} というベクトルを導入して

$$\hat{\Delta}(\mathbf{k}) = i\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\sigma} \hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} -d_x + id_y & d_z \\ d_z & d_x + id_y \end{bmatrix}, \quad (1.24)$$

のように表される [104]。それぞれの場合についてこれまでと同様に式 (1.17) を対角化するとエネルギー固有値として $\pm E_{\mathbf{k}\pm}$ を得る。 $E_{\mathbf{k}\pm}$ は波数 \mathbf{k} について偶関数の場合

$$E_{\mathbf{k}+} = E_{\mathbf{k}-} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\psi(\mathbf{k})|^2}, \quad (1.25)$$

奇関数の場合は

$$E_{\mathbf{k}\pm} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \pm |\mathbf{q}(\mathbf{k})|} \quad (1.26)$$

となる。ただし、 $\mathbf{q}(\mathbf{k}) = i\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \mathbf{d}^*(\mathbf{k})$ である [104, 148]。先に導入した s 波の超伝導ペアポテンシャルの場合はペアポテンシャルが波数に依存せず定数であったため完全にギャップが開くが、スピン三重項 p_x 波やスピン一重項 d_{xy} 波などノード点 (ペアポテンシャルの符号が変わる点、ノード点でペアポテンシャルがゼロになる) を持つ超伝導ペアポテンシャルを持つ場合、式 (1.25), (1.26) よりノード点でギャップが閉じ得る。

1.1.3 超伝導接合での物理

Bogoliubov-de Gennes 方程式

ここまでは均一な超伝導体に注目してきた。一方、不均一な超伝導体を記述する方程式として Bogoliubov-de Gennes (BdG) 方程式がある。これはシュレディンガー方程式を超伝導体について拡張したようなもので、超伝導接合の解析にもよく用いられる方程式である。ここではスピン-重項 s 波の場合を例に取り上げる。

場の演算子 $\Psi_\sigma(\mathbf{r})$ を用いて、相互作用のある電子系のハミルトニアンを書くと

$$\check{H} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \check{h}_0 \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}', t) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t) \quad (1.27)$$

となる。 \check{h}_0 は一体のハミルトニアン、 $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は位置 \mathbf{r} と \mathbf{r}' にある二つの電子間に働く相互作用である。ここで相互作用 $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ が同じ位置 \mathbf{r} のスピンの向きが互いに逆の電子間に働くと仮定すると式 (1.27) は

$$\check{H} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \check{h}_0 \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r} \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) g(\mathbf{r}) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \quad (1.28)$$

となる。ここで超伝導ペアポテンシャルを

$$\Delta(\mathbf{r}) = -g(\mathbf{r}) \langle \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (1.29)$$

と導入して、BCS ハミルトニアンの節と同様に平均場で近似すると

$$\check{H} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \check{h}_0 \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t) - \int d\mathbf{r} \left[\Delta(\mathbf{r}) \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) + \Delta^*(\mathbf{r}) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \right] + \text{const.} \quad (1.30)$$

となる。ここで場の演算子 Ψ_{σ}^{\dagger} はボゴリューボフ粒子の生成消滅演算子 $\alpha_{n, \sigma}^{\dagger}$ を用いて

$$\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) = \sum_n [\alpha_{n, \uparrow} u_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar} - \alpha_{n, \downarrow}^{\dagger} v_n^*(\mathbf{r}) e^{iE_n t/\hbar}] \quad (1.31)$$

$$\Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) = \sum_n [\alpha_{n, \uparrow} v_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar} + \alpha_{n, \downarrow}^{\dagger} u_n^*(\mathbf{r}) e^{iE_n t/\hbar}] \quad (1.32)$$

と表される [148]。 n は量子状態を表す。ここで、ハイゼンベルグ方程式は

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) &= [\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t), \check{H}] = \check{h}_0 \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) + \Delta(\mathbf{r}) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}, t), \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) &= [\Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}, t), \check{H}] = -\check{h}_0 \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) + \Delta^*(\mathbf{r}) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.33)$$

と与えられる。式 (1.33) に式 (1.31), (1.32) を代入して整理をすると最終的に以下の二つの式を得る。

$$\begin{aligned} E_n u_n(\mathbf{r}) &= \check{h}_0 u_n(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r}) v_n(\mathbf{r}), \\ E_n v_n^*(\mathbf{r}) &= -\check{h}_0 v_n^*(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.34)$$

これらの方程式を整理して行列の形で書くと

$$E \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \check{h}_0 & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -\check{h}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} \quad (1.35)$$

となる。これが BdG 方程式である。この BdG 方程式は電子のシュレディンガー方程式を超伝導に拡張したもので、 u_n が電子的準粒子の波動関数、 v_n がホールの準粒子の波動関数と見なせる。

アンドレーエフ反射

BdG 方程式を導出したので実際に BdG 方程式を用いて超伝導接合における波動関数を解析してみる。ここでは例として普通の常伝導体とスピン一重項 s 波の超伝導体の一次元の接合を考える。この系の BdG 方程式を

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \mu & \Delta(x) \\ \Delta^*(x) & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mu \end{pmatrix} \psi(x) = E\psi(x) \quad (1.36)$$

のように与える [146, 148]。ただし、 $\Delta(x) = \Delta_0 e^{i\theta} \theta(x)$ で、 Δ_0 は実数、 $\theta(x)$ は階段関数である。

この方程式の解として、常伝導体 ($x < 0$) の波動関数として以下の四つが与えられる。

$$\textcircled{1}. \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_+^N x}, \quad \textcircled{2}. \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-ik_-^N x}, \quad \textcircled{3}. \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ik_+^N x}, \quad \textcircled{4}. \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ik_-^N x}. \quad (1.37)$$

ただし、 $k_{\pm}^N = \sqrt{2m(\mu \pm E)/\hbar^2}$ である。 $\textcircled{1}$ が群速度が正の電子、 $\textcircled{2}$ が群速度が正のホール、 $\textcircled{3}$ が群速度が負の電子、 $\textcircled{4}$ が群速度が負のホールの波動関数である。一方、超伝導体 ($x > 0$) の波動関数としては以下の四つが与えられる。

$$\textcircled{1}'. \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} e^{ik_+^S x}, \quad \textcircled{2}'. \begin{pmatrix} v_0 \\ u_0 \end{pmatrix} e^{-ik_-^S x}, \quad \textcircled{3}'. \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} e^{-ik_+^S x}, \quad \textcircled{4}'. \begin{pmatrix} v_0 \\ u_0 \end{pmatrix} e^{ik_-^S x}. \quad (1.38)$$

ここで $k_{\pm}^S = \sqrt{2m(\mu \pm \Omega)/\hbar^2}$, $u_0 = \sqrt{\frac{1}{2}(1 + \Omega/E)}$, $v_0 = \sqrt{\frac{1}{2}(1 - \Omega/E)}$ である。ただし、 Ω は

$$\Omega = \begin{cases} \sqrt{E^2 - \Delta_0^2} & (E > \Delta_0) \\ i\sqrt{\Delta_0^2 - E^2} & (-\Delta_0 < E < \Delta_0) \\ -\sqrt{E^2 - \Delta_0^2} & (E < -\Delta_0) \end{cases} \quad (1.39)$$

である。 $\textcircled{1}'$ が群速度が正の電子的準粒子、 $\textcircled{2}'$ が群速度が正のホールの準粒子、 $\textcircled{3}'$ が群速度が負の電子的準粒子、 $\textcircled{4}'$ が群速度が負のホールの準粒子の波動関数である [148]。ここで常伝導体から電子が入射する場合の散乱過程を考えると、先ほど得た波動関数を用いて

$$\psi(x) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_+^N x} + a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ik_+^N x} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ik_-^N x} & (x < 0) \\ c \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} e^{ik_+^S x} + d \begin{pmatrix} v_0 \\ u_0 \end{pmatrix} e^{-ik_-^S x} & (x > 0) \end{cases} \quad (1.40)$$

と書き表される。 a, b は反射係数、 c, d は透過係数である。各係数を求めるためには接合界面 ($x = 0$) における接続条件

$$\begin{aligned} \psi(x)|_{x=-0}^{x=+0} &= 0 \\ \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=-0}^{x=+0} &= 0 \end{aligned} \quad (1.41)$$

を解く必要があるが、各係数は一般にゼロである必要はない。式 (1.40) と式 (1.41) を見てみると、超伝導体側の波動関数が必ず電子的成分とホールの成分を持つことの帰結として、常伝導体から電子を入射すると一般にホールの反射波が必要になることが直ちに分かる。

このように常伝導体から超伝導体に電子 (ホール) を入射した場合、ホール (電子) が反射波として戻る過程が存在する。これをアンドレーエフ反射と呼ぶ [7]。物理的な意味としては、常伝導体側から超伝導体へ電子が入射する際、超伝導体中ではクーパ対を形成した方がエネルギー的に安定になるため界面で電子を一つ奪いクーパ対を形成する [図 1.2(a)]。この電子を奪う際にホールが生成され、常伝導体側に反射されると理解することが出来る。

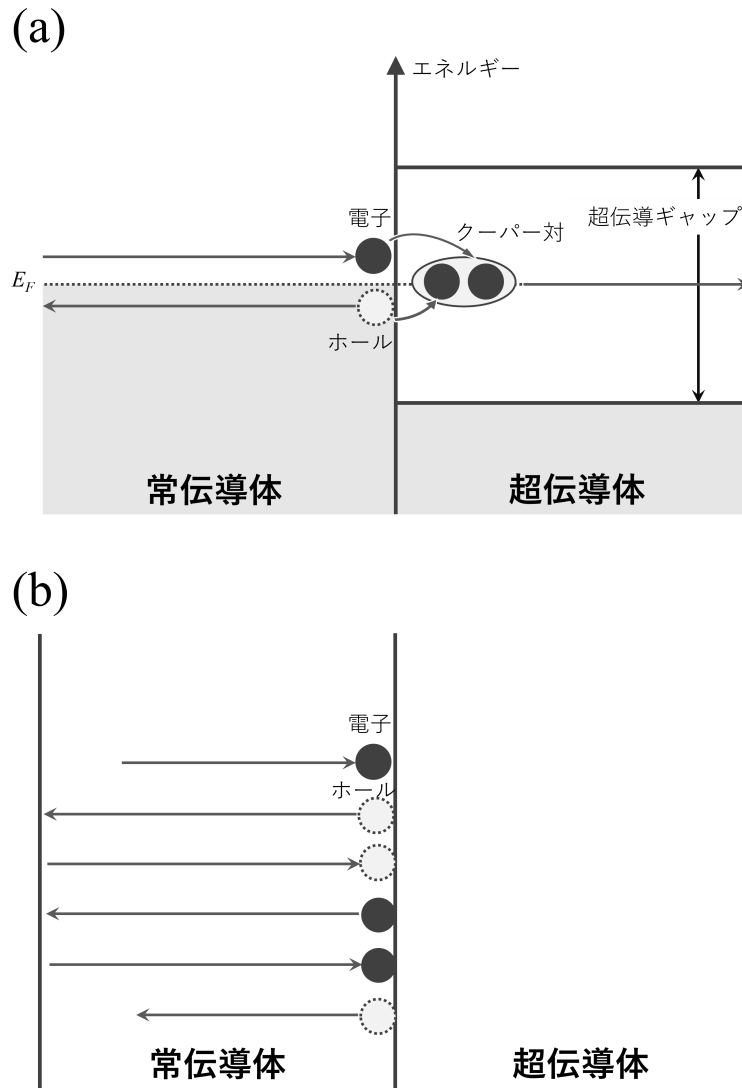


図 1.2 (a) アンドレーエフ反射の様子。超伝導体側でクーパー対を作るために、界面で電子を一つ奪う。その際生じるホールが反射波として戻ってくる。(b) 有限の幅を持つ常伝導体と超伝導体を接合した場合のアンドレーエフ反射の様子。常伝導体の端で更に反射が起こり、アンドレーエフ反射を繰り返す。結果として常伝導体中に定在波 (アンドレーエフ束縛状態) が形成される。

アンドレーエフ束縛状態

アンドレーエフ反射の節の例では常伝導体も超伝導体も半無限な系を考えた。では有限の幅を持つ常伝導体では何が起こるだろうか。常伝導体/超伝導体接合で先ほどと同様に常伝導体から超伝導体側に電子が入射する場合を考える。このとき、アンドレーエフ反射により常伝導体にはホールが戻ってくる。このホールは常伝導体の端で更に反射され、超伝導体側に入射する。その際、今度はアンドレーエフ反射によって常伝導体には電子が戻ってくる。これらの反射波が干渉することで定在波が生じる場合がある [図 1.2(b)]。この束縛状態は超伝導ギャップ内に存在し、アンドレーエフ束縛状態と呼ばれる [148]。

近接効果

常伝導体/超伝導体接合において見られる現象として近接効果も挙げる事が出来る。これは超伝導体から常伝導体にクーパー対が染み込む現象である。これによって常伝導体中にも超伝導ペアポテンシャルがあるかのように見える。このような現象を近接効果と呼ぶ。この現象は後の人工的なトポロジカル超伝導体の設計の際にも利用されている[32]。

1.2 相対論的な効果

グラフェンや後述のトポロジカル絶縁体ではエネルギーが波数の一次に比例する分散が見られる。この分散はディラックコーンと呼ばれ、そこでの粒子は相対論的な方程式であるディラック方程式に従うとされている。このような相対論的な物理はディラックコーン以外にも見ることが出来る。半導体分野ではスピン軌道相互作用と呼ばれる波数とスピン間の相互作用が長年注目されてきた。これはスピン軌道相互作用を介すことで電子のスピンを電場で制御できるためである。このスピン軌道相互作用も相対論から導かれる効果で、ディラック方程式から自然と導かれる。この節ではディラック方程式とスピン軌道相互作用について紹介する。

1.2.1 ディラック方程式

一般に自由電子モデルでは電子のエネルギー E と波数 k の間に $E \propto k^2$ となる分散関係があることがよく知られている。これはシュレディンガー方程式が

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.42)$$

のように書き表されるためである。ここで m は質量である。一方、グラフェンやトポロジカル絶縁体の表面 [135] あるいはディラック半金属などいくつかの系では $E \propto k$ となる分散関係を見ることが出来る。この線形分散はその形からディラックコーンと呼ばれる。この分散関係に従う粒子はディラック粒子と呼ばれ、相対論的な方程式であるディラック方程式に従う。

粒子の速度が光速に近い相対論的な領域では、粒子は非相対論的な関係式 $E = \mathbf{p}^2/2m$ (\mathbf{p} は運動量) ではなく

$$E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4 \quad (1.43)$$

に従う [145, 147, 149]。ただし、 c は光速である。式 (1.42) のシュレディンガー方程式が非相対論的な関係式 $E = \mathbf{p}^2/2m$ に対し、

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla \quad (1.44)$$

と置き換えることで得られたことを踏まえると、式 (1.43) からは

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \phi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.45)$$

となる方程式が得られる。式 (1.45) の方程式は提案者の名を取ってクライン-ゴールドン方程式と呼ばれ、非相対論的なシュレディンガー方程式を相対論的な方程式に拡張したものとして期待された [42, 66]。しかし、クライン-ゴールドン方程式の解 $\phi(\mathbf{r}, t)$ を波動関数と見なして、シュレディンガー方程式の場合と同様に確率密度 $P = |\phi(\mathbf{r}, t)|^2$ を定義すると P は連続方程式

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (1.46)$$

を満たさない。また、式 (1.46) を満たすような P を定義すると P の値は負の値を取るという問題が発生する。このクライン-ゴールドン方程式における問題に対しディラックは

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \check{H} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.47)$$

と式 (1.43) を満たすハミルトニアン \check{H} として

$$\check{H} = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}c + \beta mc^2 \quad (1.48)$$

を提案した。ただし、 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ で α_i と β は行列である。この $\boldsymbol{\alpha}$ 及び β は式 (1.43) を満たすために $\beta^2 = 1$ と以下の反交換関係を満たす [33, 149]。

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}, \quad \{\alpha_i, \beta\} = 0. \quad (1.49)$$

このような反交換関係を満たすために $\boldsymbol{\alpha}$ と β は 4×4 の行列である必要があることが分かっており、様々な取り方をすることが出来る。例えば

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3),$$

$$\alpha_1 = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_x & 0 \end{bmatrix}, \alpha_2 = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_y & 0 \end{bmatrix}, \alpha_3 = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_z \\ \hat{\sigma}_z & 0 \end{bmatrix}, \beta = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_0 & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_0 \end{bmatrix}$$

のように置くと上の関係式を満たす。 $\hat{\sigma}_i$ はパウリ行列

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.50)$$

である。以上からディラック方程式として

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + mc^2 \beta) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.51)$$

を得る。この方程式は 4×4 の行列方程式である。この方程式では式 (1.43) を満たすだけでなく、その解 $\psi(\mathbf{r}, t)$ を波動関数と見なしてもクライン-ゴールドン方程式のような問題は起こらない。

このようなディラックハミルトニアンと類似した有効ハミルトニアンは物質中でも見出すことが出来る。スピンに加え、軌道あるいは副格子の自由度を持つ系ではハミルトニアンは一般に以下のように 4×4 の行列の形で与えられる。

$$\check{H}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})I + \sigma_i R_i(\mathbf{k})\alpha_i + M(\mathbf{k})\beta \quad (1.52)$$

$R_i(\mathbf{k})$ は波数 \mathbf{k} についての関数である。このハミルトニアンの固有値は

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\sum_i R_i^2(\mathbf{k}) + M^2(\mathbf{k})} \quad (1.53)$$

で与えられる。仮に低エネルギー近傍で $R_i(\mathbf{k}) \sim v_F \hbar k_i$, $M(\mathbf{k}) \sim mv_F^2 \beta$ のように近似的に見なすことができるとすると式 (1.52) は以下のようにディラックハミルトニアンと同形になる [149]。

$$\check{H}(\mathbf{k}) = v_F \hbar \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha} + mv_F^2 \beta. \quad (1.54)$$

このハミルトニアンに対し線形のバンド分散が現れる。この線形のバンド分散をディラックコーンと呼ぶ。特に $mv_F^2 \beta$ は質量項と呼ばれる項でこの項がノンゼロの場合、ディラックコーンの間にエネルギーギャップが生じる。一方、質量項がない場合、 $\mathbf{k} = 0$ の一点で固有値 E_+ と E_- のディラックコーンが接し、ギャップレスになる [図 1.6]。このディラックコーンが接する点をディラック点と呼ぶ。

1.2.2 スピン軌道相互作用

半導体中や重い原子を持つ系では

$$\check{H}_{\text{SOC}} = -\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\hat{\sigma}\cdot(\nabla\phi\times\mathbf{p}) \quad (1.55)$$

のように書き表されるスピン軌道相互作用と呼ばれる力が強く働くことが知られている。ただし、 ϕ はスカラーポテンシャルである。この力は式 (1.55) より、運動量 \mathbf{p} に依存した有効磁場

$$\mathbf{B}_{\text{SOC}} \equiv -\frac{e\hbar}{4m^2c^2}(\nabla\phi\times\mathbf{p}) \quad (1.56)$$

と見なすことができる。これは電場 $-\nabla\phi$ を電子が磁場としても感じていると見なすことが出来る。このスピン軌道相互作用の起源は相対論にあり、ディラック方程式から自然と導き出される。

電磁場中でのディラックハミルトニアンはベクトルポテンシャル \mathbf{A} とスカラーポテンシャル ϕ を用いて式 (1.57) のように書き表される。

$$\check{H} = \boldsymbol{\alpha}\cdot(\mathbf{p}+e\mathbf{A})c + \beta mc^2 - e\phi \quad (1.57)$$

ここでは以後の式の展開を簡単にするため、電場のみがかかっている状況を仮定する (即ち $\mathbf{A} = \mathbf{0}$)。式 (1.57) の固有値方程式を 2×2 の行列の形で書くと式 (1.58) を得る。

$$\begin{pmatrix} (mc^2 - e\phi)I_2 & c\hat{\sigma}\cdot\mathbf{p} \\ c\hat{\sigma}\cdot\mathbf{p} & (-mc^2 - e\phi)I_2 \end{pmatrix}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.58)$$

ここで式 (1.58) の各成分はそれぞれ 2×2 の行列である。ここで固有値 ψ を二成分のベクトル $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r})$ と $\boldsymbol{\zeta}(\mathbf{r})$ を用いて $\psi = [\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\zeta}]^T$ と書くと、式 (1.58) は

$$c\hat{\sigma}\cdot\mathbf{p}\boldsymbol{\zeta} = (E' + e\phi)\boldsymbol{\varphi} \quad (1.59)$$

$$c\hat{\sigma}\cdot\mathbf{p}\boldsymbol{\varphi} = (E' + 2mc^2 + e\phi)\boldsymbol{\zeta} \quad (1.60)$$

の連立方程式に書き換えられる。ここで $E' = E - mc^2$ は全エネルギー E から静止エネルギー mc^2 を除いたエネルギーである。 $E' \neq -2mc^2 - e\phi$ なら、式 (1.60) は

$$\boldsymbol{\zeta} = \frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{E' + 2mc^2 + e\phi}\boldsymbol{\varphi} \quad (1.61)$$

として良い。式 (1.61) を式 (1.59) に代入すると

$$(E' + e\phi)\boldsymbol{\varphi} = \frac{c^2(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})^2}{E' + 2mc^2 + e\phi}\boldsymbol{\varphi} \quad (1.62)$$

となる。ここで非相対論極限として E' と $e\phi$ が静止エネルギー mc^2 に比べ十分小さい場合を考え、 $(E' + 2mc^2 + e\phi)^{-1} \sim \frac{1}{2mc^2} \left(1 - \frac{E' + e\phi}{2mc^2}\right)$ と近似すると、式 (1.62) は次のように展開される。

$$\begin{aligned} E'\boldsymbol{\varphi} &= \left[\left(1 - \frac{E' + e\phi}{2mc^2}\right) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - e\phi + \frac{ie\hbar}{4m^2c^2}(\nabla\phi)\cdot\mathbf{p} - \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla\phi\times\mathbf{p}) \right] \boldsymbol{\varphi} \\ &\sim \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} - e\phi + \frac{ie\hbar}{4m^2c^2}(\nabla\phi)\cdot\mathbf{p} - \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla\phi\times\mathbf{p}) \right] \boldsymbol{\varphi}. \end{aligned} \quad (1.63)$$

一行目から二行目への式展開では、非相対論極限なので $E' + e\phi \sim \frac{p^2}{2m}$ とした。この式 (1.63) の第五項がスピン軌道相互作用を表す項である [145]。第五項を以下のように変形すると、先に紹介した式 (1.55) を得る。特にスカラーポテンシャル ϕ が球対称であると仮定すると

$$\nabla\phi = \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \mathbf{r} \quad (1.64)$$

が成り立つので式 (1.55) は

$$\begin{aligned} \check{H}_{\text{SOC}} &= -\frac{e\hbar}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \\ &= -\frac{e\hbar}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{L}, \end{aligned} \quad (1.65)$$

のようにスピン $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ と軌道角運動量 $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ が結合した形で書くことが出来る [145, 147]。今回は簡単のため $\mathbf{A} = 0$ としたが、 $\mathbf{A} \neq 0$ の場合でもいくつかの手順を踏むことで同様にスピン軌道相互作用の項を導くことができる [147]。

式 (1.55) から分かる通り、 \check{H}_{SOC} の詳細な関数形は対象とする物質内の電場 $\nabla\phi$ に依存しており、その関数形に応じて複数の種類に分類される。以降ではそれらのスピン軌道相互作用の中でもドレッセルハウス型スピン軌道相互作用、ラシュバ型スピン軌道相互作用及びそれらを組み合わせることで実現する永久スピン旋回状態について紹介する。

ドレッセルハウス型スピン軌道相互作用

ドレッセルハウス型スピン軌道相互作用は GaAs などの III-V 族半導体内で見られるスピン軌道相互作用である。これは III-V 族半導体では空間反転対称性が破れ、結晶が電場を作るために生じる [144, 35]。x, y, z 軸をそれぞれ [100], [010], [001] 方向にとるとドレッセルハウス型スピン軌道相互作用のハミルトニアンは以下のように表される。

$$\check{H}_{\text{DSOC}} = \gamma[k_x(k_y^2 - k_z^2)\hat{\sigma}_x + k_y(k_z^2 - k_x^2)\hat{\sigma}_y + k_z(k_x^2 - k_y^2)\hat{\sigma}_z]. \quad (1.66)$$

特に今 [001] 方向に成長した系を考え、 k_z について平均をとると式 (1.66) は

$$\begin{aligned} \check{H}_{\text{DSOC}} &= \gamma[k_x(k_y^2 - \langle k_z^2 \rangle)\hat{\sigma}_x + k_y(\langle k_z^2 \rangle - k_x^2)\hat{\sigma}_y] \\ &= \beta(-k_x\hat{\sigma}_x + k_y\hat{\sigma}_y) + O(k^3) \end{aligned} \quad (1.67)$$

となる [69]。ここで $\langle k_z^2 \rangle = 0$, $\beta = \gamma\langle k_z^2 \rangle$ とした。一般にフェルミ準位が低ければ波数について三次の項は十分小さいとして無視することが出来る。 β はドレッセルハウス型スピン軌道相互作用の強さを表し、系やその形状から決まる固有の値である。

ラシュバ型スピン軌道相互作用

ラシュバ型スピン軌道相互作用は量子井戸や金属の表面などで見られるスピン軌道相互作用である。これは電子の運動面に対し垂直方向に対称性が破れ、垂直方向の電場が作られるために生じる [144, 92]。電子の運動面を $x-y$ 面とするとラシュバ型スピン軌道相互作用のハミルトニアンは式 (1.68) で書き表される。

$$\check{H}_{\text{RSOC}} = \alpha(k_x\hat{\sigma}_y - k_y\hat{\sigma}_x), \quad (1.68)$$

α はラシュバ型スピン軌道相互作用の強さを示し、面直方向の電場の強さに比例する。この電場は系そのものが作り出す電場である必要は無く、系の表面にゲートを接合し、ゲートに電圧を印加することで生じる電場でもよい。このためゲート電圧によってラシュバ型スピン軌道相互作用は強さを制御することが出来る。この事は実験的に確認されている [86, 112]。

この強さをゲート電圧で電氣的に制御できる性質はラシュバ型スピン軌道相互作用を介することで、電氣的にスピンを制御できることを示している。この性質を利用したものが 1990 年に Datta と Das によって提案されたスピン電界

トランジスタである [31]。このスピン電界トランジスタの提案をきっかけにスピントロニクス分野 (従来のエレクトロニクス分野と磁気工学分野が結びついて生まれた分野) において、ラシュバ型スピン軌道相互作用は電氣的にスピンを制御することを可能にする重要な概念として長く注目されることとなった。

α の典型的なオーダーは InGaAs/InAlAs のヘテロ接合系 [86] や Ag [90, 27], Au [27], Bi の表面 [72] において 0.01 ~ 0.1 eVÅ 程度であったが、近年では Bi などをドーブした系で 1 eVÅ 程度の従来より 1 桁, 2 桁も強いラシュバ型スピン軌道相互作用が観測されている [13, 81, 60]。

永久スピン旋回状態

Datta と Das はラシュバ型スピン軌道相互作用の性質を利用したスピン電界トランジスタを提案した。このとき Datta と Das は不純物散乱の無いバリスティック伝導を仮定していた。この提案はスピン軌道相互作用を介して電場を用いたスピンの制御が可能であるというメリットを示したが、話を不純物散乱のある場合に拡張するとデメリットも生じる。ラシュバ型スピン軌道相互作用や [001] 方向のドレッセルハウス型スピン軌道相互作用がある場合、電子はそれぞれ

$$\mathbf{B}_{\text{RSOC}} = (-\alpha k_y, \alpha k_x, 0), \quad (1.69)$$

$$\mathbf{B}_{\text{DSOC}[001]} = (-\beta k_x, \beta k_y, 0) \quad (1.70)$$

の有効磁場を受ける [図 1.3(a), (b)]。不純物散乱がある場合、電子は不純物散乱によって波数 \mathbf{k} を変化させながら運動する。このときスピン軌道相互作用から受ける有効磁場の方向も変化する。このため電子のスピンは異なる散乱過程を経ると経路に依存して異なる有効磁場を受けてバラバラの方向を向いてしまう。このスピンの緩和機構は D'Yakonov-Perel' 機構として知られている [36]。このようにスピン軌道相互作用は電場によるスピンの制御を可能にする一方、スピンを緩和させる原因となる。

このスピン軌道相互作用に起因するスピン緩和の問題に対して、2003 年に Schliemann は同じ強さのラシュバ型スピン軌道相互作用と [001] 方向のドレッセルハウス型スピン軌道相互作用が共存する系を提案した [100]。この系のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \check{H} &= \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) + \lambda(k_x \hat{\sigma}_y - k_y \hat{\sigma}_x) + \lambda(-k_x \hat{\sigma}_x + k_y \hat{\sigma}_y) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) - \lambda(k_x + k_y)(\hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_y) \end{aligned} \quad (1.71)$$

と書き表される。ここで $(k_y \pm k_x)/\sqrt{2} \rightarrow k_{\pm}$, $(\hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_y)/\sqrt{2} \rightarrow \hat{\sigma}_z$ と波数とスピン空間の軸をそれぞれ取り直すと式 (1.71) は

$$\check{H} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_+^2 + k_-^2) - 2\lambda k_+ \hat{\sigma}_z \quad (1.72)$$

となる。式 (1.72) はこの状態はラシュバ型スピン軌道相互作用や [001] 方向のドレッセルハウス型スピン軌道相互作用とは異なり、波数 k_+ のみに依存した一軸的なスピン軌道相互作用を持つことを示している [図 1.3(c)]。このスピン軌道によって生じる一軸的な有効磁場によって電子は $+x$ 方向の変異にのみ依存して歳差運動を行い、 $+x$ 方向に一定の距離移動するとスピンは元に戻る [22, 77]。このようにして D'Yakonov-Perel' 機構によるスピン緩和が抑制される。このような一軸的なスピン軌道相互作用によって生じる状態を永久スピン旋回状態と呼び、実験的にも実現している [71, 130, 68]。

永久スピン旋回状態はラシュバ型スピン軌道相互作用や [001] 方向のドレッセルハウス型スピン軌道相互作用がなくとも作り出すことが出来る。2006 年の Bernevig の論文に示されている通り、[110] 方向に成長した系はドレッセルハウス型スピン軌道相互作用により

$$\check{H} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) - 2\beta k_x \hat{\sigma}_z \quad (1.73)$$

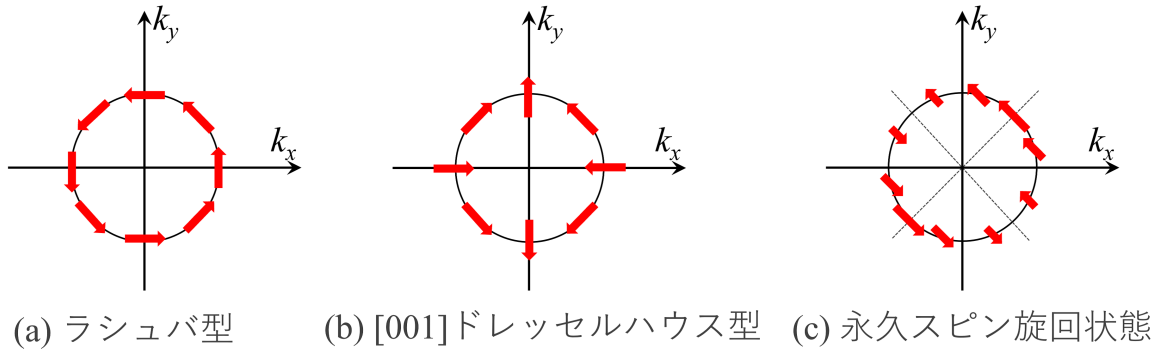


図 1.3 波数空間中における (a) ラシュバ型スピン軌道相互作用、(b) [001] 方向の場合のドレッシェルハウス型スピン軌道相互作用、(c) 永久スピン旋回状態。赤い矢印は有効磁場を表す。永久スピン旋回状態では [110] 方向と [-1-10] 方向で有効磁場が最も強く働き、[-110] 方向と [1-10] 方向では有効磁場はゼロになる。

と式 (1.72) と同形のハミルトニアンを持つ [22, 77]。このような [110] 方向に成長した系が永久スピン旋回状態となることも実験的に確認されている [87, 34, 73, 29]。また、近年では IV 族のモノカルコゲナイドの薄膜 [37, 19] などの二次元の強誘電体でも永久スピン旋回状態が実現することが理論的に示された [123, 1, 2, 15, 3, 74, 107, 18]。二次元の誘電体薄膜中では電子の運動量と系の作る電場が面内にあるため、式 (1.55) から式 (1.72) と同形のハミルトニアンが得られる [1, 74]。

1.3 物質科学とトポロジー

トポロジーとは、形や図形に連続変形 (切る・貼るといった操作は除く) を加えても変化しない性質に注目した学問分野である。例えば、湯飲みは連続変形を加えることで球に帰着させることができる。このため湯飲みと球はトポロジカルに同相と見なされる。一方、マグカップの場合は取手の穴を連続変形で埋めることが出来ないため、球とは別の相に分類される。これらの相は連続変形で変化しない穴の数で区別されている。仮に穴の数を変化させるのであれば切る・貼るといった操作が必要になる。この穴の数のような連続変形の前後で不変な数をトポロジカル数あるいはトポロジカル不変量と呼ぶ。トポロジーではこれらのトポロジカル不変量に注目する。電子の波動関数もヒルベルト空間上で一種の形を持っており、この形に対してトポロジーの考え方を応用するようになった。その結果としてこれまで考えられなかった非自明な電子状態を実現する系が発見されている。この節ではそのような例としてトポロジカル物質とトポロジカル超伝導体の紹介を行う。

1.3.1 トポロジカル物質

歴史的に最初のトポロジカルな系はホール効果の実験から見つかった。ホール効果とは電場 E に対し垂直方向に磁場を印加すると、電場と磁場両方に垂直な方向にホール電流 j_c が生じる現象である。このとき電場 E とホール効果によって生じる電流 j_c を用いて、ホールコンダクタンス σ_{xy} を

$$\sigma_{xy} = j_c/E \quad (1.74)$$

と定義することが出来る。

面直方向に強い磁場を印加した二次元電子系は離散的なエネルギー準位 (ランダウ準位) を持つ系である。フェルミ準位がこのランダウ準位の間であればエネルギーギャップが開いているため、電場と同方向に電流は流れない。一方で

ホール電流は生じ、ある有限の磁場の範囲かつ低温でホールコンダクタンス σ_{xy} を測定すると σ_{xy} が

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} N \quad (1.75)$$

のように整数 N で量子化される [129]。 e は電子の電荷、 h はプランク定数である。この系の特徴的な点は他にもある。この系の内部（バルク）ではランダウ準位によってエネルギーギャップが開いているため絶縁体であるにもかかわらず、系の端（エッジ）に電子が一方に運動する金属的なエッジ状態（カイラルエッジ状態）が存在しているのである。このカイラルエッジ状態はバルクで電子がサイクロトロン運動をする一方、エッジでは電子がサイクロトロン運動をしつつもエッジで反射されることで、エッジに沿って運動をしていると直感的に解釈されている [149]。また、このカイラルエッジ状態の数は式 (1.75) の整数 N に一致する。これが最初のトポロジカルな系で量子ホール絶縁体と呼ばれる。

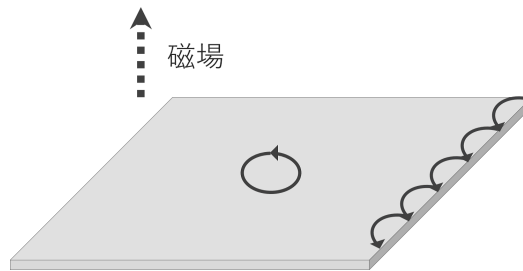


図 1.4 量子ホール絶縁体の直感的な理解。磁場によりバルクでは電子がサイクロトロン運動をする一方、エッジでは電子がサイクロトロン運動をしつつもエッジで反射されることで、エッジに沿って運動をする [149]。

さて、ここで $+z$ 軸方向に磁場が印加されており、アップスピンの電子のみがエッジで運動している図 1.4 のような量子ホール絶縁体があるとする。このアップスピンのみの量子ホール絶縁体に時間反転操作を行うと、 $-z$ 軸方向に磁場が印加され、ダウンスピンの電子が元の量子スピンホール絶縁体とは逆方向に運動している量子ホール絶縁体になる。逆にダウンスピンのみの量子ホール絶縁体に時間反転操作を行うとアップスピンのみの量子ホール絶縁体になる。仮にこれらを重ね合わせた系があるとする。エッジでアップスピンの電子とダウンスピンの電子が互いに逆方向に運動をする金属的なエッジ状態（ヘリカルエッジ状態）を持った絶縁体を実現する [図 1.5]。実際はこのようにスピンの応じて異なる向きの磁場をかけることはできないが、スピン軌道相互作用が磁場の代わりに果たすことでこの系が実現する [63, 64, 21]。このような系は実験的にも実現している [70]。この系でスピンホール効果（非磁性材料に電場 E を印加すると垂直方向にスピン流 j_s が生じる現象）の観測を行うと、スピンホールコンダクタンス $\sigma_{xy}^z = j_s/E$ が量子化されるので、この系を量子スピンホール絶縁体あるいは二次元のトポロジカル絶縁体と呼ぶ。

この量子スピンホール絶縁体が三次元でも実現することが指摘され、実験的にも発見されている。この物質をトポロジカル絶縁体と呼ぶ。このトポロジカル絶縁体では表面にヘリカルエッジ状態が実現し、そのバンド分散はディラックコーンと見なせる [図 1.6]。

これらの非自明な絶縁体の背後にはトポロジーの存在があり、これらを通常の絶縁体と区別するトポロジカル不変量が存在する。例えば量子ホール絶縁体の場合、

$$n = \sum_m \int_{\text{BZ}} \frac{d^2\mathbf{k}}{2\pi} \left(\frac{\partial a_{m,y}}{\partial k_x} - \frac{\partial a_{m,x}}{\partial k_y} \right), \quad (1.76)$$

$$\mathbf{a}_m(\mathbf{k}) = -i \langle u_{m,\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle \quad (1.77)$$

で定義されるチャーン数 n がトポロジカル不変量となっており、 $n \neq 0$ でトポロジカルに非自明な絶縁体状態が実現している [124, 149]。また、このチャーン数 n は式 (1.75) の整数 N に一致する。ここで m はフェルミ準位以下のバンドのインデックス、 $\mathbf{a}_m(\mathbf{k})$ はベリー接続、 $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ は波動関数である。式 (1.77) はブリルアンゾーンで積分を行っている。

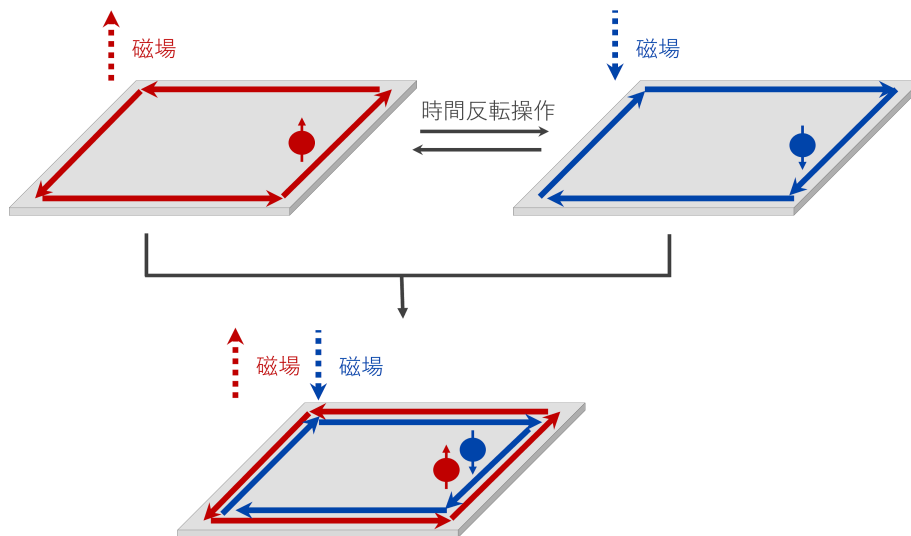


図 1.5 アップスピンの電子のみが存在する量子スピンホール絶縁体とダウンスピンのみが存在する量子スピンホール絶縁体とそれらを重ね合わせることで実現する量子スピンホール絶縁体の図 (実際にはスピン毎に異なる磁場をかけることは出来ない。実際にはスピン軌道が磁場の代わりを果たしている)。アップスピンの電子のみの量子スピンホール絶縁体とダウンスピンの電子のみの量子スピンホール絶縁体は時間反転操作で互いに移り変わる。両者を量子スピンホール絶縁体は時間反転操作に対して不変になる。

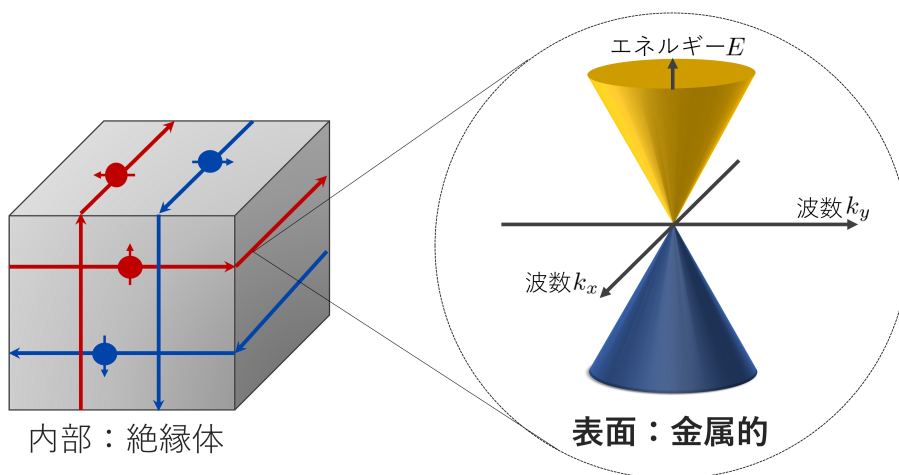


図 1.6 トポジカル絶縁体の図。内部では絶縁体だが、表面はヘリカルエッジ状態を持つ金属になっている。表面のバンド分散は二次元のディラックコーンになっている。

量子スピンホール絶縁体の場合、トポジカルに非自明な状態ではトポジカル不変量としてノンゼロな二整数値 (\mathbb{Z}_2 不変量) を持つ。このようにトポジカルに非自明な物質はそれに対応するようにゼロでないトポジカル不変量を持つ。また、トポジカル不変量はバルクの波動関数から計算することが出来る。トポジカルに非自明な状態に対応するトポジカル不変量は系の持つ対称性に依るが、どの対称性を有する場合にどのトポジカル不変量が非自明な状態に対応するかも調べられている。

トポジカル不変量の重要な特徴はバンドギャップが閉じなければ値を変えない点である。このバンドが閉じるということは最初に述べた切ったり、貼ったりする操作に対応する。この特徴はトポジカル絶縁体の非常に重要な性質を導く。ここで二つのトポジカル不変量の異なる絶縁体同士を繋ぐことを考える。二つの絶縁体の界面ではト

ポロジカル不変量を変化させるために、バンドギャップを閉じなくてはならない。そのため、トポロジカル不変量の異なる絶縁体の間には必ずギャップレスなエッジ状態が生じる。このようにトポロジカル絶縁体ではバルクの非自明なトポロジーに対応してギャップレスなエッジ状態が生じる。この対応関係をバルク・エッジ対応と呼ぶ。

このようなトポロジーの考えは絶縁体以外にも広がっている。ここまでの議論はエネルギーギャップを持つ絶縁体で行われてきた。これはトポロジカル不変量がバンドギャップを閉じないと変わらないという性質と結びついており、トポロジーを議論するうえで絶縁体であることは非常に重要であった。しかし、絶縁体でないバンド構造を持つ物質でも、ある波数に固定して見ると絶縁体と見なすことが出来るため、同様にトポロジカルな観点から議論を行うことが出来る。このような考え方から、第3章で取り扱うトポロジカルディラック半金属をはじめとするトポロジカル半金属と呼ばれる物質群にも注目が集まっている。また、絶縁体と同様にバンドギャップを持つことから、超伝導体にもトポロジーの考え方が応用されるようになっている。

1.3.2 トポロジカル超伝導

トポロジーを議論する際、絶縁体のバンドギャップが重要な役割を果たした。超伝導体も絶縁体と同様にギャップを持つため、超伝導体に対してもトポロジーについて議論されるようになった。その結果として超伝導体でもトポロジカルに非自明な状態、それに対応するトポロジカル不変量が現れることが明らかになった [101]。実際にトポロジカル絶縁体である Bi_2Se_3 に銅をドーピングした $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ではトポロジカル超伝導が実現していることが明らかになった [53]。また、スピン二重項 d 波やスピン三重項 p 波の超伝導体などでトポロジカルに非自明な状態が実現することが明らかになった (d_{xy} 波や p_x 波などの場合は先述の通りノードを持つため、ギャップが閉じることがあるが波数を固定して見ることでトポロジーの議論が可能である)。

しかし、現実にスピン三重項超伝導状態を示す物質は極めて数が少なく、現状スピン三重項超伝導体と確定している物質は UPt_3 のみである [110, 125]。このため既存の物質を組み合わせることで、トポロジカルに非自明なスピン三重項超伝導体を作る試みがされている。その最初の例として、2008年に Fu と Kane によってトポロジカル絶縁体表面に s 波超伝導体を接合した系が提案された [38]。これはトポロジカル絶縁体表面のヘリカルエッジ状態に近接効果で超伝導ペアポテンシャルを誘起することでトポロジカル超伝導体を実現しようとした例である。また Fu らの提案を受け、2010年には Sau らによって強いラッ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に s 波超伝導体を接合した系が提案された [99]。これ以降、強いスピン軌道相互作用、ゼーマン磁場、超伝導体を組み合わせることでトポロジカル超伝導体を実現する提案が多数行われている [80, 88] [図 1.7]。

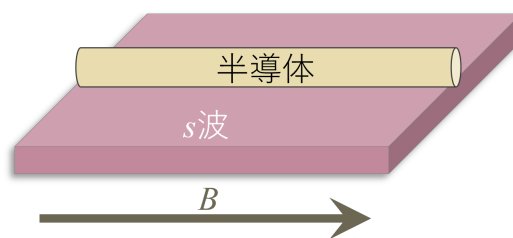


図 1.7 人工的な p 波超伝導体のセットアップ。 s 波超伝導体の上にラッシュバ型スピン軌道相互作用を持つ半導体ナノワイヤーを載せ、ゼーマン磁場を印加している。トポロジカルに非自明な超伝導状態ではナノワイヤーの端にエッジ状態が現れる [80, 88]。

第 2 章

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電子状態と電気伝導の関係

2.1 本研究の背景

近年ではトポロジカル超伝導体を人工的に作り出す理論提案が複数行われている。その中でも初期のものとして 2008 年に Fu と Kane によってトポロジカル絶縁体表面に s 波超伝導体を接合した系が提案された [38]。トポロジカル絶縁体の表面ではヘリカルエッジ状態を示すディラックコーンが現れ [47]、ここに s 波の超伝導ペアポテンシャルを近接効果によって誘起することでトポロジカル超伝導状態が実現する。しかし、この系が提案された当初はトポロジカル絶縁体と超伝導体のヘテロ接合は実験的に困難であった (なお現在ではトポロジカル絶縁体と超伝導体のヘテロ接合は実験的に実現している [28, 30, 41, 82, 97, 133, 108, 137, 138])。これに対し、2010 年に Sau らは強いラシュバ型スピン軌道相互作用 (RSOC) を持つ半導体とゼーマン磁場を用いてトポロジカル絶縁体表面と類似した状態を作り出し、そこに超伝導ペアポテンシャルを誘起することでトポロジカル超伝導体を実現する方法を提案した [99]。この提案を皮切りに RSOC 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ためのプラットフォームとして注目されるようになった [80, 88]。

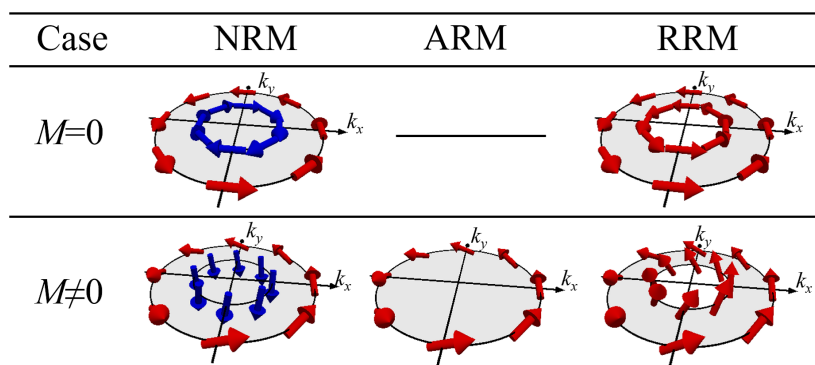


図 2.1 ラシュバ型スピン軌道相互作用とゼーマン磁場の共存する系で実現する三つの電子状態：正常ラシュバ金属状態 (NRM), 異常ラシュバ金属状態 (ARM), ラシュバリング金属状態 (RRM) での波数空間中におけるスピン構造。灰色に塗られた領域はフェルミ準位における占有状態を表している。自身の論文 [2] より転載。

トポロジカル絶縁体表面の電子状態はフェルミ準位に依存しない一方、RSOC を持つ二次元系、RSOC とゼーマン磁場の共存する二次元系ではフェルミ準位に依存して複数の電子状態が現れる [39]。また、RSOC によって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ことにより、これらの電子状態は図 2.1 のように異なるスピン構造を波数空間中で持つ。一つ目の電子状態では二枚のフェルミ面を持ち、フェルミ面上でのスピン構造に注目す

るとスピンの旋回方向は二枚のフェルミ面で逆である [図 2.1 の NRM]。二つ目の電子状態では二枚のフェルミ面を持ち、二枚のフェルミ面でスピンの旋回方向は同じである [図 2.1 の RRM]。三つ目の電子状態は有限のゼーマン磁場がある際に生じ、一枚のフェルミ面を持つ [図 2.1 の ARM]。また、これらの電子状態では状態密度のエネルギー依存性も全く異なる。これらの波数空間におけるスピン構造の違い、状態密度のエネルギー依存性の違いは輸送現象にも現れると期待される。このように RSOC とゼーマン磁場の共存する系は単にトポジカル超伝導を実現するためのプラットフォームとしてだけでなく、それ単独でも興味深い系である。しかし、RSOC とゼーマン磁場の共存する系の電子状態の変化が輸送現象にどのように影響を及ぼすかは、これまで注目されていなかった。

2.2 本研究の目的

本研究の目的は RSOC とゼーマン磁場の共存する系の電子状態を変化させることで、輸送現象にどのような影響を及ぼすかを明らかにすることである。そのために図 2.2 の二体の二次元接合において、RSOC とゼーマン磁場の共存する系のフェルミ準位をゲート電圧により変化させながら系のコンダクタンスを計算する。これにより RSOC とゼーマン磁場の共存する系の電子状態の変化が電気伝導にどのような変化をもたらすかを明らかにする。

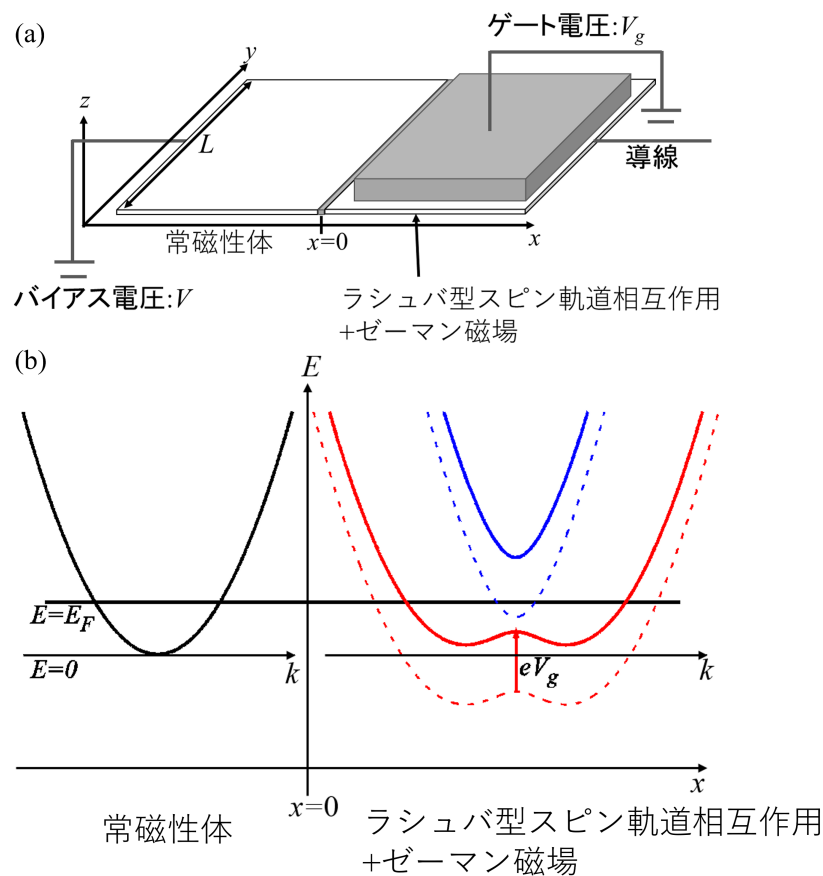


図 2.2 (a) 接合系の図。左側は通常の常磁性体で、右側はラッシュバ型スピン軌道相互作用とゼーマン磁場が共存している。L は接合系の y 軸方向の幅である。磁場は +z 方向を向いている。左側の電極に電流を生じさせるためのバイアス電圧を、右側にはフェルミ準位を変化させるためにゲート電圧を印加する。x = 0 にデルタ関数型のポテンシャル障壁があると仮定した。(b) フェルミ準位とゲート電圧の関係。ゲート電圧が増加すると右側のフェルミ準位はバンドの下端に近づく。

この章の構成は次の通りである。まず、最初に RSOC とゼーマン磁場の共存する系のバンド分散と三つの電子状態の紹介を行う。次に接合系のコンダクタンスの計算方法を紹介する。最後にコンダクタンスの計算結果を示す。

2.3 バンド構造と各電子状態

ここでは本章で研究対象とする RSOC とゼーマン磁場の共存する系のバンド構造と各電子状態について説明する。この系のハミルトニアンは以下の式 (2.1) の様に見える [26, 39, 92, 111]。

$$\tilde{H} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \alpha(k_x \hat{\sigma}_y - k_y \hat{\sigma}_x) - M \hat{\sigma}_z. \quad (2.1)$$

m は電子の有効質量、 α は RSOC の強さ (結合定数)、 M はゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ、 $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ である。以降ではゼーマン磁場は面直方向 (+z 軸方向) に働いているとする。これはゼーマン磁場が面内成分を持つと $k_x - k_y$ 面について異方性が生じるためである。式 (2.1) よりこの系のエネルギー固有値 E_{\pm} は以下のように与えられる。

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \sqrt{\alpha^2 k^2 + M^2}. \quad (2.2)$$

このときエネルギー固有値 E_+ と E_- は波数空間中のスピン構造を見るとスピンの旋回方向が異なる。式 (2.2) のバンド分散はラシュバエネルギー $E_{\alpha} = m\alpha^2/(2\hbar^2)$ とゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ M との大小関係に依存して図 2.3 の (a)-(c) のいずれかになる。

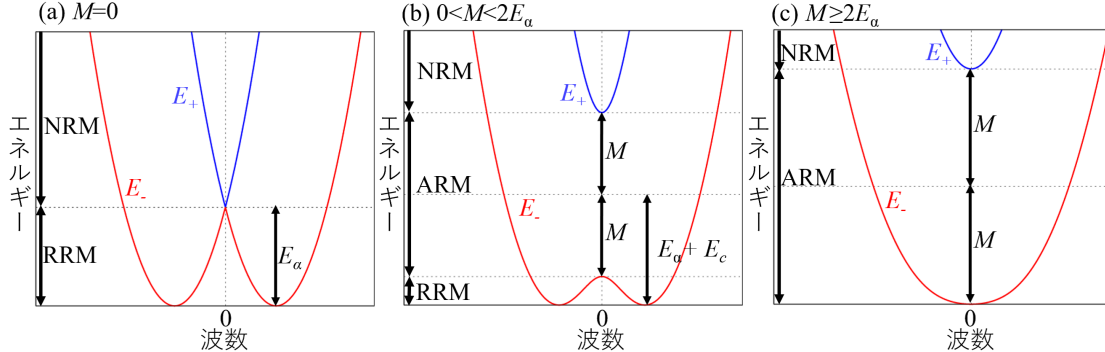


図 2.3 ラシュバ型スピン軌道相互作用とゼーマン磁場の共存する系のバンド構造。(a) $M = 0$, (b) $0 < M < 2E_{\alpha}$, (c) $M \geq 2E_{\alpha}$ の場合である。 M はゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ、 E_{α} はラシュバエネルギー [13, 14, 26, 60, 61, 81, 96, 109]、 $E_c = M^2/(4E_{\alpha})$ である。NRM, ARM, RRM はそれぞれ正常ラシュバ金属状態、異常ラシュバ金属状態、ラシュバリング金属状態を表している。自身の論文 [2] より転載。

まず、ゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ M がゼロの場合はバンド分散は図 2.3 の (a) の構造をとる。このときフェルミ準位が固有エネルギー E_{\pm} をどのように横切るかで電子状態を二つに分けることが出来る。エネルギー $E > 0$ の領域ではフェルミ準位が E_+ と E_- のバンドを横切る。このためフェルミ面上でのスピン構造に注目するとスピンの旋回方向は二枚のフェルミ面で逆になる [図 2.1 の $M = 0$, NRM]。一方、 $-E_{\alpha} < E < 0$ の領域ではフェルミ準位が E_- のバンドを二回横切る。このためスピンの旋回方向の同じ二枚のフェルミ面が現れる [図 2.1 の $M = 0$, RRM]。また、この領域ではフェルミ面はリング状になる [109]。

次にゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ M がノンゼロの場合を考える。この場合は M とラシュバエネルギー $E_{\alpha} = m\alpha^2/(2\hbar^2)$ の大小でバンド分散が図 2.3 の (b) または (c) の構造をとる。このため、 M がノンゼロの場合は、固有エネルギー E_{\pm} のバンドをフェルミ準位がどのように横切るかで電子状態を二つもしくは三つに分けることが出来

る。エネルギー $E > M$ の領域ではフェルミ準位が E_+ と E_- のバンドを横切る。このためフェルミ面上でのスピン構造に注目するとスピンの旋回方向は二枚のフェルミ面で逆になる [図 2.1 の $M \neq 0$, NRM]。次に $-M < E < M$ の領域では、ゼーマン磁場よりギャップが生じているため、フェルミ準位は E_- のバンドを位置一回だけ横切る。このためスピンが旋回した構造を持つフェルミ面が一枚だけ現れる [図 2.1 の $M \neq 0$, ARM]。最後に $E < -M$ の領域ではフェルミ準位が E_- のバンドを二回横切る。このためスピンの旋回方向の同じ二枚のフェルミ面が現れる [図 2.1 の $M \neq 0$, RRM]。この領域ではフェルミ面がリング状になる。ただし、この $E < -M$ の領域は $0 < M < 2E_\alpha$ を満たす場合にのみ現れる。また、 $M \neq 0$ の場合はゼーマン磁場によりスピンの面直方向の成分を持つ。

このように RSOC とゼーマン磁場の共存する系ではフェルミ準位が固有エネルギー E_\pm をどのように横切るかで電子状態を二つないしは三つに分類することができ、各電子状態で波数空間中に異なるスピン構造が現れる。以後、フェルミ準位が E_+ と E_- のバンドを横切る場合を正常ラシュバ金属状態 (NRM)、 E_+ のバンドを一回横切る場合を異常ラシュバ金属状態 (ARM)[39]、 E_+ のバンドを二回横切る場合をラシュバリング金属状態 (RRM) と呼ぶ。

正常ラシュバ金属状態、異常ラシュバ金属状態、ラシュバリング金属状態ではスピン構造だけでなく状態密度のエネルギー依存性も異なる。各状態における状態密度のエネルギー依存性は以下の表 2.1 の通りである。正常ラシュバ金属状態では状態密度は定数になる。これは二次元電子ガスの場合と同じである。一方、ラシュバリング金属状態では状態密度は $1/\sqrt{E+E_\alpha+E_c}$ に比例する [$E_c = M^2/(4E_\alpha)$ はゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ M とラシュバエネルギー E_α で決まる量である] [61]。これは一次元電子ガスの状態密度のエネルギー依存性と同じである。異常ラシュバ金属状態の状態密度はこれらの一次元電子ガスのようなエネルギー依存性を示す項と二次元電子ガスのようなエネルギー依存性を示す項の二つに分けられ、あたかも通常ラシュバ金属状態とラシュバリング金属状態が混ざり合った状態と見なすことが出来る。

表 2.1 正常ラシュバ金属状態、異常ラシュバ金属状態、ラシュバリング金属状態における状態密度のエネルギー依存性。(a) $M = 0$, (b) $0 < M < 2E_\alpha$, (c) $M \geq 2E_\alpha$ の場合である。 $2\nu_e$ は二次元電子ガスの状態密度、 $E_c = M^2/(4E_\alpha)$ である。

状態	正常ラシュバ金属	異常ラシュバ金属	ラシュバリング金属
(a) $M = 0$	$2\nu_e$	-	$2\nu_e \sqrt{\frac{E_\alpha}{E+E_\alpha+E_c}}$
(b) $0 < M < 2E_\alpha$	$2\nu_e$	$\nu_e \left[1 + \sqrt{\frac{E_\alpha}{E+E_\alpha+E_c}} \right]$	$2\nu_e \sqrt{\frac{E_\alpha}{E+E_\alpha+E_c}}$
(c) $M \geq 2E_\alpha$	$2\nu_e$	$\nu_e \left[1 + \sqrt{\frac{E_\alpha}{E+E_\alpha+E_c}} \right]$	-

2.4 コンダクタンスの計算方法

ここでは図 2.2(a) の接合系におけるコンダクタンスの計算方法を紹介する。系のセットアップとしては系の左側が常磁性体、右側には RSOC と面直方向のゼーマン磁場が共存しており、 $x = 0$ にデルタ関数型のポテンシャルバリアを考える。系の左側には電流を生じさせるためにバイアス電圧 V が印加されている。右側にはゲートからゲート電圧 V_g が印加されており、ゲート電圧が増加すると接合右部のフェルミ準位はバンドの下端に近づく [図 2.2(b)]。y 軸方向の長さ L は十分長く、y 軸方向の波数 k_y は連続量をとるとする。また、波数 k_y は保存量であると仮定する。

この接合系のハミルトニアンは式 (2.3) のように書き表される。

$$H = H_L \theta(-x) + Z\delta(x) + (H_R + eV_g)\theta(x), \quad (2.3)$$

$$H_L = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_L}, \quad (2.4)$$

$$H_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_R} + \alpha(k_x \hat{\sigma}_y - k_y \hat{\sigma}_x) - M \hat{\sigma}_z. \quad (2.5)$$

$m_{L(R)}$ は接合系左部 (右部) の電子の有効質量、 M は面直方向に働くゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさの大きさ、 Z はポテンシャルバリアの強さ、 $e(>0)$ は素電荷である。式 (2.3) の第一項は接合左部、第二項は $x=0$ のデルタ関数型のポテンシャルバリア、第三項は接合右部、第四項 $eV_g(\geq 0)$ はゲート電圧 V_g によって生じるポテンシャルを表す。 $\theta(x)$ は階段関数である。

以降では以下の計算の通り、式 (2.3) のハミルトニアンを波数 k_y を固定して各部の波動関数を求め、各 k_y に対する透過率を求める。式 (2.3) より接合左部の常磁性体中の波動関数 $\psi(x < 0)$ は入射波の波動関数 ψ_{in}^s と反射波の波動関数 ψ_{ref}^s を用いて、以下の式 (2.6) のように書き表される。ただし、右上の添え字 $s = \uparrow, \downarrow$ は入射する電子のスピンを表す添え字である。

$$\begin{aligned}\psi(x < 0) &= \psi_{\text{in}}^s + \psi_{\text{ref}}^s, \\ \psi_{\text{in}}^{\uparrow} &= \chi_{\uparrow} e^{i(k_{L,x}x + k_y y)}, \\ \psi_{\text{in}}^{\downarrow} &= \chi_{\downarrow} e^{i(k_{L,x}x + k_y y)}, \\ \psi_{\text{ref}}^s &= (r_{\uparrow}^s \chi_{\uparrow} + r_{\downarrow}^s \chi_{\downarrow}) e^{i(-k_{L,x}x + k_y y)}.\end{aligned}\quad (2.6)$$

$\chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^T$, $\chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}^T$, $k_{L,x} = \sqrt{2m_L E / \hbar^2 - k_y^2}$, $r_{\uparrow(\downarrow)}^s$ はアップスピン (ダウンスピン) の電子の反射係数である。

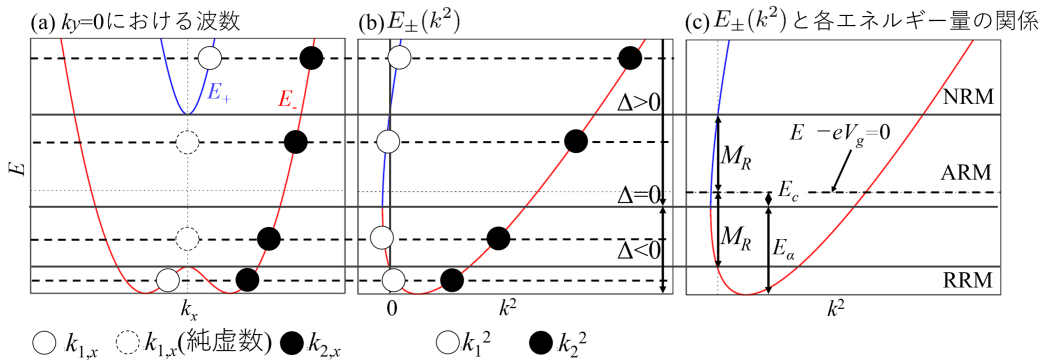


図 2.4 ラッシュバ型スピン軌道相互作用とゼーマン磁場の共存する系におけるバンド構造と波数 $k_{1,x}$ と $k_{2,x}$ の関係。(a) $k_y=0$ での E_{\pm} の k_x に対するプロット、(b) E_{\pm} の k^2 についてのプロット、(c) $E_{\pm}(k^2)$ と各エネルギー量の関係。 x 方向の群速度が正になるように $k_{1(2),x}$ [白丸 (黒丸)] を定めるため、ラッシュバリング金属状態 (RRM) では $k_{1,x} \leq 0$ である [図 (a)]。異常ラッシュバ金属状態 (ARM) では $k_1^2 < 0$ が成り立つため、 $k_{1,x}$ は必ず純虚数 [(a) の破線白丸] になる。図 (b) より $k^2 < 0$ の領域で $\Delta \equiv E - eV_g + E_c = 0$ で E_+ と E_- のバンドが接していることが分かる。図 (c) より E_c がエネルギー $E - eV_g = 0$ の点から E_{\pm} が接する点までのエネルギー幅に対応していることが分かる。

透過波の波動関数 $\psi(x > 0) \equiv \psi_{\text{tra}}^s$ は式 (2.7) のように関数形がフェルミ単位に依存する。このように透過波の波動関数の関数形が変化する理由は波数 k とエネルギー E に対する分散関係からは自明ではない。しかし、図 2.4(b), (c) の k^2 と E に対する分散関係を見ると明らかである。

$$\psi_{\text{tra}}^s = t_1^s \chi_1 e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}} + t_2^s \chi_2 e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}}, \quad (2.7)$$

$$\chi_1 \equiv \theta(E - eV_g + E_c) \chi_+(\mathbf{k}_1) + \theta(-E + eV_g - E_c) \chi_-(\mathbf{k}_1),$$

$$\chi_2 \equiv \chi_-(\mathbf{k}_2)$$

$$\chi_+(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{-\alpha i(k_x - ik_y)}{M + \sqrt{\alpha^2 k^2 + M^2}} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

$$\chi_-(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-\alpha i(k_x + ik_y)}{M + \sqrt{\alpha^2 k^2 + M^2}} \end{pmatrix}.$$

$\mathbf{k}_1 = (k_{1,x}, k_y)$ 及び $\mathbf{k}_2 = (k_{2,x}, k_y)$ は接合右部中の波数で、それぞれ内側と外側のフェルミ面に対応する。 $\chi_{1(2)}$ は波数 $\mathbf{k}_{1(2)}$ を持つ透過波の波動関数である。 $\chi_{+(-)}$ はエネルギー固有値 $E_{+(-)}$ の固有関数、 $t_{1(2)}^s$ は透過係数である。固有値 E_{\pm} より $k_{1(2)}^2$ は

$$k_{1(2)}^2 = \frac{2m_R}{\hbar^2} \left[(E - eV_g) + 2E_{\alpha} - (+)\sqrt{4E_{\alpha}(E - eV_g) + 4E_{\alpha}^2 + M^2} \right], \quad (2.9)$$

と与えられる。透過した電子は $+x$ 方向に進行するので、 $k_{1(2),x}$ の符号は群速度の x 成分、 $\partial E/(\hbar \partial k_x)$, が正となるように選ぶ。また、 $k_{1(2),x}$ が純虚数になる場合は $x \rightarrow \infty$ において ψ_{tra}^s が発散しないように符号を選ぶ。

表 2.2 各電子状態について $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ の透過波が固有値 E_{\pm} のどちらに属するかを示す表

電子状態	E_+	E_-
正常ラシユバ金属	\mathbf{k}_1	\mathbf{k}_2
異常ラシユバ金属 ($E - eV_g > -E_c$)	\mathbf{k}_1	\mathbf{k}_2
異常ラシユバ金属 ($E - eV_g < -E_c$)	-	$\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$
ラシユバリング金属	-	$\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$

次に反射係数、透過係数を求めるために接続条件を与える。式 (2.3) のハミルトニアンより速度演算子 $\hat{v}_x \equiv \partial H/(\hbar \partial k_x)$ は次のように与えられる [20, 109, 111, 142]。

$$\hat{v}_x \equiv \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_x} = \frac{-i\hbar}{m(x)} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\alpha}{\hbar} \theta(x) \hat{\sigma}_y, \quad (2.10)$$

$$m(x) \equiv m_L \theta(-x) + m_R \theta(x).$$

この速度演算子 \hat{v}_x を用いて、接合面 ($x = 0$) における接続条件は以下の式 (2.11) のように与えられる [39, 61, 83, 95, 109, 142]。

$$\begin{cases} \psi^s(+0, y) - \psi^s(-0, y) = 0, \\ \hat{v}_x [\psi^s(+0, y) - \psi^s(-0, y)] = \frac{2Z}{i\hbar} \psi^s(0, y). \end{cases} \quad (2.11)$$

式 (2.11) をより具体的に書き下すと以下の方程式 (2.12) になる。

$$\begin{pmatrix} \chi_1 & \chi_2 & -\chi_{\uparrow} & -\chi_{\downarrow} \\ (v_{1,x} - \frac{2Z}{i\hbar}) \chi_1 & (v_{2,x} - \frac{2Z}{i\hbar}) \chi_2 & -v_{\uparrow,x} \chi_{\uparrow} & -v_{\downarrow,x} \chi_{\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{\uparrow}^s \\ t_{\downarrow}^s \\ r_{\uparrow}^s \\ r_{\downarrow}^s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_s \\ v_{s,x} \chi_s \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

ここで $v_{1(2,\uparrow,\downarrow),x}$ は波動関数に作用させた後の速度演算子で $v_{1(2),x} = \frac{-i\hbar}{m_R} k_{1(2),x} + \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_y$, $v_{\uparrow,x} = v_{\downarrow,x} = \frac{-i\hbar}{m_L} k_{L,x}$ である。この方程式 (2.12) を解くことで y 軸方向の波数が k_y の電子が入射した際の反射係数、透過係数を求めることが出来る。以上を用いて透過率 $T^s(k_y)$ として式 (2.13) を得る [61, 109, 142]。

$$\begin{aligned} T^s(E, k_y) &\equiv \text{Re} \left| \frac{\psi_{\text{tra}}^{s\dagger} \hat{v}_x \psi_{\text{tra}}^s}{\psi_{\text{in}}^{s\dagger} \hat{v}_x \psi_{\text{in}}^s} \right| \\ &= 1 - R^s(E, k_y) \\ &= 1 - \text{Re} \left| \frac{\psi_{\text{ref}}^{s\dagger} \hat{v}_x \psi_{\text{ref}}^s}{\psi_{\text{in}}^{s\dagger} \hat{v}_x \psi_{\text{in}}^s} \right| \\ &= 1 - (|r_{\uparrow}^s|^2 + |r_{\downarrow}^s|^2). \end{aligned} \quad (2.13)$$

一行目から二行目の式変形には確率の保存則 $R^s(E, k_y) + T^s(E, k_y) = 1$ を用いた [$R^s(E, k_y)$ は反射率である]。この $T^s(E, k_y)$ を用いて、 k_y について平均した透過率 $\mathcal{T}^s(E)$ を以下の式 (2.14) のように定義する。 $\mathcal{T}^s(E)$ は y 軸方向の単位長に対して定義している。ここで y 軸方向の幅 L についての仮定より $\sum_{k_y} \approx \frac{L}{2\pi} \int dk_y$ とした。

$$\mathcal{T}^s(E) \equiv \frac{1}{L} \sum_{k_y} T^s(E, k_y) \approx \frac{1}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} dk_y T^s(E, k_y). \quad (2.14)$$

$k_F = \sqrt{2m_L E_F}/\hbar$ は接合左部のフェルミ波数である。ランダウアーの理論より電極間を流れる電流 I は透過率 $\mathcal{T}^s(E)$ を用いて以下の式 (2.15) のように書き表される [61, 96, 109, 144]。

$$\begin{aligned} I &= \frac{eL}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE [\mathcal{T}^\uparrow(E) + \mathcal{T}^\downarrow(E)] [f(E - E_F - eV) - f(E - E_F)] \\ &\approx \frac{e^2 V L}{2\pi\hbar} [\mathcal{T}^\uparrow(E_F) + \mathcal{T}^\downarrow(E_F)], \end{aligned} \quad (2.15)$$

E_F はフェルミ準位、 $f(E - E_F) = 1/(e^{\beta(E - E_F)} + 1)$ はフェルミ分布関数である。一行目から二行目への変形では低温極限を仮定し、 $f(E - E_F - eV) - f(E - E_F) \approx eV\delta(E - E_F)$ とした。式 (2.15) より、低温極限における y 軸方向の単位長あたりのコンダクタンス \mathcal{G} はフェルミ準位での透過率 $\mathcal{T}^s(E_F)$ を用いて式 (2.16) のように定義される。

$$\mathcal{G} \equiv \frac{e^2}{2\pi\hbar} [\mathcal{T}^\uparrow(E_F) + \mathcal{T}^\downarrow(E_F)]. \quad (2.16)$$

また、同様にして k_y 毎のコンダクタンス $G(k_y)$ を次の式 (2.17) のように定義する。

$$G(k_y) \equiv \frac{e^2}{2\pi\hbar} [T^\uparrow(E_F, k_y) + T^\downarrow(E_F, k_y)]. \quad (2.17)$$

以降では簡単のため $\alpha > 0$, $M > 0$, $m_L = m_R$ とする。

2.5 電子状態とコンダクタンスの関係

まず初めにゼーマン磁場がない場合 $M = 0$ での結果を示す。図 2.5 はラシユバエネルギー $E_\alpha = 0.02E_F, 0.3E_F, 0.5E_F$ での (a) コンダクタンス \mathcal{G} と (b) $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ のゲート電圧 V_g に対する依存性を表す。なお、図 2.5 及び以降の図 2.6 については $0 \leq eV_g/E_F \leq 1$ の範囲で \mathcal{G} の V_g 依存性に変化は見られないので、見やすくするために $0.5 \leq eV_g/E_F$ の範囲でプロットした。同様に $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ は -1 から 0.5 の範囲でプロットした。図 2.5(a) より、正常ラシユバ金属状態 (NRM) では E_α の大きさによらず \mathcal{G} は V_g に対し単調減少する (即ち $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g) < 0$)。その後、正常ラシユバ金属状態 (NRM) からラシユバリング金属状態 (RRM) に変化するのに伴い $eV_g/E_F = 1$ で $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ は不連続に増加する。RSOC が弱い場合 ($E_\alpha/E_F = 0.02$)、ラシユバリング金属状態 (RRM) に変化する際 $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ が不連続に増加しても、 $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ は負の値をとり、 \mathcal{G} はラシユバリング金属状態でも V_g に対し単調減少する。この \mathcal{G} の単調減少は先行研究でも示されている [61, 109]。一方、強いラシユバエネルギー ($E_\alpha/E_F = 0.3, 0.5$) の場合は正常ラシユバ金属状態 (NRM) からラシユバリング金属状態 (RRM) に変化する際、 $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の不連続な増加によって $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の符号は負から正に変化する。これに伴い、ラシユバリング金属状態に変化すると \mathcal{G} は単調減少から増加に転じる。更に V_g が増加すると、再び $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の符号が負になり、 \mathcal{G} は V_g に対し単調減少するようになる。なお、図 2.5(a) でラシユバリング金属状態 (RRM) において \mathcal{G} の値がある V_g でゼロになる。この値でフェルミ準位はバンド下端に到達しており、この値より V_g を増加させても状態が存在しないのでコンダクタンス \mathcal{G} はゼロとなる。

次にコンダクタンス \mathcal{G} のゲート電圧 V_g に対する依存性がポテンシャルバリアの強さ Z の大きさに対してどのように変化するかを調べる。図 2.6 は強い RSOC ($E_\alpha/E_F = 0.3$) の下での、 $Zk_F/E_F = 0, 1.0, 3.0$ に対する (a) コンダクタンス \mathcal{G} の V_g 依存性、(b) $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の V_g 依存性を表す。図 2.6(b) より、 $eV_g/E_F = 1$ における $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の増加

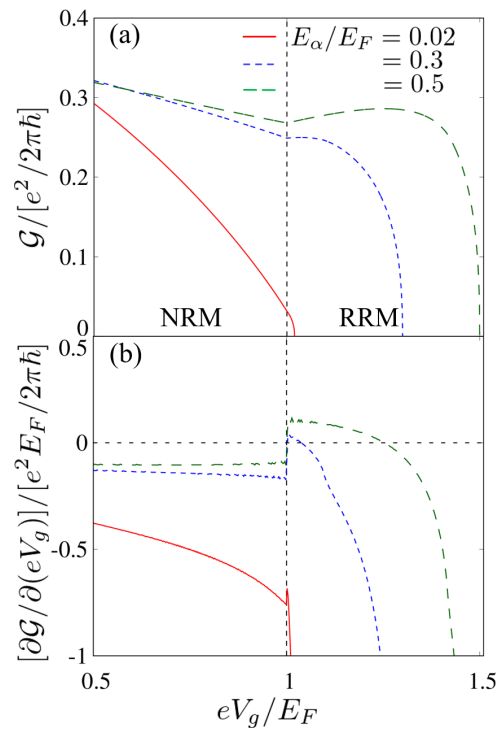


図 2.5 $E_\alpha/E_F = 0.02, 0.3, 0.5$ かつゼーマン磁場なし ($M = 0$) での (a) コンダクタンス \mathcal{G} の V_g 依存性。 (b) $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の V_g 依存性。ポテンシャルバリアに関するパラメータは $Zk_F/E_F = 1.0$ である。 $0 \leq eV_g/E_F \leq 1$ の範囲において、 \mathcal{G} の V_g 依存性は変化しないので見やすくするために $0.5 \leq eV_g/E_F$ の範囲でプロットした。同様の理由から (b) は $-1 \leq [\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)]/[e^2E_F/2\pi\hbar] \leq 0.5$ の範囲でプロットした。自身の論文 [2] より転載。

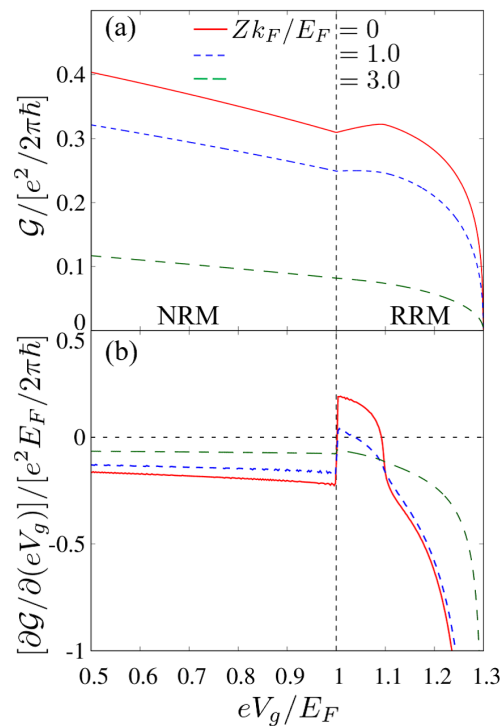


図 2.6 $Zk_F/E_F = 0, 1.0, 3.0$, 磁化なし ($M = 0$) での (a) コンダクタンス \mathcal{G} の V_g 依存性、(b) $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の V_g 依存性。ラッシュバエネルギー $E_\alpha = 0.3E_F$ である。 (b) は $-1 \leq [\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)]/[e^2E_F/2\pi\hbar] \leq 0.5$ の範囲でプロットした。自身の論文 [2] より転載。

がポテンシャルバリアの強さ Z の増加に伴い抑制されていることが分かる。その結果として、弱いポテンシャルバリア ($Zk_F/E_F = 0, 1.0$) の下では図 2.5 の $E_\alpha/E_F = 0.3, 0.55$ の場合と同様に $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ が $eV_g/E_F = 1$ で符号変化し、ラッシュバリング状態 (RRM) において \mathcal{G} が増加するのに対し、強いポテンシャルバリア ($Zk_F/E_F = 3.0$) の下では $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の符号変化がなくなり、 \mathcal{G} は電子状態に依らず V_g に対し単調減少になる。

以上のようにゼーマン磁場がないとき、正常ラッシュバ金属状態ではコンダクタンスがゲート電圧 V_g に対し単調減少するのに対し、強い RSOC の下ではラッシュバリング金属状態において V_g の増加に対し、コンダクタンスも増加することが明らかになった。このように電子状態の違いがコンダクタンスの V_g 依存性に反映されている。この電子状態に対するコンダクタンスの V_g 依存性の違いは RSOC が強く、ポテンシャルバリアが弱い場合により顕著になる。

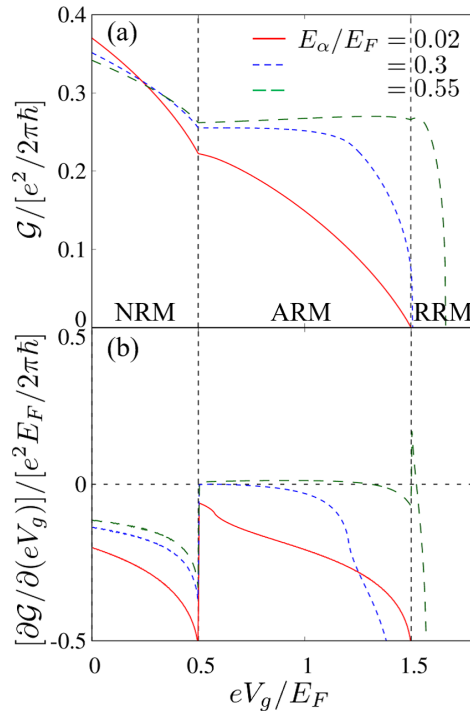


図 2.7 ゼーマン磁場 ($M/E_F = 0.5$) がある場合の $E_\alpha/E_F = 0.02, 0.3, 0.55$ に対する (a) \mathcal{G} の V_g 依存性、(b) $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の V_g 依存性。ポテンシャルバリアに関するパラメータは $Zk_F/E_F = 1.0$ である。 $E_\alpha/E_F = 0.02$ のときのバンド構造は図 2.3(c)、 $E_\alpha/E_F = 0.3, 0.5$ のときは図 2.3(b) である。自身の論文 [2] より転載。

次にゼーマン磁場がある場合の結果を示す。図 2.7 はゼーマン磁場がある場合 ($M/E_F = 0.5$) での (a) コンダクタンス \mathcal{G} のゲート電圧 V_g に対する依存性、(b) $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ のゲート電圧 V_g に対する依存性を表す。なお、 $E_\alpha/E_F = 0.02$ のときバンド構造は図 2.3(c) の形となり、電子状態としては正常ラッシュバ金属状態、異常ラッシュバ金属状態のみが存在する。 $E_\alpha/E_F = 0.3, 0.55$ のときは図 2.3(b) の形になり、正常ラッシュバ金属状態、異常ラッシュバ金属状態、ラッシュバリング金属状態が存在する。ゼーマン磁場がない場合と同様に正常ラッシュバ金属状態から異常ラッシュバ金属状態に、異常ラッシュバ金属状態からラッシュバリング金属状態に変化する際に $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ は不連続に変化する。弱い RSOC ($E_\alpha/E_F = 0.02, 0.3$) の下では、 \mathcal{G} は V_g に対し単調減少する。一方、強い RSOC ($E_\alpha/E_F = 0.55$) の下では、異常ラッシュバ金属状態とラッシュバリング金属状態において V_g の増加に対し、僅かではあるが \mathcal{G} の増加が見られた。

次にゼーマン磁場がある場合についてもコンダクタンス \mathcal{G} のゲート電圧 V_g に対する依存性がポテンシャルバリアの強さ Z の大きさに対しどのように変化するかを調べた。図 2.8 は、図 2.7 においてコンダクタンスの増加の見られた $E_\alpha/E_F = 0.55$ の下で Z を変化させたときの (a) コンダクタンス \mathcal{G} の V_g 依存性と (b) $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の V_g 依存性を表している。ここから、ゼーマン磁場がない場合と同様に $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の不連続な増加が Z の増加に伴い抑制され、強いポ

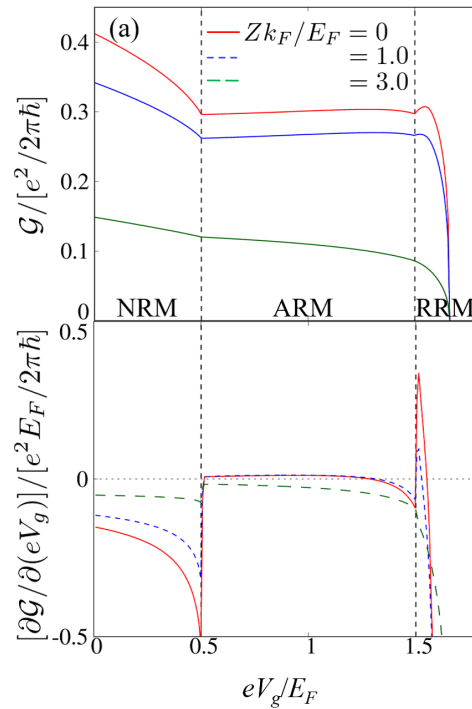


図 2.8 ゼーマン磁場 ($M/E_F = 0.5$) と強いラシュバ型スピン軌道相互作用 ($E_\alpha/E_F = 0.55$) の下での、 $Zk_F/E_F = 0, 1.0, 3.0$ に対する (a) コンダクタンスの \mathcal{G} の V_g 依存性、(b) $\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の V_g 依存性。自身の論文 [2] より転載。

テンシャルバリアの下ではコンダクタンス \mathcal{G} がゲート電圧 V_g に対し単調減少することが分かる。

以上のようにゼーマン磁場がある場合も、正常ラシュバ金属状態ではゲート電圧 V_g の増加に対し、コンダクタンスが単調減少するのに対し、強い RSOC の下では異常ラシュバ金属状態とラシュバリング金属状態において V_g が増加するとともに僅かではあるがコンダクタンスも増加することが明らかになった。このように RSOC とゼーマン磁場が共存する場合においても、電子状態の違いがコンダクタンスの V_g 依存性に反映される。この電子状態に対するコンダクタンスの V_g 依存性の違いも RSOC が強く、ポテンシャルバリアが弱い場合により顕著になる。

なお、ポテンシャルバリアが強い場合のコンダクタンス \mathcal{G} の V_g 依存性については、 $-\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ と RSOC とゼーマン磁場の共存する系の状態密度との間に数値的に良い対応関係が見られた。この対応関係は、透過率の定義式 (2.13) から期待される。 $-\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ と状態密度との間に数値的に良い対応関係が見られたことから、今回の接合系において強いポテンシャルバリアの下ではコンダクタンスが状態密度を通じて理解することが出来ることと期待される [図 2.9、図 2.10]。

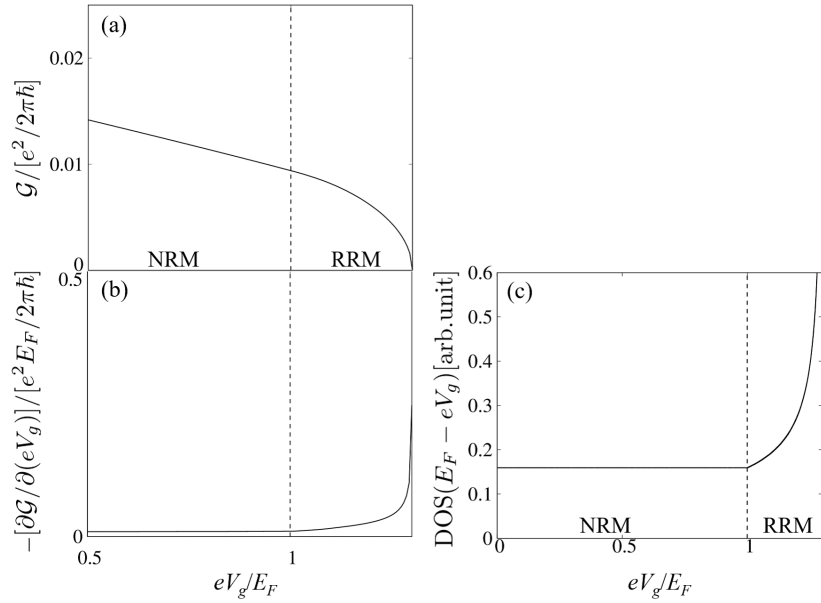


図 2.9 ゼーマン磁場なし ($M=0$), $Zk_F/E_F = 10.0$ における (a) コンダクタンス \mathcal{G} の V_g 依存性、(b) $-\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の V_g 依存性、(c) ラッシュバ型スピン軌道相互作用を有する二次元系の状態密度 (DOS) の V_g 依存性。パラメータは $E_\alpha/E_F = 0.3$ である。(b) は $0 \leq -[\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)]/[e^2 E_F/2\pi\hbar] \leq 0.5$ の範囲でプロットした。

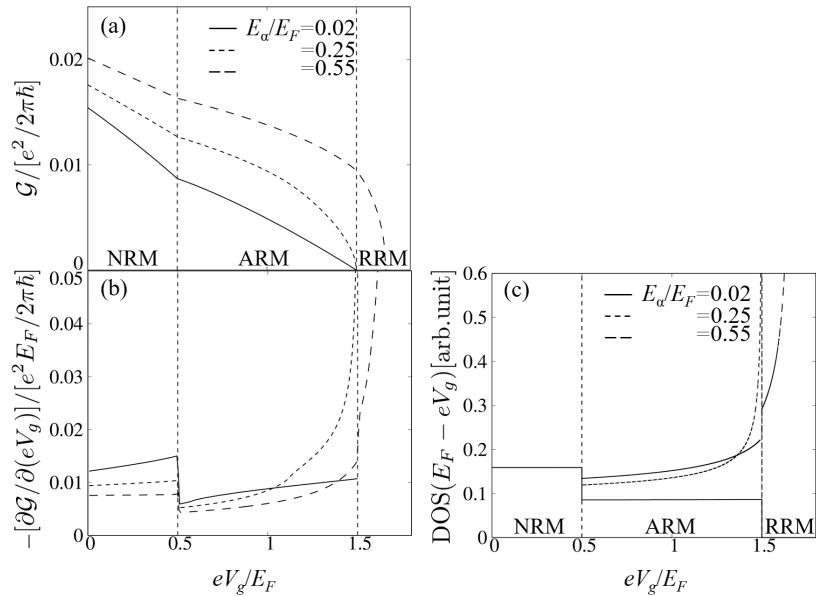


図 2.10 ゼーマン磁場あり ($M/E_F = 0.5$), $Zk_F/E_F = 10.0$ における (a) コンダクタンス \mathcal{G} の V_g 依存性、(b) $-\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)$ の V_g 依存性、(c) ラッシュバ型スピン軌道相互作用を有する二次元系の状態密度 (DOS) の V_g 依存性。(b) は $0 \leq -[\partial\mathcal{G}/\partial(eV_g)]/[e^2 E_F/2\pi\hbar] \leq 0.05$ の範囲でプロットした。

2.6 考察: コンダクタンスの増加について

RSOCがない場合、接合系の左右の接続が良い状態即ち透過率の高い状態からゲート電圧 V_g を増加させるとコンダクタンス \mathcal{G} が減少する。透過率の定義式 (2.13) より、このコンダクタンス \mathcal{G} の減少は電子の群速度の減少によって生じているものと理解することが出来る。一方、これまでの結果で示した通り、強いRSOCがある場合にはラシュバリング金属状態において V_g の増加とともに \mathcal{G} が増加することが明らかとなった。ポテンシャルバリアが強い場合はコンダクタンスは状態密度から理解できると期待されるが、強いポテンシャルバリアの下ではラシュバリング金属状態における \mathcal{G} の増加は見られず、このゲート電圧 V_g 依存性を状態密度から理解することは现阶段で難しい。そのため、ここでは式 (2.17) の波数 k_y 毎のコンダクタンス $G(k_y)$ について調べることでその原因について考察する。

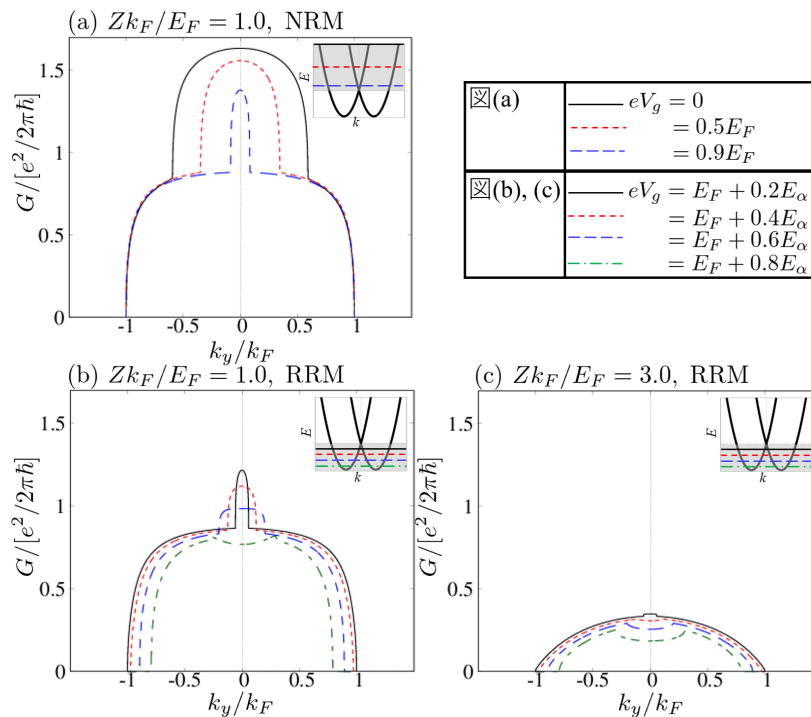


図 2.11 ゼーマン磁場なし ($M = 0$), $E_\alpha/E_F = 0.3$ における、いくつかの V_g の値に対する波数 k_y 毎のコンダクタンス $G(k_y)$ 。(a)-(b) $Zk_F/E_F = 1.0$ 、(c) 3.0 である。(a) は正常ラシュバ金属状態 (NRM)、(b)-(c) はラシュバリング金属状態 (RRM) での結果である。内挿図はバンド構造と各 V_g でのフェルミ準位の位置を示している。灰色の領域は対応する電子状態を表している。自身の論文 [2] より転載。

まず初めにゼーマン磁場がない場合 ($M = 0$) について考える。図 2.11 はゼーマン磁場がない場合にいくつかの V_g の値に対し、波数 k_y 毎のコンダクタンス $G(k_y)$ をプロットしたものである。図 2.11(a) と (b) はラシュバリング金属状態においてコンダクタンス \mathcal{G} の増加が見られた $Zk_F/E_F = 1.0$ での (a) 正常ラシュバ金属状態 (NRM)、(b) ラシュバリング金属状態における結果である。図 2.11(c) はラシュバリング金属状態においてコンダクタンス \mathcal{G} の増加が見られなかった $Zk_F/E_F = 3.0$ でのラシュバリング金属状態における結果である。どの結果についてもプロットの中央部に突出した部分あるいは窪んでいる箇所が見られる。この箇所の幅は丁度 $2k_1$ で、この箇所が接合右部の二枚のフェルミ面のうち内側のフェルミ面に対応していることが分かる [図 2.4, 図 2.12]。正常ラシュバ金属状態ではゲート電圧 V_g の増加に対し内側のフェルミ面が縮小するため、 V_g の増加に対しこの箇所の幅も減少する。また、 V_g の増加とともに群速度も低下するので $G(k_y)$ の値も低下する [図 2.11(a)]。更に V_g をラシュバリング金属状態に変化する点ギリギリの値にすると $k_y = 0$ に非常に細いピークが残る。一方、ラシュバリング金属状態に変化すると V_g の増加に対し内側の

フェルミ面が拡大するため、残っていたピークの幅が拡がり \mathcal{G} を増加させる。しかし、 V_g の増加に対し群速度は低下するので、同じ k_y について $G(k_y)$ を見ると V_g の増加に伴い $G(k_y)$ の値は低下する [図 2.11(b)]。

このようにラシュバリング金属状態ではゲート電圧 V_g の増加に伴う内側のフェルミ面の拡大がコンダクタンス \mathcal{G} の増加に、群速度の減少が \mathcal{G} の減少に寄与している状態で、フェルミ面の拡大の寄与が群速度の減少からの寄与を上回ると \mathcal{G} が増加する。しかし、ポテンシャルバリアが強い状況では内側のフェルミ面からの \mathcal{G} への寄与が抑制され、フェルミ面の拡大の寄与が群速度の減少の寄与を下回るため、 V_g の増加に対し \mathcal{G} が低下する [図 2.11(c)]。

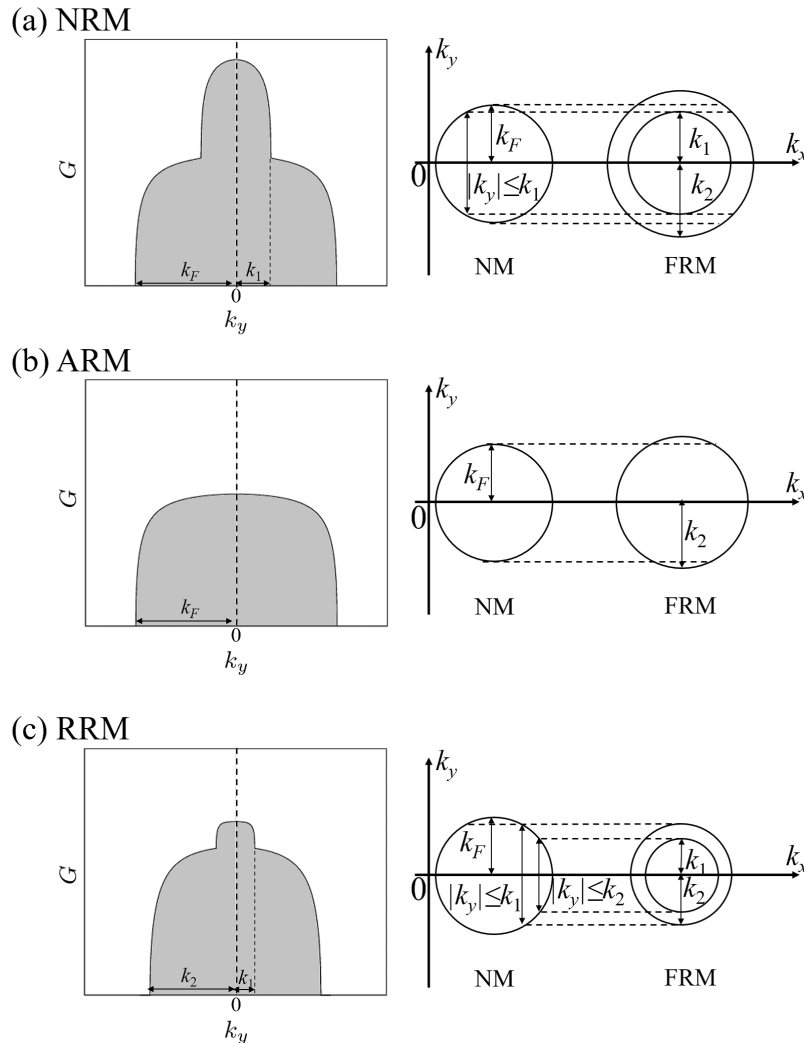


図 2.12 波数とフェルミ面の関係図。(a) は正常ラシュバ金属状態 (NRM)、(b) は異常ラシュバ金属状態 (ARM)、(c) はラシュバリング金属状態 (RRM) である。コンダクタンス \mathcal{G} は灰色の領域の面積に比例する。(a),(c) は自身の論文 [2] より転載。

次にゼーマン磁場がある場合の結果を見る。図 2.13 はいくつかの V_g の値に対し、波数 k_y 毎のコンダクタンス $G(k_y)$ をプロットしたものである。図 2.11(a) は正常ラシュバ金属状態 (NRM)、(b) は異常ラシュバ金属状態 (ARM)、(c) はラシュバリング金属状態 (RRM) における結果である。これらの結果でもゼーマン磁場がない場合と同様に、内側のフェルミ面に対応してプロットの中央部に突出した部分あるいは窪んでいる箇所が見られる。また、ゼーマン磁場がない場合と同様に正常ラシュバ金属状態ではゲート電圧 V_g の増加に対し内側のフェルミ面が縮小するため、 V_g の増加に伴いこの箇所の幅が減少する。また、 V_g の増加とともに群速度も低下するので $G(k_y)$ の値も低下する [図 2.13(a)]。し

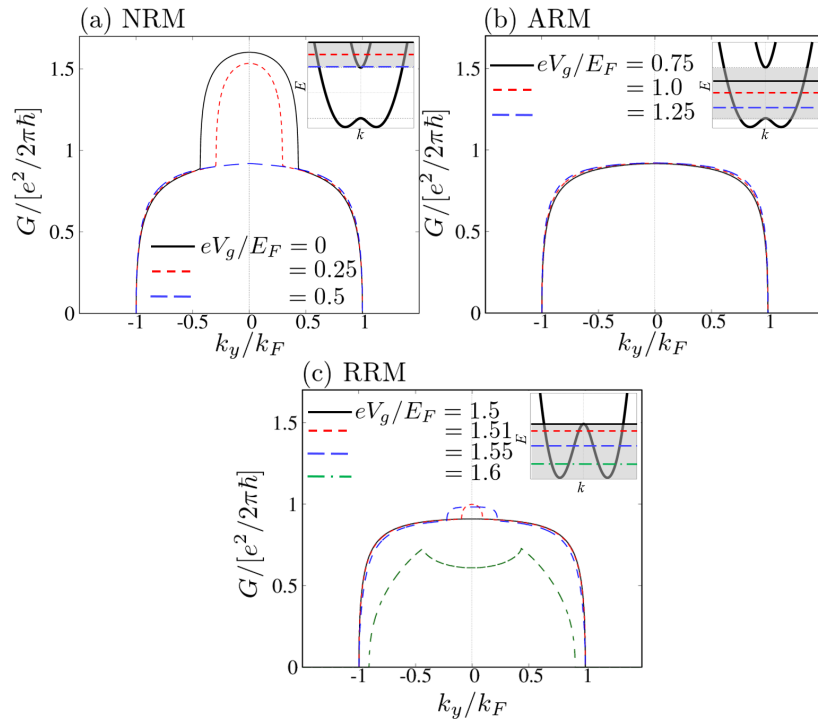


図 2.13 ゼーマン磁場あり ($M/E_F = 0.5$), $E_\alpha/E_F = 0.55$, $Zk_F/E_F = 1.0$ における、いくつかの V_g の値に対する波数 k_y 毎のコンダクタンス $G(k_y)$ 。(a) は正常ラシュバ金属状態 (NRM)、(b) は異常ラシュバ金属状態 (ARM)、(c) はラシュバリング金属状態 (RRM) での結果ある。内挿図はバンド構造と各 V_g でのフェルミ準位の位置を示している。灰色の領域は対応する電子状態を表している。自身の論文 [2] より転載。

かし、ゼーマン磁場がない場合とは異なる点がある。ゼーマン磁場がない場合は内側のフェルミ面に対応する箇所は正常ラシュバ金属状態からラシュバリング金属状態に変化する際細いピークとして残る。一方、ゼーマン磁場がある場合は異常ラシュバ金属状態で内側のフェルミ面が消失することに対応して、この箇所が完全に消失する [図 2.13(b)]。しかし、 V_g を増加して異常ラシュバ金属状態からラシュバリング金属状態に変化させると内側のフェルミ面が復活するのでこの箇所も復活する。それに伴いラシュバリング金属状態でコンダクタンス \mathcal{G} が増加する。さらに V_g を増加させると、ゼーマン磁場がない場合と同様に内側のフェルミ面の拡大によるコンダクタンス \mathcal{G} への寄与と群速度の減少によるコンダクタンスへの寄与の大小関係でコンダクタンス \mathcal{G} が決まる。

以上のようにゼーマン磁場がない場合、ある場合どちらも内側のフェルミ面からの寄与によってラシュバリング金属状態においてゲート電圧 V_g の増加に対しコンダクタンス \mathcal{G} が増加することが明らかになった。しかし、ゼーマン磁場がない場合は内側のフェルミ面が V_g の増加に伴い k_y 方向に拡大することが \mathcal{G} の増加の原因であるのに対し、磁場がある場合は異常ラシュバ金属状態で消失した内側のフェルミ面が復活することが原因となっており、両者の場合で \mathcal{G} が増加する理由は本質的には異なる。ゼーマン磁場がない場合は二次元系であるためにコンダクタンスが増加するのに対し、ゼーマン磁場がある場合は二次元系である必要はないのである。実際、 $G(k_y = 0)$ 即ち一次元でのコンダクタンスのゲート電圧 V_g に対する依存性を調べると図 2.14 のように、ゼーマン磁場がない場合ではラシュバリング金属状態 (RRM) においてコンダクタンスの増加が見られず、ゼーマン磁場がある場合にはラシュバリング金属状態においてコンダクタンスの増加が見られる。この結果はこの結論を裏付けるものである。

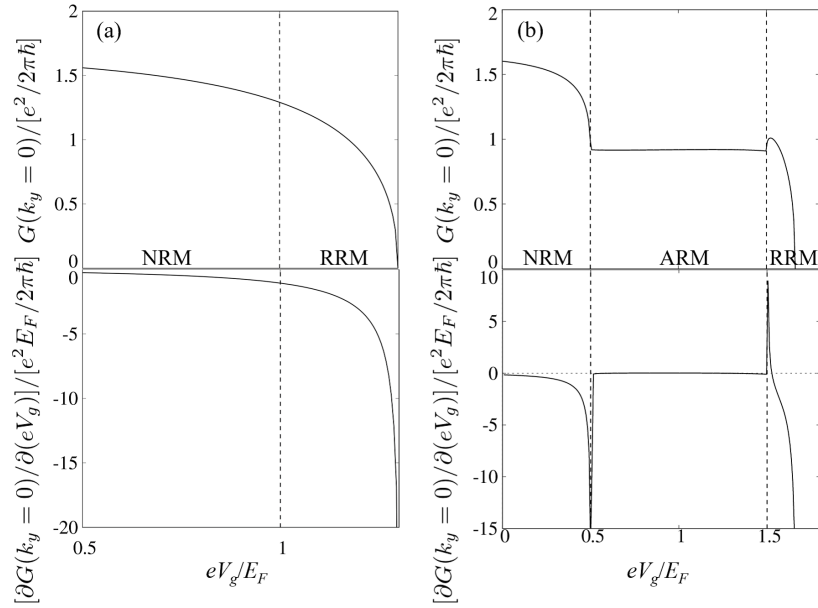


図 2.14 $Zk_F/E_F = 1.0$ における $G(k_y = 0)$ と $\partial G(k_y = 0)/\partial(eV_g)$ 。(a) ゼーマン磁場なしの場合、(b) ゼーマン磁場あり ($M/E_F = 0.5$) の場合。パラメータは (a) $E_\alpha/E_F = 0.3$, (b) $E_\alpha/E_F = 0.55$ である。

2.7 第2章まとめ

ラッ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ではフェルミ準位に依存して波数空間中でのスピン構造や状態密度のエネルギー依存性の異なる三つの電子状態 (正常ラッシュバ金属状態、異常ラッシュバ金属状態、ラッシュバリング金属状態) が現れる。本研究では図 2.2 の接合系において、ゲート電圧によりフェルミ準位を変化させて電子状態を変化させながらコンダクタンスを計算することで、これらの電子状態の違いが電気伝導にどのような違いを与えるかを調べた。その結果として正常ラッシュバ金属状態ではコンダクタンスがゲート電圧 V_g の増加に対し単調するのに対し、強いラッシュバ型スピン軌道相互作用の下では異常ラッシュバ金属状態、ラッシュバリング金属状態においてコンダクタンスが増加することが明らかになった。このラッシュバリング金属状態におけるコンダクタンスの増加は、ラッ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持つ二枚のフェルミ面のうち、内側のフェルミ面に起因していると考えられる。

第 3 章

トポロジカルディラック半金属におけるスピンホール効果

3.1 本研究の背景

一般にシュレディンガー方程式から自由電子系ではエネルギー E と波数 k の間には $E \propto k^2$ の関係が成り立ち、バンド分散は放物線になる。一方、グラフェンや三次元のトポロジカル絶縁体の表面 [145] などでは $E \propto k$ の関係を満たす線形分散が見られる。この線形分散に従う粒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考えられており注目を集めている。この線形分散をその形からディラックコーンと呼ぶ。これまでディラックコーンはグラフェンや三次元のトポロジカル絶縁体の表面のような二次元の系で発見されていたのに対し、近年では三次元の系でも発見されている [131, 132, 140]。

それが本研究で取り扱うトポロジカルディラック半金属 (TDSM) である。TDSM のバルクのバンド分散はフェルミ準位近傍で対のディラックコーンと見なすことが出来る。これらのディラックコーンはある波数”ディラック点”で接している。また、以降で説明する通り、TDSM はノンゼロのトポロジカル不変量を持つ [136]。このようにノンゼロのトポロジカル不変量とフェルミ準位近傍対のディラックコーンを持つ三次元物質が TDSM である。実際に TDSM の実現している系としては、三回回転対称性を持つ Na_3Bi [79, 131] や四回回転対称性を持つ Cd_3As_2 [4, 78, 132] が発見されている [図 3.1]。

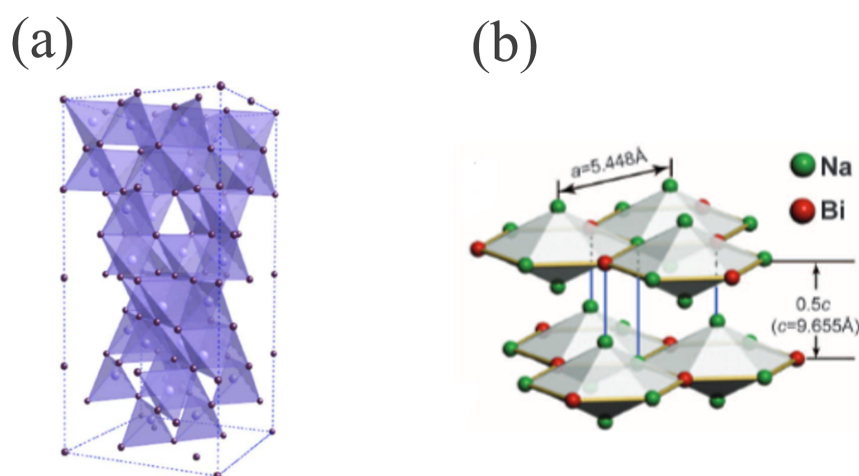


図 3.1 (a) Cd_3As_2 [85], (b) Na_3Bi [78]

TDSM はディラックコーンを対で持つ物質としてその電磁気学的応答にも注目が集まっており様々な研究が行われている [8, 25, 49, 76, 126]。その内の一つとして 2016 年に Burkov と Kim によって TDSM におけるスピンホール効果が調べられた [25]。スピンホール効果は非磁性材料に電場 (電流) を印加すると電場 (電流) に対し垂直方向にスピン流が生成される現象である [106]。この現象はスピン軌道相互作用によりアップスピンの電子とダウンスピンの電子がそれぞれ反対方向の力を感じることで生じる。このスピンホール効果の強さを表す量としてスピンホールコンダクタンス σ_{xy}^z が印加した電場 E_{ex} とスピンホール効果によって生成されるスピン流 j_S を用いて、 $\sigma_{xy}^z = j_S/E_{\text{ex}}$ のように定義される。スピンホール効果を引き起こすスピン軌道相互作用には二つの起源が考えられている。一つ目は固体のバンド分散に起因するものであり、内因性と呼ばれる [84, 105]。二つ目は不純物散乱や不純物そのもののスピン軌道相互作用に起因するもので外因性と呼ばれる [52, 141]。Burkov と Kim は特に TDSM のバンド分散が低エネルギー近傍でのディラックコーンを持つという点に注目して、TDSM の内因性スピンホール効果について調べた。その結果として低温で内因性のスピンホールコンダクタンスが二つのディラックコーンのディラック点間の距離に比例することを明らかにした [25]。

3.2 本研究の目的

Burkov と Kim はトポロジカルディラック半金属 (TDSM) の実現する格子モデルのハミルトニアン $\tilde{H}(\mathbf{k})$ [格子モデルのハミルトニアンの詳細については後述]

$$\tilde{H}(\mathbf{k}) = a_1(\mathbf{k})\sigma^x s^z + a_2(\mathbf{k})s^0\sigma^y + a_3(\mathbf{k})s^0\sigma^z + a_4(\mathbf{k})\sigma^x s^x + a_5(\mathbf{k})\sigma^x s^y,$$

$$\begin{aligned} a_1(\mathbf{k}) &= \eta \sin k_x, \\ a_2(\mathbf{k}) &= -\eta \sin k_y, \\ a_3(\mathbf{k}) &= M - t_{xy}(\cos k_x + \cos k_y) - t_z \cos k_z, \\ a_4(\mathbf{k}) &= (\beta + \gamma) \sin k_z (\cos k_y - \cos k_x), \\ a_5(\mathbf{k}) &= -(\beta - \gamma) \sin k_z \sin k_y \sin k_x. \end{aligned}$$

をフェルミ準位 $E = 0$ 上の $(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上に現れる二つのディラック点の近傍で線形近似してハミルトニアン \tilde{H}_{\pm} を得た。

$$H_{\pm} = \hbar v(k_x s^z \sigma^x - k_y s^0 \sigma^y) \pm \hbar \tilde{v}(k_z \mp k_0) s^0 \sigma^z \quad (3.1)$$

この \tilde{H}_{\pm} から内因性スピンホールコンダクタンスを計算した [25]。その結果として低温極限で内因性スピンホールコンダクタンスが二つのディラックコーンのディラック点間の距離に比例することを明らかにした [25]。ここで注目すべき点は、この線形近似したハミルトニアンではフェルミ準位近傍以外の情報が完全に無視されている点である。このような近似を用いること背景には、低温での物理量にはフェルミ準位近傍しか寄与しないという暗黙の期待がある。しかし、この期待に反する物理量が見つかっている。一例として、量子ホール絶縁体における低温でのホールコンダクタンスを挙げることができる。このホールコンダクタンスは式 (1.77) で定義されるチャーン数で量子化されている [124]。このチャーン数は式 (1.77) の定義の通り、フェルミ準位以下のバンドでブリルアンゾーン全体で積分する量であるため、このホールコンダクタンスは低温での物理量であるにも関わらずフェルミ準位近傍のみで決まらない。

この量子ホール絶縁体におけるホールコンダクタンスのように低温での物理量にフェルミ準位近傍以外が寄与する場合があることを踏まえると、フェルミ準位上のディラック点近傍で線形近似をして得たハミルトニアンから得られた結果が実際の TDSM におけるスピンホール効果を記述しているかは疑問である。実際、TDSM と類似したバンド分散を持つワイル半金属におけるカイラル磁気効果 [127] や異常ネルンスト効果の研究 [43] では線形近似から得たハミルトニアンを用いた計算では現象をうまく記述できていないことが指摘されている。そこで本研究ではディラック点近傍で

線形近似をすることなく、格子モデルのハミルトニアンを用いてフェルミ準位近傍以外の寄与も考慮して内因性スピンホールコンダクタンスの計算を行う。

この章の構成は以下の通りである。まず最初に今回の計算で取り扱う格子モデルのハミルトニアンの紹介とその性質の確認を行う。次にスピンホールコンダクタンスの計算方法の導出を行う。次に本研究では Burkov と Kim の先行研究とは異なる方法で計算を行うので、実際に線形近似をしたモデルから我々の計算方法でも同様の結果が得られることを示す。次に格子モデルのハミルトニアンからスピンホールコンダクタンスを計算する。

3.3 格子モデルとその特徴

まず初めに、今回の計算で取り扱う格子モデルの紹介とその特徴の確認を行う。今回の計算で取り扱う系は正方晶即ち四重回転対称性を持つモデルを取り扱う。現実の物質としては Cd_3As_2 をこのモデルで表すことができる。本系を記述する最小のハミルトニアンは以下の通りである [136]。

$$\begin{aligned} \check{H}(\mathbf{r}) = & \frac{\eta}{2} \sum_{\mathbf{r}} (-ic_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^x s^z c_{\mathbf{r}+\mathbf{x}} + ic_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^y s^0 c_{\mathbf{r}+\mathbf{y}} + \text{H.c.}) \\ & + M \sum_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^z s^0 c_{\mathbf{r}} - \frac{t_{xy}}{2} \sum_{\mathbf{r}} (c_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^z s^0 c_{\mathbf{r}+\mathbf{x}} + c_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^z s^0 c_{\mathbf{r}+\mathbf{y}} + \text{H.c.}) - \frac{t_z}{2} \sum_{\mathbf{r}} (c_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^z s^0 c_{\mathbf{r}+\mathbf{z}} + \text{H.c.}) \\ & + \frac{(\beta + \gamma)}{4} \sum_{\mathbf{r}} (-ic_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^x s^x c_{\mathbf{r}+\mathbf{y}+\mathbf{z}} - ic_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^x s^x c_{\mathbf{r}-\mathbf{y}+\mathbf{z}} + ic_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^x s^x c_{\mathbf{r}+\mathbf{x}+\mathbf{z}} + ic_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^x s^x c_{\mathbf{r}-\mathbf{x}+\mathbf{z}} + \text{H.c.}) \\ & - \frac{(\beta - \gamma)}{8} \sum_{\mathbf{r}} (ic_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^x s^y c_{\mathbf{r}+\mathbf{x}+\mathbf{y}+\mathbf{z}} + ic_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^x s^y c_{\mathbf{r}-\mathbf{x}-\mathbf{y}+\mathbf{z}} + ic_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^x s^y c_{\mathbf{r}+\mathbf{x}-\mathbf{y}-\mathbf{z}} + ic_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma^x s^y c_{\mathbf{r}-\mathbf{x}+\mathbf{y}-\mathbf{z}} + \text{H.c.}). \end{aligned} \quad (3.2)$$

ただし、 $c_{\mathbf{r}}^{\dagger} = [c_{s,\uparrow,\mathbf{r}}^{\dagger}, c_{p_x+ip_y,\uparrow,\mathbf{r}}^{\dagger}, c_{s,\downarrow,\mathbf{r}}^{\dagger}, c_{p_x-ip_y,\downarrow,\mathbf{r}}^{\dagger}]$ である。ここで η は $x-y$ 平面内の最近接ホッピング、 $\beta + \gamma$ は $y-z$ 、 $z-x$ 面での次近接のホッピング、 $\beta - \gamma$ は体対角方向へのホッピング、 M は軌道間のオンサイトポテンシャルの差、 t_z は z 軸方向のホッピング、 t_{xy} は異軌道間での x, y 方向のホッピングの差である。 $\sigma^{i=x,y,z}$ 、 $s^{i=x,y,z}$ はそれぞれ軌道とスピンを表すパウリ行列である。式 (3.2) を波数空間のハミルトニアンに書きなおすと

$$\check{H}(\mathbf{k}) = a_1(\mathbf{k}) \sigma^x s^z + a_2(\mathbf{k}) s^0 \sigma^y + a_3(\mathbf{k}) s^0 \sigma^z + a_4(\mathbf{k}) \sigma^x s^x + a_5(\mathbf{k}) \sigma^x s^y \quad (3.3)$$

となる。基底は $|s, \uparrow, J_z = 1/2\rangle$ 、 $|p_x + ip_y, \uparrow, J_z = 3/2\rangle$ 、 $|s, \downarrow, J_z = -1/2\rangle$ 、 $|p_x - ip_y, \downarrow, J_z = -3/2\rangle$ である [48, 67, 136]。 J_z は全角運動量、 \uparrow, \downarrow は電子のスピンを表す。 $a_{i=1,2,3,4,5}$ は以下の実関数である。

$$a_1(\mathbf{k}) = \eta \sin k_x, \quad (3.4)$$

$$a_2(\mathbf{k}) = -\eta \sin k_y, \quad (3.5)$$

$$a_3(\mathbf{k}) = M - t_{xy}(\cos k_x + \cos k_y) - t_z \cos k_z, \quad (3.6)$$

$$a_4(\mathbf{k}) = (\beta + \gamma) \sin k_z (\cos k_y - \cos k_x), \quad (3.7)$$

$$a_5(\mathbf{k}) = -(\beta - \gamma) \sin k_z \sin k_y \sin k_x. \quad (3.8)$$

ここで a_4, a_5 はスピンを混成する項である。このハミルトニアンのエネルギー固有値は

$$E_{n(m)}(\mathbf{k}) = +(-) \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + a_4^2 + a_5^2} \quad (3.9)$$

であり、それぞれ二重に縮退している。

ここでこの系の持つトポロジカル不変量にも注目する。この格子モデルのハミルトニアンは以下のように時間反転対

称性、空間反転対称性、四回回転対称性を持つ [48]。

$$\mathcal{T}H(\mathbf{k})\mathcal{T}^\dagger = H(-\mathbf{k}), \quad (3.10)$$

$$\mathcal{T} = i\sigma^0 s^y \mathcal{K}, \quad (3.11)$$

$$\mathcal{P}H(\mathbf{k})\mathcal{P}^\dagger = H(-\mathbf{k}), \quad (3.12)$$

$$\mathcal{P} = \sigma^z s^0, \quad (3.13)$$

$$C_4 H(k_x, k_y, k_z) C_4^\dagger = H(k_y, -k_x, k_z), \quad (3.14)$$

$$C_4 = e^{i(2\sigma^0 + \sigma^z) s^z \pi/4} \quad (3.15)$$

また、反転対称性と四回回転対称性を持つため、 $x-y$ 面に対するミラー対称性を持つことも分かる。

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{xy} H(k_x, k_y, k_z) \mathcal{M}_{xy}^\dagger &= H(k_x, k_y, -k_z), \\ \mathcal{M}_{xy} &= \mathcal{P} C_4^2 = i\sigma^0 s^z. \end{aligned} \quad (3.16)$$

式 (3.16) より、この系は $k_z = 0, \pi$ で交換関係 $[\check{H}, \mathcal{M}_{xy}] = 0$ を満たす。そのため $k_z = 0, \pi$ ではハミルトニアン \check{H} をミラー演算子 \mathcal{M}_{xy} の固有値が $+i$ と $-i$ のセクターにブロック対角化することが出来る。このミラー演算子の固有値が $\pm i$ のセクターに対し、チャーン数を計算しその差分をとることで、この系を特徴づけるトポロジカル不変量であるミラーチャーン数 $n_M(k_z)$ を得る。

$$n_M(k_z) \equiv \frac{1}{2} [n_{+i}(k_z) - n_{-i}(k_z)] \quad (3.17)$$

$n_{\pm i}$ はミラー演算子の固有値が $\pm i$ のセクターに対するチャーン数である。この系のミラーチャーン数を $k_z = 0, \pi$ についてそれぞれ計算したものが以下の図 3.2 である。ここで $k_z = 0, \pi$ のどちらでもミラーチャーン数が 0 のパラメータ領域はトポロジカルに自明、 $k_z = 0, \pi$ のいずれかで ± 1 を持つパラメータ領域はトポロジカルに非自明な状態である。このように、この系はミラーチャーン数 $n_M = \pm 1$ の二値すなわち \mathbb{Z}_2 で特徴づけられている。三回回転対称性を有する格子モデルの場合はミラー対称性を持たないが、同様に \mathbb{Z}_2 トポロジカル不変量を持つ [136]。

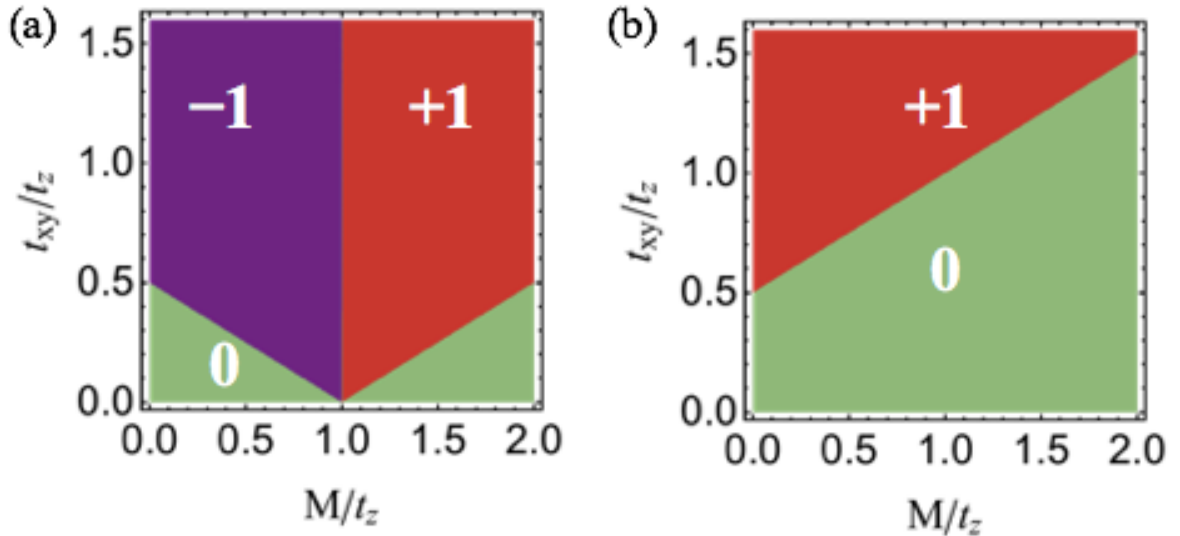


図 3.2 (a) $k_z = 0$ 面、(b) $k_z = \pi$ 面におけるミラーチャーン数 n_M のパラメータ依存性。緑色、赤色、紫色のパラメータ領域はそれぞれミラーチャーン数が 0, +1, -1 の領域である。 $k_z = 0, \pi$ のいずれかでノンゼロのミラーチャーン数を持つトポロジカルに非自明な状態である。自身の論文 [3] より転載。

これらの $k_z = 0$ 面と $k_z = \pi$ 面におけるミラーチャーン数で相を分類し、各相におけるディラック点の現れる位置を記載したものが図 3.3 である [136]。具体的に各相の説明を行うと $M/t_z + 2t_{xy}/t_z - 1 < 0$ のパラメータ領域ではディラック半金属相 (DSM) を示す [図 3.3(c)]。この相では $\Gamma - Z$ 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上] 並びに $M - A$ 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (\pm\pi, \pm\pi)$ の線上] にディラック点とディラックコーンが対で現れる。また、ミラーチャーン数は $k_z = 0, \pi$ のいずれも 0 である。 $M/t_z \pm 2t_{xy}/t_z \mp 1 > 0$, $M/t_z - 2t_{xy}/t_z - 1 < 0$ の領域ではトポロジカルディラック半金属相 (TDSM) を示す [図 3.3(b),(e)]。この相では $\Gamma - Z$ 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上] にディラック点とディラックコーンが対で現れる。また、 $k_z = 0$ でノンゼロのミラーチャーン数を持つ。 $M/t_z - 2t_{xy}/t_z - 1 < 0$ の領域は弱いトポロジカル絶縁体もしくはトポロジカル結晶絶縁体 (WTI/TCI) に分類される [図 3.3(a),(d)]。このときバルクではギャップがあいている。また、 $k_z = 0, \pi$ のどちらでもノンゼロのミラーチャーン数を持っている [136]。ここで気を付けたい点は $k_z = 0$ でのミラーチャーン数の符号が $M/t_z = 1$ を境に変化している点である。これは $M/t_z = 1$ で X 点 [即ち $(k_x, k_y, k_z) = (\pm\pi, 0, 0), (0, \pm\pi, 0)$] においてバンドが接することに対応している。ミラーチャーン数が $M/t_z = 1$ で変化するため、TDSM 相は TDSM (I) と TDSM (II) の二つの相に分けることができる。ただし、 $\Gamma - Z$ 線上にディラック点とディラックコーンが対で現れる点はどちらも同じである。また、WTI/TCI 相も $M/t_z = 1$ を境に二つの相に分けることができる。特に $M/t_z > 1$ では k_z に依らず同じミラーチャーン数を持つため、実質二次元の TCI と見なすことが出来るので 2D TCI、 $M/t_z < 1$ ではミラーチャーン数が k_z に依存するため 3D TCI と書くことにする。

ここまでの各相の様子は $\beta, \gamma \neq 0$ 即ちハミルトニアン a_4, a_5 の項が有限の場合を想定している。この場合、 X 点 [即ち $(k_x, k_y, k_z) = (\pm\pi, 0, 0), (0, \pm\pi, 0)$] では $M/t_z = 1$ 直上でのみバンドの接触が起こる。一方、 $\beta = \gamma = 0$ 即ち a_4, a_5 の項がゼロの場合は $M/t_z < 1$ の領域で X 点近傍 $(k_x, k_y) = (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$ の線上に対するディラックコーンとディラック点とが安定に存在する。 $\beta, \gamma \neq 0$ の場合はこのディラックコーンにギャップが開き、ディラック点が消滅する。

以上のように格子モデルではパラメータ $M/t_z, t_{xy}/t_z$ に応じて複数の相が現れる。特に $M/t_z \pm 2t_{xy}/t_z \mp 1 > 0$, $M/t_z - 2t_{xy}/t_z - 1 < 0$ の領域で、今回の研究で注目するトポロジカルディラック半金属相が現れる。この相は $M/t_z = 1$ を境にミラーチャーン数の違いで二つに分けることができるが、どちらも $\Gamma - Z$ 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上] にディラック点とディラックコーンが対で現れる点は同じである。

3.4 スピンホールコンダクタンスの計算方法

ここではケルディッシュグリーン関数の方法を用いて、スピンホールコンダクタンスを導出する。スピン流の流れの密度は以下のように定義される [106]。

$$j_{s,i}^\alpha = \langle \psi^\dagger v_{s,i}^\alpha \psi \rangle, \quad (3.18)$$

ここで $v_{s,i}^\alpha = \{v_i, \frac{\hbar}{2} s^\alpha \sigma^0\}/2$ はスピンに対する速度演算子で、電子の速度演算子 $v_i = \partial H / (\hbar \partial k_i)$ を用いて定義される。 $\psi^\dagger = (\psi_{s,\uparrow}^\dagger, \psi_{p_x+i p_y,\uparrow}^\dagger, \psi_{s,\downarrow}^\dagger, \psi_{p_x-i p_y,\downarrow}^\dagger)$ は生成演算子を表す。ここでスピン流 $j_{s,i=x,y,z}^\alpha$ の添え字 $i = x, y, z$ は偏極方向、 α はスピン流の流れる方向を表す。ここで外部電場 $E_{ex,y}$ に対し、スピン流 j_x^z が生じるとすると、線形応答の範囲内では以下のようにスピンホールコンダクタンス σ_{xy}^z を定義できる。

$$\sigma_{xy}^z \equiv j_x^z / E_{ex,y}. \quad (3.19)$$

スピンホールコンダクタンスはハミルトニアン $\hat{H}(\mathbf{k})$ のグリーン関数 $G(\mathbf{k}, \omega)$ を用いて以下のように書くことができる [106, 115]。

$$\sigma_{xy}^z = \frac{e\hbar}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \omega} \text{Tr} [v_{s,x}^z G(\mathbf{k}, \omega) v_y G(\mathbf{k}, \omega + \Omega)]_{\Omega \rightarrow 0}^<, \quad (3.20)$$

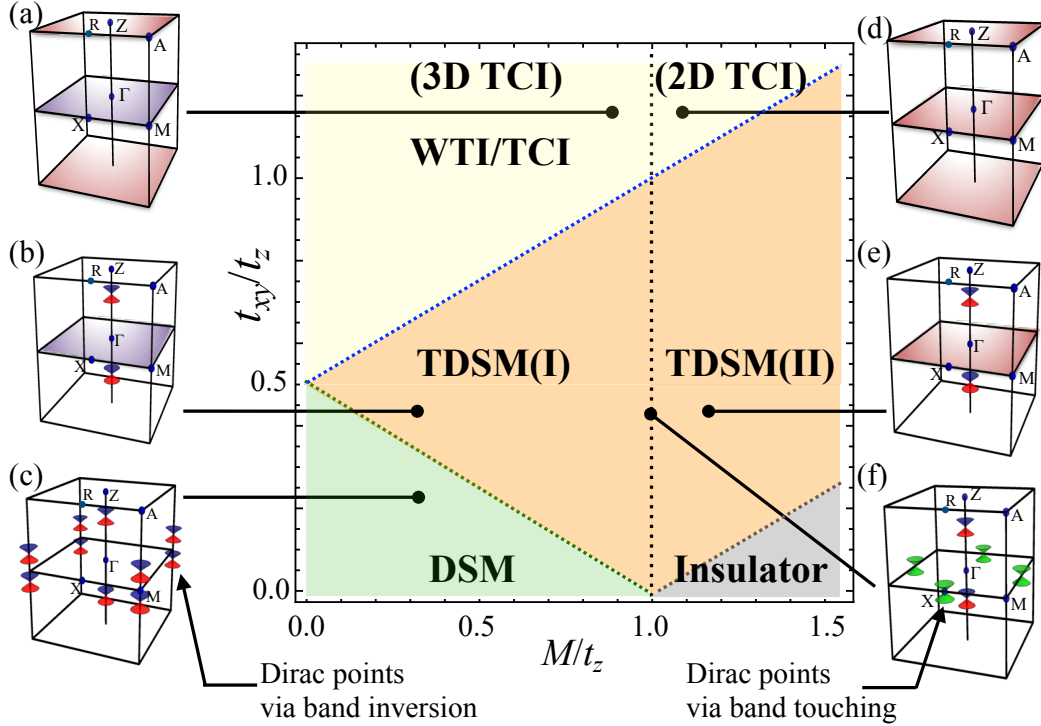


図 3.3 格子モデルの相図。ここで M は軌道間のオンサイトポテンシャルの差、 t_z は z 軸方向のホッピング、 t_{xy} は異軌道間での x, y 方向のホッピングの差である [136]。各相は $k_z = 0$ 面、 $k_z = \pi$ 面におけるミラーチャーン数及びディラック点の位置で特徴づけられる。(a)-(f) は各相におけるディラックコーンとディラック点 (図中の赤と青のコーン) の現れる位置を表している。これらのディラックコーンはバンドの交差で生じる。緑のコーンはバンドの接触により生じるディラックコーンである。図中の赤 (青) の面はミラーチャーン数が $n_M = +1(-1)$ の面を示している。ここで X 点 [即ち $(k_x, k_y, k_z) = (\pm\pi, 0, 0), (0, \pm\pi, 0)$] におけるディラック点についてコメントをすると $\beta, \gamma \neq 0$ の場合は $M/t_z = 1$ でのみ X 点にディラック点が生じるが、 $\beta = \gamma = 0$ では $M/t_z < 1$ の領域で $(k_x, k_y) = (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$ の線にペアのディラックコーンとディラック点安定に存在する。自身の論文 [3] より転載。

ここで $e < 0$ は素電荷、 $\Omega(\rightarrow 0)$ は印可電場 $E_{ex,y}$ の振動数である。添え字の " $<$ " はグリーン関数のレスサーの部分を表す。この式を展開すると以下の式を得る。

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^z = e\hbar \sum_{\mathbf{k}, \omega} \frac{\partial f(\omega)}{\partial \omega} \text{Tr} \left[v_{s,x}^z G^r(\mathbf{k}, \omega) v_y G^a(\mathbf{k}, \omega) \right] \\ + \frac{e\hbar}{2} \sum_{\mathbf{k}, \omega} f(\omega) \text{Tr} \left[v_{s,x}^z \left(\frac{\partial G^a(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} v_y G^a(\mathbf{k}, \omega) - G^a(\mathbf{k}, \omega) v_y \frac{\partial G^a(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \right) - \text{h.c.} \right], \end{aligned} \quad (3.21)$$

f はフェルミ分布関数、 $G^r(\mathbf{k}, \omega) = [\hbar\omega - \mathcal{H} + i\delta]^{-1}$ は遅延グリーン関数、 $G^a(\mathbf{k}, \omega) = [G^r(\mathbf{k}, \omega)]^\dagger$ である。 δ は微小な正の値である。式 (3.21) から最終的に σ_{xy}^z として以下を得る。

$$\sigma_{xy}^z = e\hbar \sum_{\mathbf{k}} [f(E) - f(-E)] \Omega_{xy}^z, \quad (3.22)$$

$f(E) = [1 + \exp(E - \mu)/(k_B T)]^{-1}$ はフェルミ分布関数、 Ω_{xy}^z はスピンベリー曲率である。 E, μ, k_B, T はそれぞれエネルギー、化学ポテンシャル、ボルツマン定数、温度である。スピンベリー曲率 Ω_{xy}^z は次のように定義される [44, 45]。

$$\Omega_{xy}^z \equiv \sum_{E_n > E_{m \neq n}} i \frac{\langle n | v_{s,x}^z | m \rangle \langle m | v_y | n \rangle - (x \leftrightarrow y)}{[E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k})]^2}. \quad (3.23)$$

$|n\rangle$ は E_n の固有状態、 $|m\rangle$ は E_m の固有状態である。以上よりスピンホールコンダクタンスはフェルミ分布関数とスピンベリ曲率の積を積分した形で式 (3.22) のように書けることが分かる。特に低温極限 $T \rightarrow 0$ でスピンホールコンダクタンスは

$$\sigma_{xy}^z \sim -e\hbar \sum_{\mathbf{k}} \Omega_{xy}^z, \quad (3.24)$$

のようにスピンベリ曲率の積分の形で表される。以降では低温極限を仮定し、式 (3.24) に基づいて計算を行う。

3.5 線形近似モデルで計算したスピンホールコンダクタンス

まず初めに本研究の計算方法で、先行研究でも用いられた線形近似をしたモデルに対しスピンホールコンダクタンスの計算を行い、先行研究の結果に一致することを確認する。TDSM 相が実現するパラメータ領域で、式 (3.3) の格子モデルのハミルトニアンをディラック点 $\mathbf{k}_{\pm} = (0, 0, k_0), (0, 0, -k_0)$ 周りで展開すると以下のハミルトニアン \check{H}_{\pm} を得る。

$$\check{H}_{\pm} = \hbar v(k_x s^z \sigma^x - k_y s^0 \sigma^y) \pm \hbar \tilde{v}(k_z \mp k_0) s^0 \sigma^z. \quad (3.25)$$

ただし、 $v = \eta a / \hbar$ 、 $\tilde{v} = t_z k_0 / \hbar$ 、 $k_0 = \arccos[(M - 2t_{xy})/t_z]$ である。ここで格子定数は 1 とした。

ここから系全体のスピンホールコンダクタンス σ_{xy}^z は以下のように表される。

$$\sigma_{xy}^z = \sigma_{xy,+}^z + \sigma_{xy,-}^z, \quad (3.26)$$

$\sigma_{xy,\pm}^z$ は H_{\pm} から求められるスピンホールコンダクタンスである。ここで \check{H}_{\pm} のバンド間には相互作用はないとし、 $\sigma_{xy,\pm}^z$ は独立して計算する。スピンホールコンダクタンス $\sigma_{xy,\pm}^z$ は先の式 (3.22)-(3.23) と同様に以下のように与えられる。

$$\sigma_{xy,\pm}^z = e\hbar \sum_{\mathbf{k}} [f(E_{\pm}) - f(-E_{\pm})] \Omega_{xy,\pm}^z, \quad (3.27)$$

ここで E_{\pm} はエネルギー固有値、 $\Omega_{xy,\pm}^z$ は H_{\pm} のスピンベリ曲率である。

$$E_{\pm} = \hbar \sqrt{v^2(k_x^2 + k_y^2) + \tilde{v}^2(k_z \mp k_0)^2}, \quad (3.28)$$

$$\Omega_{xy,\pm}^z = \pm \frac{\hbar v^2 \tilde{v}(k_z \mp k_0)}{2E_{\pm}^3}. \quad (3.29)$$

低温極限でのスピンホールコンダクタンスは上記の $\Omega_{xy,\pm}^z$ を波数 \mathbf{k} について積分することで得られる。

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^z &= -e\hbar \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left(\Omega_{xy,+}^z + \Omega_{xy,-}^z \right) \\ &= -\frac{e\hbar}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \int_0^{\infty} dk_{\parallel} k_{\parallel} \left(\Omega_{xy,+}^z + \Omega_{xy,-}^z \right) \\ &= -\frac{e}{8\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \left[\text{sgn}[\tilde{v}(k_z - k_0)] - \text{sgn}[\tilde{v}(k_z + k_0)] \right] \\ &= \text{sgn}(m_1) \left(\frac{\hbar}{e} \right) \frac{e^2 k_0}{h \pi} \end{aligned} \quad (3.30)$$

ただし、 $k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ である。式 (3.30) より本研究の計算方法でも、先行研究と同様に線形近似したモデルからスピンホールコンダクタンスがディラック点間の距離 $2k_0$ に比例する結果を得た [25]。

3.6 格子モデルで計算したスピンホールコンダクタンス

次に式 (3.22) の格子モデルからスピンホールコンダクタンスを計算する。スピンベリー曲率は以下のように与えられる。

$$\Omega_{xy}^z = \frac{\eta^2}{2\hbar E^3} \left[(M - t_z \cos k_z) \cos k_x \cos k_y - t_{xy} (\cos k_x + \cos k_y) \right], \quad (3.31)$$

このスピンベリー曲率からスピンホールコンダクタンスを数値的に計算した結果が図 3.4 である。先の相図に対応するようにスピンホールコンダクタンスの t_{xy}/t_z , M/t_z 依存性は相によって異なる。具体的には、絶縁体, DSM 相ではスピンホールコンダクタンスはほぼゼロである。一方、WTI/TCI, TDSM 相ではスピンホールコンダクタンスはノンゼロの値を持っており、 $M/t_z = 1$ を境にパラメータ依存性が大きく変化する。図 3.4(b) は TDSM 相内でいくつかの $(M + 2t_{xy})/t_z$ の場合について、スピンホールコンダクタンスを $\Gamma - Z$ 線上 $[(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上] のディラック点間の距離 $2k_0 [= \arccos [(M - 2t_{xy})/t_z]]$ に対してプロットしたものである。 k_0 の値は $M/t_z - 2t_{xy}/t_z - 1 = 0$ の直線上でゼロで $M/t_z - 2t_{xy}/t_z + 1 = 0$ の直線に近づくにつれて大きな値になる。この結果を見ると、すべての点が TDSM(II) 相 ($M/t_z > 1$) 内のみを通る $(M + 2t_{xy})/t_z = 3$ の場合は、スピンホールコンダクタンスが k_0 に比例していることが分かる。TDSM(I) 相と TDSM(II) 相を跨ぐ $(M + 2t_{xy})/t_z = 2$ の場合は $k_0 < 0.5\pi$ 即ち TDSM(II) 相ではスピンホールコンダクタンスが k_0 に比例しているが、TDSM(I) 相では k_0 に比例しなくなる。TDSM(I) 相 ($M/t_z > 1$) のみを通る $(M + 2t_{xy})/t_z = 1$ の場合はスピンホールコンダクタンスは全く k_0 に比例しない。また、図 3.4(c) ではパラメータ M/t_z について変化させてスピンホールコンダクタンスについてプロットしたものであるが、この結果からも $M/t_z = 1$ を境にスピンホールコンダクタンスのパラメータ依存性が大きく変化していることが分かる。

以上のように格子モデルでは相図に対応したスピンホールコンダクタンスの t_{xy}/t_z , M/t_z 依存性を得た。特に $M/t_z > 1$ のトポロジカルディラック半金属相では先の 2 つのモデルの場合と同様にスピンホールコンダクタンスは $\Gamma - Z$ 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上] のディラック点間の距離 $2k_0$ に比例した。その一方、 $M/t_z < 1$ ではスピンホールコンダクタンスは $2k_0$ に比例しない。これは先の線形近似したモデルから計算した結果とは異なる。

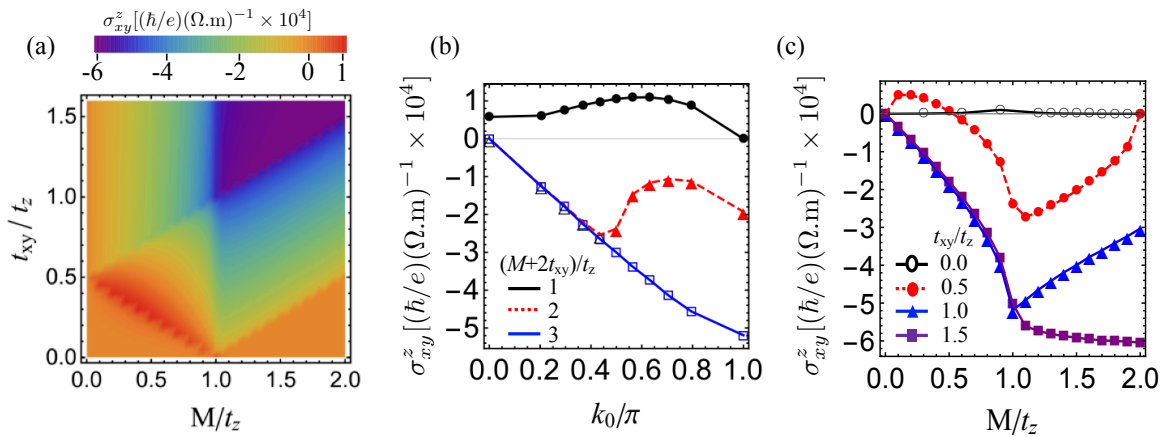


図 3.4 (a) 格子モデルから計算したスピンホールコンダクタンスの t_{xy}/t_z と M/t_z に対する依存性。(b) いくつかの $(M + 2t_{xy})/t_z$ の場合に対するスピンホールコンダクタンスの k_0 依存性。 $k_0 [= \arccos (M - 2t_{xy})]$ の値は $M/t_z - 2t_{xy}/t_z - 1 = 0$ の直線上でゼロで $M/t_z - 2t_{xy}/t_z + 1 = 0$ の直線に近づくにつれて大きな値になる。点が色塗りになっているものは TDSM(I) 相 ($M/t_z < 1$)、白抜きの点は TDSM(II) 相 ($M/t_z > 1$) のデータである。(c) $t_{xy}/t_z = 0.0, 0.5, 1.0, 1.5$ の場合でもスピンホールコンダクタンスの M/t_z 依存性。今各パラメータは $\eta = 0.89$ eV, $t_z/\eta = -3.4$, $\beta/t_z = 2\gamma/t_z = 0.67$, $\mu = T = 0$ である。自身の論文 [3] より転載。

3.7 考察: $M/t_z = 1$ を境にスピンホールコンダクタンスのパラメータ依存性が変化する理由

$M/t_z = 1$ を境にトポロジカルディラック半金属相とトポロジカル絶縁体相でのスピンホールコンダクタンスのパラメータ依存性が変化する原因はスピンベリ-曲率並びに $\sum_{k_x, k_y} \Omega_{xy}^z(\mathbf{k})$ の結果から理解することができる。まず初めに、 $\beta = \gamma = 0$ すなわち $a_4 = a_5 = 0$ の場合を考える。スピンベリ-曲率 Ω_{xy}^z は E^{-3} (エネルギーギャップは $2E$) に比例するため、TDSM(II) 相 ($M/t_z > 1$ の TDSM 相) では $\Gamma - Z$ 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上] のディラック点 $\mathbf{k} = (0, 0, \pm k_0)$ で Ω_{xy}^z が発散し [図 3.5(a1)-(a3)]、 $\sum_{k_x, k_y} \Omega_{xy}^z(\mathbf{k})$ は図 3.5(e) の黒の破線のようにになる。一方、TDSM(I) 相 ($M/t_z < 1$ の TDSM 相) では $\beta = \gamma = 0$ のとき、 $\Gamma - Z$ 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上] だけでなく X 点近傍の $(k_x, k_y) = (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$ の線上にもディラック点が生じる。そのため Γ 点近傍のディラック点 $\mathbf{k} = (0, 0, \pm k_0)$ だけでなく X 点近傍のディラック点 $\mathbf{k} = (0, \pm\pi, \pm k_1), (\pm\pi, 0, \pm k_1)$ で Ω_{xy}^z は発散する [図 3.5(b1)-(b3)]。ただし、 $k_1 = \arccos M/t_z$ である。結果として $\sum_{k_x, k_y} \Omega_{xy}^z(\mathbf{k})$ は $\sum_{k_x, k_y} \Omega_{xy}^z(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} [\text{sgn}(d_1 - |k_z|) - 2\text{sgn}(d_2 - |k_z|)]$ のようになる [図 3.5(f) の黒の破線]。そのため $M/t_z < 1$ のトポロジカルディラック半金属相のスピンホールコンダクタンスは $\Gamma - Z$ 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上] のディラック点間の距離 d_1 と X 点近傍のディラック点間の距離 $d_2 = 2 \arccos M/t_z$ で特徴づけられる。WTI/CTI 相でも $\beta = \gamma = 0$ では $d_1 = 2\pi$ [図 3.5(d1)-(d3), (h) の黒の破線], $M/t_z > 1$ で $d_2 = 2\pi$ とすることで同様に理解することができる。

ここまでは $\beta = \gamma = 0$ の場合を考えた。次に先のスピンホールコンダクタンスの計算のときのように有限の小さな β, γ のある場合を考える。このとき X 点近傍のディラックコーンにギャップが生じることで、 $M/t_z < 1$ での X 点近傍のディラック点消失する。しかし、このノンゼロの β, γ によって開くギャップは微小である。スピンベリ-曲率 Ω_{xy}^z は E^{-3} (エネルギーギャップは $2E$) に比例するので消失したディラック点の近傍では依然として大きな値を持つ。このため有限の小さな β, γ がある場合、 $\sum_{k_x, k_y} \Omega_{xy}^z(\mathbf{k})$ は $\beta = \gamma = 0$ の場合 (黒色の破線) から大きく変更を受けない [図 3.5(e)-(h)]。なお、 β, γ の値が十分大きくなると $\sum_{k_x, k_y} \Omega_{xy}^z(\mathbf{k})$ は $\beta = \gamma = 0$ の場合から大きく変更を受けてしまうので、このようにディラック点間の距離で理解することはできない。ただし、 $k_z = 0$ での $\sum_{k_x, k_y} \Omega_{xy}^z(\mathbf{k})$ はミラーチャーン数に対応しているので、 β, γ の値が十分大きくなってもミラーチャーン数から決まる値をとる。また、 β, γ の値を変化させても消失したディラック点の位置で $\sum_{k_x, k_y} \Omega_{xy}^z(\mathbf{k}) = 0$ になることを数値的に確認した。ここで重要な点はギャップが開いていても X 点近傍のディラック点の寄与により、 $M/t_z < 1$ でのスピンホールコンダクタンスのパラメータ依存性が変化しているという点である。

以上のように $M/t_z < 1$ では X 点近傍にディラックコーンが現れることにより、スピンホールコンダクタンスのパラメータ依存性が変化することが明らかになった。このディラックコーンは元々 $M/t_z = 1$ でバンドが接触する際に生じたディラックコーンが分裂したものであった。また、このバンドの接触は $k_z = 0$ 面でのミラーチャーン数の変化に対応したものである。このことから、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は $k_z = 0$ 面でのミラーチャーン数の変化に対応したものであるということも出来る。

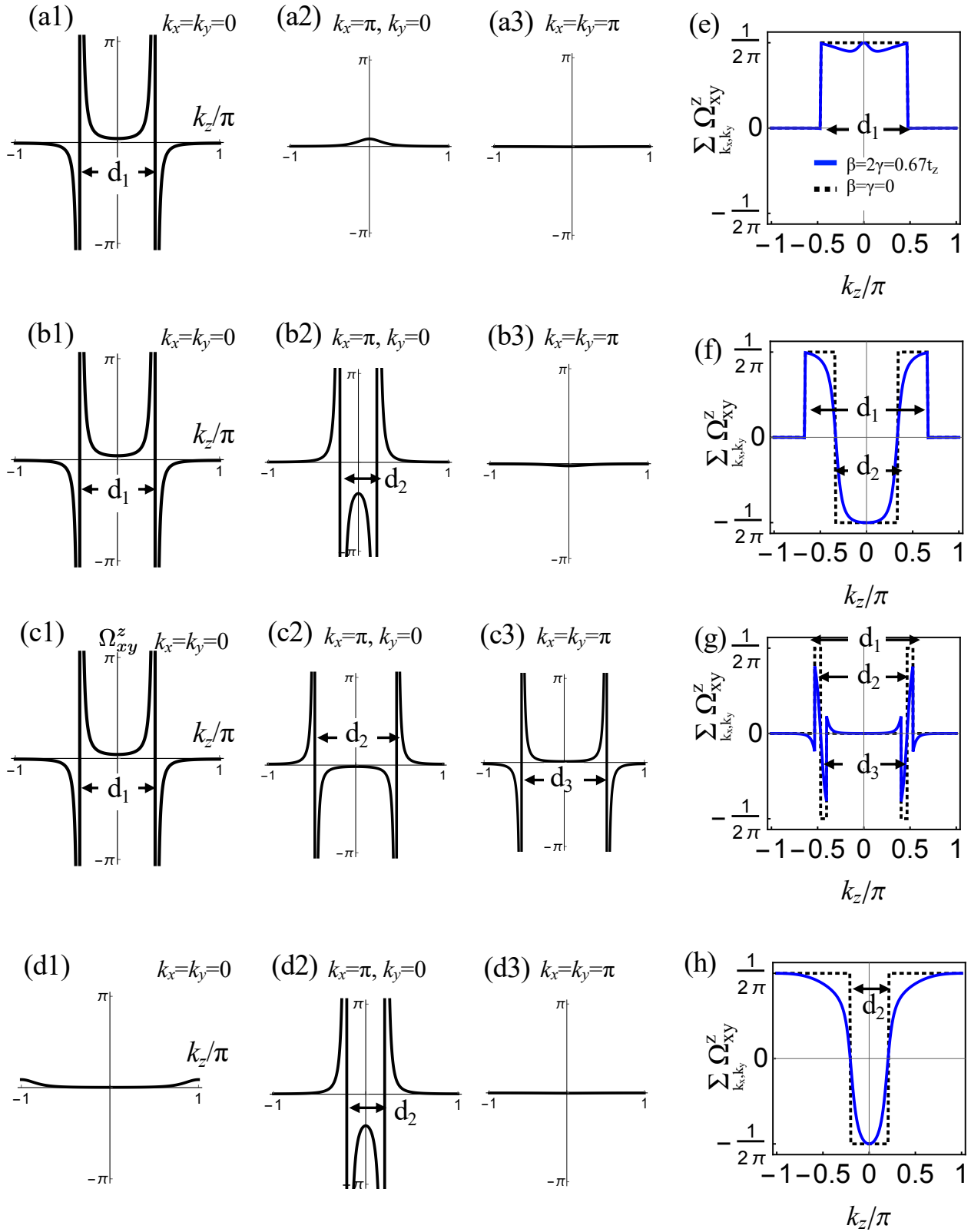


図 3.5 格子モデルから計算したスピンベリー曲率 $\Omega_{xy}^z(\mathbf{k})$ の $\beta = \gamma = 0$ の場合での k_z 依存性。(a1)-(a3) は TDSM(II) 相 ($M/t_z \geq 1$ の TDSM 相)、(b1)-(b3) は TDSM(I) 相 ($M/t_z \leq 1$ の TDSM 相)、(c1)-(c3) DSM 相、(d1)-(d3) 3DTCI ($M/t_z \leq 1$ の WTI 相) を表す。図中の d_1 , d_2 , d_3 はそれぞれ Γ -Z 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上]、 M -A 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (\pm\pi, \pm\pi)$ の線上]、 $(k_x, k_y) = (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$ 線上に現れるディラックコーンのディラック点間の距離に等しい。既に述べているが、 $\beta = \gamma = 0$ の場合は $M/t_z < 1$ の領域で $(k_x, k_y) = (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$ の線上にペアのディラックコーンとディラック点安定に存在する。(e)-(h) は $\sigma_{xy, 2D}^z(k_z)$ の k_z 依存性。黒の破線が $\beta = \gamma = 0$ の場合の結果、青の実線が $\beta = 2\gamma = 0.67t_z$ での計算結果である。自身の論文 [3] より転載。

3.8 第3章まとめ

本研究では、線形近似をしたモデルではトポロジカルディラック半金属におけるスピホール効果を正確に記述できていないのではないかという疑問から、線形近似に頼らず格子モデルから出発してグリーン関数を用いてスピホールコンダクタンスを計算した。その結果として $M/t_z > 1$ の領域では線形近似をしたモデルから計算した場合とよく一致しており、スピホールコンダクタンスは $\Gamma - Z$ 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上] に現れる対のディラックコーンのディラック点間の距離 $2k_0$ に比例するという結果を得た。一方、 $M/t_z < 1$ では線形近似をしたモデルは良い近似ではなくなり、スピホールコンダクタンスは $2k_0$ に比例しなくなった。

Burkov と Kim の先行研究では $\Gamma - Z$ 線上 [即ち $(k_x, k_y) = (0, 0)$ の線上] のディラック点のみに着目してスピホールコンダクタンスの計算を行っていた。しかし、実際には $M/t_z < 1$ では X 点近傍の $(k_x, k_y) = (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$ の線上にギャップの開いたディラックコーンがあり、このディラックコーンがスピホールコンダクタンスに寄与するため、 $M/t_z < 1$ では線形近似したモデルが良い近似とならないことが明らかになった。このギャップの開いたディラックコーンはトポロジカルディラック半金属の $M/t_z = 1$ 上におけるミラーチャーン数の変化に対応して現れるものであるため、ミラーチャーン数の変化を反映してスピホールコンダクタンスのパラメータ依存性が変化していると理解することもできる。また、ミラーチャーン数も一種のチャーン数であり、フェルミ準位近傍だけでなく系全体から決まる量である [124]。その変化を反映しているという点で、このような計算結果のズレは先行研究において系全体でなくフェルミ準位近傍のみに注目したことが原因であると言える。

第 4 章

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

4.1 本研究の背景

これまで物質科学においてトポロジーの考え方は絶縁体に対して利用されてきた。このトポロジーの考え方が同じくギャップを持つ超伝導体にも応用されるようになった。その結果として超伝導体においてもトポロジカルに非自明な絶縁体と同様にエッジ状態が現れることが明らかになった [120]。このエッジ状態は母体となるトポロジカル超伝導体の

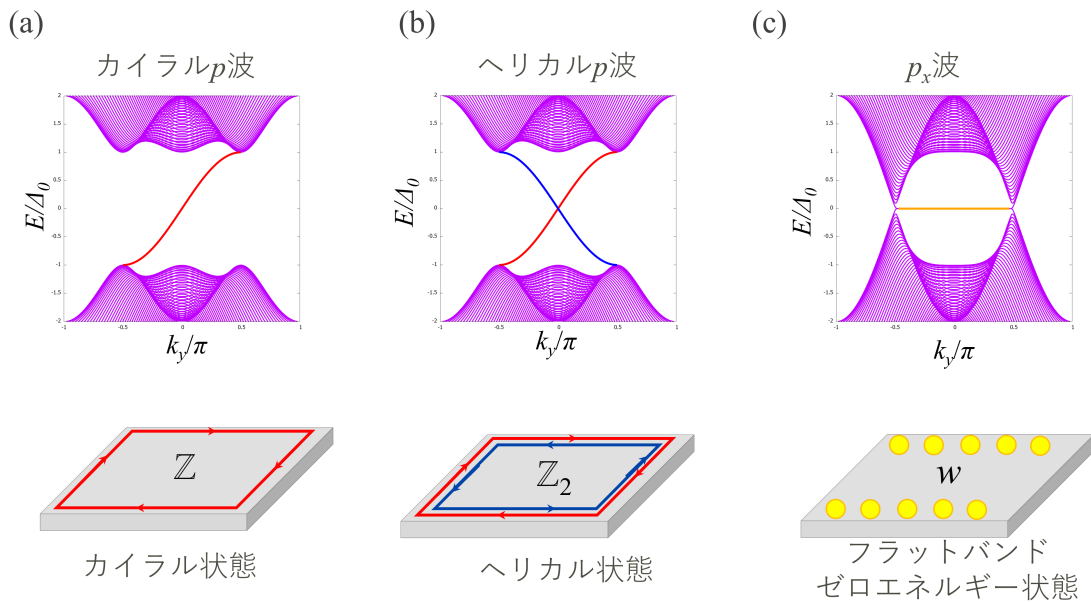


図 4.1 各超伝導体のエッジ状態。(a) カイラル p 波の場合。トポロジカル不変量として整数値 Z を持つ。エッジ状態として粒子が一方のみに運動するカイラルマヨラナエッジ状態を持つ。(b) ヘリカル p 波の場合。トポロジカル不変量として二整数値 Z_2 を持つ。エッジ状態として粒子が互いに逆方向に運動するヘリカルエッジ状態を持つ。(c) p_x 波の場合。トポロジカル不変量として巻き付き数 w を持つ。エッジ状態としてフラットバンドゼロエネルギー状態を持つ [120]。

ペアの対称性に依存している。例としては、時間反転対称性の破れたカイラル p 波超伝導体では粒子が一方のみに運動するカイラルエッジ状態を [40, 93, 128]、時間反転対称性を保ったヘリカル p 波超伝導体では粒子のペアがお互いに逆方向に運動するヘリカルエッジ状態を [91, 101, 103, 121]、ノードを有する p_x 波超伝導体や d_{xy} 波、 f 波超伝導体

ではフラットバンドゼロエネルギー状態 [24, 46, 62, 98, 102, 122] をエッジ状態として有する [図 4.1]。

この中でも特にフラットバンドゼロエネルギー状態はフェルミ準位に非常に高い縮退度を有するため、低エネルギーでの電磁気学的応答が劇的になると期待される。例を挙げると、常伝導体/超伝導体接合中のゼロバイアスコンダクタンスピーク [9, 10, 23, 54, 56, 59, 65, 116, 118, 119] が非常に強く現れることが期待される。また、フラットバンドゼロエネルギー状態により電磁気学的応答が異常になることも指摘されている。例えばジョセフソン接合においてジョセフソン電流と超伝導体間の位相差の関係が異常になる [11, 12, 16, 117]、また、通常は超伝導体はマイスナー効果により磁場を排斥するが、磁場を排斥しない常磁性マイスナー効果が起こるとされている [51, 113, 114]。このようなフラットバンドゼロエネルギー状態が現れる超伝導体としては p_x 波、 d_{xy} 波、 f 波超伝導体が挙げられるが、先行研究から p_x 波超伝導状態のフラットバンドゼロエネルギー状態は不純物に対して比較的頑強であると指摘されている [56]。このためフラットバンドゼロエネルギー状態の研究は p_x 波超伝導状態をプラットフォームとして進めることが有望である。しかし、現状では p_x 波超伝導状態を有する確たる候補物質は見つかっておらず、擬一次元系の有機超伝導体 [62, 102, 122] において p_x 波超伝導状態の可能性が議論されるに留まる。

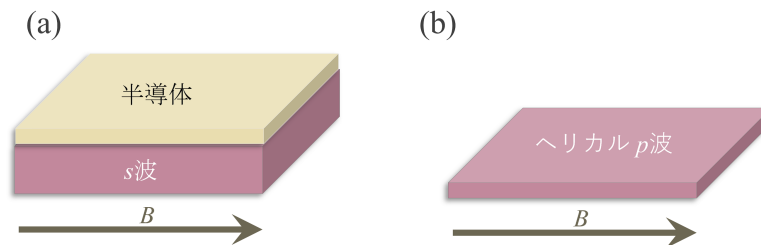


図 4.2 人工的な p_x 波超伝導体のセットアップ。(a) 半導体と s 波超伝導体のヘテロ接合にゼーマン磁場を印加した系 [5]。半導体には永久スピン旋回状態を実現するような一軸的なスピン軌道相互作用が働いている。(b) ヘリカル p 波超伝導体にゼーマン磁場を印加した系 [134]。

この p_x 波超伝導体の欠如という問題に対し、既存物質を組み合わせることで有効的な p_x 波超伝導状態を実現する理論提案が行われている。例としては半導体が永久スピン旋回状態を実現する一軸的なスピン軌道相互作用を持つ半導体と超伝導体とのヘテロ構造 [5, 57, 58, 139] やゼーマン磁場を印加したヘリカル p 超伝導状態 [55, 57, 134] が挙げられる [図 4.2]。しかし、これらの系は実験にあたり次の二つの問題点を抱えている。

- フラットバンドゼロエネルギー状態を実現するために超伝導ペアポテンシャルよりも強いゼーマン磁場が必要になり、超伝導状態が不安定になる。
- 面直方向に反転対称性が破れているためラシュバ型スピン軌道相互作用 (RSOC) が生じ、RSOC によってフラットバンドゼロエネルギー状態が壊される [56, 134]。

特にこのような超伝導ペアポテンシャルよりも強いゼーマン磁場が必要であるという点は、Oreg や Lutchyn らによって提案された s 波超伝導体の上に半導体ナノワイヤーを載せてゼーマン磁場をかけることで実現する人工的な p 波超伝導体 [80, 88] [図 1.7] をはじめ多くの人工的なトポロジカル超伝導体で見られる。

一般に強い磁場は超伝導状態を不安定にするにもかかわらずこのような提案が問題とされなかった背景には超伝導体と半導体の g 因子の違いがある。 g 因子は磁場によって生じるゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさの違いを表す量である。一般に半導体は超伝導体に比べ大きな g 因子を持っており、超伝導体に比べ小さな磁場で大きなポテンシャルを得ることが出来る。このため、人工的な超伝導体の系において超伝導体が不安定にならない程度の大きさの磁場で半導体中にはトポロジカル超伝導を実現するだけのポテンシャルが生じていると考えられていた。しかし、このような状況が実現しない可能性が理論的に指摘された。それによると超伝導体と半導体がよく接合されればされるほど、半導体は超伝導体の影響を受け、実効的な g 因子の値やスピン軌道相互作用の強さが低下するというのである [94]。

この超伝導ペアポテンシャルよりも強いゼーマン磁場が必要であるという問題を解消し得るのが近年理論的に提案されたトポロジカルジョセフソン接合である [50, 89] [図 4.3]。これは Oreg や Lutchyn らの提案した一次元の人工的なトポロジカル超伝導体を拡張したものともみることができる。この系の擬一次元的な接合界面でトポロジカル超伝導状態が実現する。従来の人工的なトポロジカル超伝導体の多くはバルクに注目していたのに対し、トポロジカルジョセフソン接合では接合界面の擬一次元的な領域に形成されるアンドレーエフ束縛状態に注目した。アンドレーエフ束縛状態のバンド分散は波数だけでなく位相差 φ にも依存しており、位相差 φ を変化させることでバンドギャップをゼロにすることも可能である。そのような状態では理論的には限りなく小さいゼーマン磁場でトポロジカル超伝導状態を実現させることができる。このようにトポロジカルジョセフソン接合では従来の波数空間中でのバンドのトポロジーから、波数 + 位相差の空間中でのバンドのトポロジーに注目することで、小さなゼーマン磁場でもトポロジカル超伝導体の実現を可能にする。

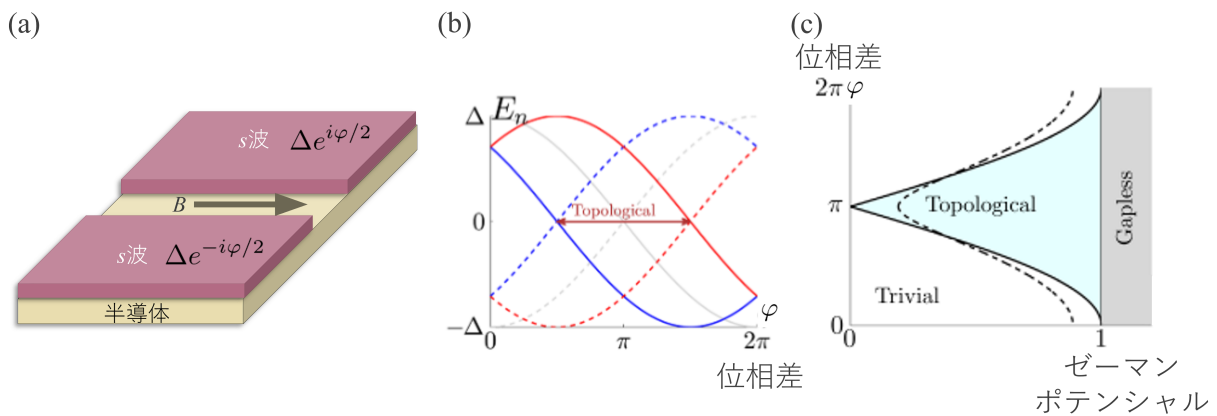


図 4.3 (a) 二次元トポロジカルジョセフソン接合の図。接合界面の擬一次元的な領域がトポロジカル超伝導体になっている。ここで半導体にはラシュバ型スピン軌道相互作用が働いている。また、超伝導体から近接効果によって超伝導ペアポテンシャルが誘起されており、二つの半導体の位相差は φ である。ゼーマン磁場は接合界面の擬一次元的な領域にかけられている。(b) 接合界面のアンドレーエフ束縛状態のエネルギーと位相差 φ の分散関係。ゼーマン磁場のない場合 (灰線) からゼーマン磁場のある場合 (赤線, 青線) になるとある φ の領域でトポロジカルに非自明な超伝導体を実現する。(c) トポロジカルに非自明な超伝導状態が実現しているパラメータ領域の図。破線は接合系の透過率が低下した場合 [89]。図 (b),(c) は参考文献 [89] からの転載。

4.2 本研究の目的

本研究では、人工的な p_x 波超伝導体である図 4.2(a) の系を三次元のトポロジカルジョセフソン接合 [図 4.4] に拡張することで、フラットバンドゼロエネルギー状態を実現する際に問題となる (I) ペアポテンシャルよりも強いゼーマン磁場が必要、(II) 系の反転対称性の破れに起因して RSOC が生じる、という二つの問題を解消を図る。この系は半導体薄膜を s 波超伝導体で挟んだ接合系になっており、半導体薄膜は永久スピン旋回状態が実現する一軸的なスピン軌道相互作用 $\tilde{H}_l \propto k_x$ を有している (このようなスピン軌道相互作用によって p_x 波的な有効的なペアポテンシャルが実現することを期待している)。この半導体薄膜近傍とその端でトポロジカル超伝導状態とフラットバンドゼロエネルギー状態が実現すると期待される。

この系ではトポロジカルジョセフソン接合の特徴から超伝導ペアポテンシャルに比べ十分小さなゼーマン磁場でトポロジカル超伝導状態が現れるだけでなく、半導体薄膜近傍では面直方向の反転対称性が保たれているため、薄膜近傍での RSOC は無視できるほど小さくなると期待される。そのため本研究ではこの系の薄膜近傍とその端で p_x 波超伝導状態並びにフラットバンドゼロエネルギー状態が実現しているかを解析的・数的に確認する。

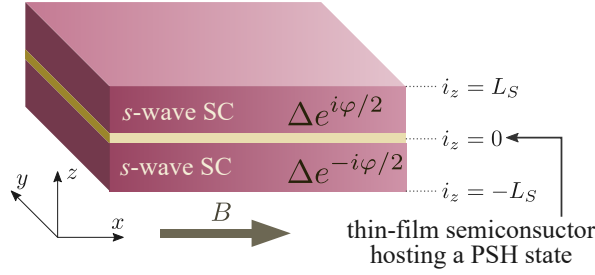


図 4.4 三次元トポジカルジョセフソン接合の図。二つの s 波超伝導体で半導体薄膜を挟んだ構造をしている。この半導体薄膜は永久スピン旋回状態を実現する一軸的なスピン軌道相互作用 $\check{H}_\lambda \propto k_x$ を有している。二つの超伝導体の位相差は φ である。また、系全体に x 軸方向に向けたゼーマン磁場 \mathbf{B} が印加されている。自身の論文 [4] からの転載。

4.3 半導体薄膜近傍を記述する有効ハミルトニアン の 導出

まず、初めに半導体薄膜近傍が実効的に p_x 波超伝導体と見なせることを解析的に示す。ここでは摂動論を利用して、半導体薄膜近傍を記述する有効ハミルトニアン の 導出を行う。以下では簡単のために式 (4.1) の連続体モデルに基づいて計算を行う。

$$\begin{aligned}
 \check{H}(\mathbf{r}) &= \check{H}_0(\mathbf{r}) + \check{H}_\lambda(\mathbf{r}), \\
 \check{H}_0(\mathbf{r}) &= \begin{bmatrix} \xi(\mathbf{r}) + V\hat{\sigma}_x & \Delta(z)(i\hat{\sigma}_y) \\ -\Delta^*(z)(i\hat{\sigma}_y) & -\xi(\mathbf{r})\hat{\sigma}_0 - V\hat{\sigma}_x \end{bmatrix}, \\
 \check{H}_\lambda(\mathbf{r}) &= \begin{bmatrix} -i\lambda\delta(z)\partial_x\hat{\sigma}_z & 0 \\ 0 & -i\lambda\delta(z)\partial_x\hat{\sigma}_z \end{bmatrix}, \\
 \xi(\mathbf{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) - \mu, \\
 \Delta(z) &= \begin{cases} \Delta e^{i\varphi/2} & \text{for } z \leq 0 \\ \Delta e^{-i\varphi/2} & \text{for } z > 0 \end{cases},
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

ここで \check{H}_0 は二つの s 波超伝導体を表しており、 m は電子の有効質量、 μ は化学ポテンシャル、 V は x 方向への印加したゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさの大きさ、 Δ は超伝導ペアポテンシャルの大きさ、 φ は s 波超伝導体間の位相差を表す。 $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ はスピン空間中でのパウリ行列である。また、 $x(y)$ 軸方向には周期境界条件を適用する。 \check{H}_λ は半導体薄膜の有する一軸的なスピン軌道相互作用を表しており、 λ はその強さを表す。この計算では半導体薄膜をあらわには記述しておらず、スピン軌道相互作用が $z = 0$ 面内のみに働いていると仮定する。また、 \check{H}_λ を摂動項と見なし、接合界面 $z = 0$ での有効ハミルトニアンを求める。0 次の摂動の範囲では

$$\begin{aligned}
 \int d\mathbf{r} \check{U}_{\text{SG}}^\dagger(\mathbf{r}) \check{H}_0(\mathbf{r}) \check{U}_{\text{SG}}(\mathbf{r}) &= \check{E}_0, \\
 \check{E}_0 &= \text{diag}[\varepsilon - V, \varepsilon + V, -\varepsilon + V, -\varepsilon - V], \\
 \varepsilon &= \Delta \sqrt{1 - D \sin^2(\varphi/2)}, \\
 D &= \frac{\Delta^2 \sin^2(\varphi/2) - \mu_z^2 + \mu_z \sqrt{2\Delta^2 \sin^2(\varphi/2) + \mu_z^2}}{2\Delta^2 \sin^2(\varphi/2)}, \\
 \check{U}_{\text{SG}}(\mathbf{r}) &= \check{U}_{\text{SG}}(z) \frac{e^{ik_x x} e^{ik_y y}}{\sqrt{L_x L_y}},
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

$$0 \leq \varepsilon < \Delta, \quad \check{U}_{\text{SG}}(z = \pm\infty) = 0, \quad (4.3)$$

が成立する。 ε は二次元接合界面に形成されるアンドレーエフ束縛状態における準粒子の運動エネルギーと見なすことが出来る。 $L_{x(y)}$ は $x(y)$ 軸方向の長さである。ここで $\check{U}_{\text{SG}}(\mathbf{r})$ は無摂動状態での固有状態から生成される行列である。

$$\check{U}_{\text{SG}}(\mathbf{r}) = \check{Q} \check{U}'_{\text{SG}}(\mathbf{r}) \check{W}, \quad (4.4)$$

$$\check{U}'_{\text{SG}}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} u_+(\mathbf{r}) & 0 & 0 & -v_+^*(\mathbf{r}) \\ 0 & u_-(\mathbf{r}) & -v_-^*(\mathbf{r}) & 0 \\ 0 & v_-(\mathbf{r}) & u_-^*(\mathbf{r}) & 0 \\ v_+(\mathbf{r}) & 0 & 0 & u_+^*(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (4.5)$$

$$\check{Q} = \begin{bmatrix} \hat{Q} & 0 \\ 0 & \hat{Q} \end{bmatrix}, \quad \hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \check{W} = \begin{bmatrix} \hat{w} & 0 \\ 0 & \hat{w}^* \end{bmatrix}, \quad \hat{w} = \begin{bmatrix} ie^{-i\eta/2} e^{i\varphi/4} & 0 \\ 0 & -ie^{-i\eta/2} e^{i\varphi/4} \end{bmatrix}, \quad (4.6)$$

$\check{U}'_{\text{SG}}(\mathbf{r})$ の成分 $u_{\pm}(\mathbf{r})$, $v_{\pm}(\mathbf{r})$ は以下の Bogoliubov-de Gennes (BdG) 方程式を満たす (詳細な関数形は付録を参照)。

$$\begin{bmatrix} \xi(\mathbf{r}) & s\Delta(z) \\ s\Delta^*(z) & -\xi(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_s(\mathbf{r}) \\ v_s(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} u_s(\mathbf{r}) \\ v_s(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (4.7)$$

1 次の摂動まで考慮すると半導体薄膜近傍を記述する有効ハミルトニアンとして以下の式 (4.8) を得る。

$$\begin{aligned} \check{H}_{\text{eff}} &= \int d\mathbf{r} \check{U}'_{\text{SG}}(\mathbf{r}) \check{H}(\mathbf{r}) \check{U}_{\text{SG}}(\mathbf{r}) \\ &= \begin{bmatrix} \varepsilon - V & \tilde{\lambda}k_x & \tilde{\Delta}k_x & 0 \\ \tilde{\lambda}k_x & \varepsilon + V & 0 & -\tilde{\Delta}k_x \\ \tilde{\Delta}k_x & 0 & -\varepsilon + V & \tilde{\lambda}k_x \\ 0 & -\tilde{\Delta}k_x & \tilde{\lambda}k_x & -\varepsilon - V \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\tilde{\lambda} = \lambda \sqrt{D(1-D)}F, \quad (4.9)$$

$$\tilde{\Delta} = \lambda \cot(\varphi/2)F, \quad (4.10)$$

$$F = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{\mu_z^2 + \Omega^2}} \frac{\sqrt{1-D}}{D(3-2D)} \frac{\sqrt{D \sin^2(\varphi/2)}}{\sqrt{1-D \sin^2(\varphi/2)}}, \quad (4.11)$$

$$\mu_z = \mu - \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2). \quad (4.12)$$

ここで $\tilde{\lambda}$ は界面における有効的なスピン軌道相互作用の強さ、 $\tilde{\Delta}$ は界面における有効的なギャップの大きさを表している。また、関数 $D = D(k_x, k_y, \varphi)$, $F = F(k_x, k_y, \varphi)$ は波数 k_x, k_y に対して偶関数である。ここで式 (4.8) のハミルトニアンの基底は元のハミルトニアン式 (4.1) の基底と異なることに注意したい。式 (4.12) の対角のブロック即ち電子とホールに対応するセクターについて見てみると、一軸的なスピン軌道相互作用とゼーマン磁場が存在しているように見える。また、超伝導ペアポテンシャルに対応する非対角のブロックに注目すると k_x に比例した成分のみを持っている。これは p_x 波超伝導体のペアポテンシャルと等価である。この p_x 波超伝導体のペアポテンシャルと等価な項によってバンドにギャップが開き、そこにフラットバンドゼロエネルギー状態が生じると期待される。

4.4 対称性とトポロジカル不変量

ここまでの結果より半導体薄膜近傍を記述する有効ハミルトニアンはスピン軌道相互作用とゼーマン磁場を有する二次元の p_x 波超伝導体と等価であることが分かった。ここでこの系の持つトポロジカル不変量について確認する。式 (4.1) の系全体のハミルトニアンは以下のように時間反転対称性、電子正孔対称性を持つ [149]。

$$\check{T}\check{H}(\mathbf{r})\check{T}^{-1} = \check{H}(\mathbf{r}), \quad (4.13)$$

$$\check{C}\check{H}(\mathbf{r})\check{C}^{-1} = -\check{H}(\mathbf{r}). \quad (4.14)$$

ここで $\check{T} = \check{M}_{xy}\check{T}_-$ 、 $\check{C} = \check{\tau}_x\mathcal{K}$ 、 $\check{M}_{xy} = -i\hat{\sigma}_z\check{\tau}_z\mathcal{R}_z$ は $x-y$ 面に対するミラー演算子、 $\check{T}_- = i\hat{\sigma}_y\mathcal{K}$ は $\check{T}_-^2 = -1$ を満たす一般的な時間反転演算子、 \mathcal{R}_z は z 軸についての反転演算子である (即ち $z \rightarrow -z$)。また、時間反転対称性と電子正孔対称性を持つのでこの系は式 (4.15) のようにカイラル対称性を持つ。

$$\check{S}\check{H}(\mathbf{r})\check{S}^{-1} = -\check{H}(\mathbf{r}). \quad (4.15)$$

ただし、 $\check{S} = \check{T}\check{C}$ である。また、これらの対称性から式 (4.12) のハミルトニアン \check{H}_{eff} も以下のように時間反転対称性、電子正孔対称性、カイラル対称性を持つ。

$$\check{T}_{\text{eff}}\check{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k})\check{T}_{\text{eff}}^{-1} = \check{H}_{\text{eff}}(-\mathbf{k}) \quad (4.16)$$

$$\check{T}_{\text{eff}} = -i\hat{\sigma}_z\check{\tau}_z\mathcal{K},$$

$$\check{C}_{\text{eff}}\check{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k})\check{C}_{\text{eff}}^{-1} = -\check{H}_{\text{eff}}(-\mathbf{k}) \quad (4.17)$$

$$\check{C}_{\text{eff}} = \check{\tau}_x\mathcal{K},$$

$$\check{S}_{\text{eff}}\check{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k})\check{S}_{\text{eff}}^{-1} = -\check{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}) \quad (4.18)$$

$$\check{S}_{\text{eff}} = \check{T}_{\text{eff}}\check{C}_{\text{eff}}.$$

ここで $\check{\tau} = (\check{\tau}_x, \check{\tau}_y, \check{\tau}_z)$ は南部空間でのパウリ行列、 \mathcal{K} は複素共役演算子である。ここで $\check{T}_-^2 = +1$ 、 $\check{C}^2 = +1$ であるのでこの接合系はトポロジカルな分類上 BDI クラスに属する [101]。そのため、一次元巻き付き数 $w(k_y)$ がトポロジカル不変量となる。

一次元巻き付き数 $w(k_y)$ を \check{H}_{eff} から計算することになると、巻き付き数 $w(k_y)$ は以下の通り定義される [98]。

$$w(k_y) = \frac{i}{4\pi} \int dk_x \text{Tr}[\check{S}_{\text{eff}} \{ \check{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}_{\parallel}) \}^{-1} \partial_{k_x} \check{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}_{\parallel})],$$

$$\check{S}_{\text{eff}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.19)$$

実際に巻き付き数を計算すると (計算方法は付録を参照)、ノードの現れる領域において巻き付き数は

$$w(k_y) = \begin{cases} +(-)1 & \text{for } |k_y| < k_F \sqrt{1 + \zeta} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (4.20)$$

となる。ここで

$$\zeta = \frac{1}{\mu} \left[V^2 - \frac{\Delta^2}{2} \{1 + \cos^2(\varphi/2)\} \right] \sqrt{\frac{1}{V^2 - \Delta^2 \cos^2(\varphi/2)}}, \quad (4.21)$$

である。 k_y に依らず $w(k_y) = 0$ の場合はフルギャップの自明な超伝導状態である。 $w(k_y) \neq 0$ の場合はトポロジカルに非自明な超伝導状態で、バルクエッジ対応より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得られる。この

フラットバンドゼロエネルギー状態はギャップ $\tilde{\Delta}$ が閉じるか、対称性が破られない限りトポロジカルに保護される。系全体の元のハミルトニアン $\check{H}(\mathbf{r})$ も上述の通りカイラル対称性を満たすため、 λ について2次以上の摂動の効果も考慮してもフラットバンドゼロエネルギー状態はトポロジカルに保護されると期待される。

ノンゼロの巻き付き数が現れる領域即ちノードの現れる領域はエネルギー固有値から与えられる。 \check{H}_{eff} を対角化することでエネルギー固有値として

$$E_{s(=\pm)} = \pm \sqrt{\left(\varepsilon + s\sqrt{V^2 + \tilde{\lambda}^2 k_x^2}\right)^2 + \tilde{\Delta}^2 k_x^2}, \quad (4.22)$$

を得る。ここから

$$\begin{cases} \varepsilon^2 = V^2 + \tilde{\lambda}^2 k_x^2, \\ \tilde{\Delta} k_x = 0, \end{cases} \quad (4.23)$$

すなわち

$$X < V^2 < \Delta^2, \quad (4.24)$$

$$X = \frac{\mu^2 + \Delta^2 \{1 + \cos^2(\varphi/2)\} - \mu\sqrt{\mu^2 + 2\Delta^2 \sin^2(\varphi/2)}}{2}, \quad (4.25)$$

の条件下で $\mathbf{k}_{\parallel} = (0, \pm \tilde{k}_F)$ にノードが現れる。ここで

$$\tilde{k}_F = k_F \sqrt{1 + \zeta}, \quad (4.26)$$

である。また、関数 X は $\Delta/\mu \rightarrow 0$ の極限において

$$\lim_{\Delta/\mu \rightarrow 0} X = \Delta^2 \cos^2(\varphi/2) \quad (4.27)$$

となる。以上の結果より、図4.5の相図を得る。ここで $\tilde{\Delta} \propto \cot(\varphi/2)$ なので $\varphi = \pi$ 上でギャップが閉じる。このため $\varphi = \pi$ を境に巻き付き数が変化する。

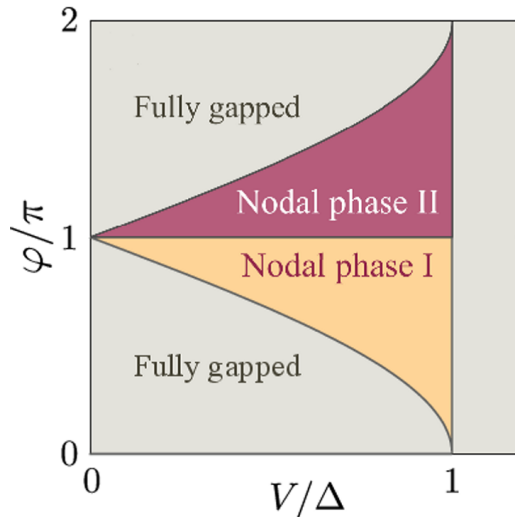


図4.5 半導体薄膜近傍における状態の相図。I相とII相は $\varphi = \pi$ を境に巻き付き数 $+1, -1$ で区別される領域である。I相とII相においてトポロジカルに非自明なエッジ状態としてフラットバンドが表れると期待される。自身の論文 [4] からの転載。

4.5 局所状態密度の数値計算方法

ここまでの結果から解析的に半導体薄膜近傍では有効的に p_x 波超伝導体と等価であり、トポロジカルに非自明な超伝導状態も期待されることが明らかになった。次に、タイトバインディング模型から半導体薄膜の端の局所状態密度 (LDOS) を計算することで、フラットバンドゼロエネルギー状態が現れることを数値的にも確認する。以後の計算では格子定数 a_0 の立方格子を考え、格子点を $\mathbf{r} = i_x \mathbf{x} + i_y \mathbf{y} + i_z \mathbf{z}$ のように書くこととする ($|\mathbf{x}| = |\mathbf{y}| = |\mathbf{z}| = a_0$)。また、接合上部の s 波超伝導体は $1 \leq i_z \leq L_S$ 、下部の超伝導体は $-L_S \leq i_z \leq L_S$ 、半導体薄膜は $i_z = 0$ の範囲に存在するとする。また、以降の数値計算では x 軸方向は半無限系 $0 \leq i_x \leq \infty$ 、 z 軸方向は有限系 $-L_S \leq i_z \leq -1$ を考え、 y 軸方向には周期境界条件を適用する。ここで y 軸方向には周期境界条件を適用するのは計算コストを削減するためである。加えて、位置 \mathbf{r} 、スピン σ の消滅演算子 $c_{\mathbf{r},\sigma}$ を $c_{\tilde{\mathbf{r}},k_y,\sigma}$ に置き換える。ここで $c_{\mathbf{r},\sigma} = \sum_{k_y} e^{ik_y a_0 i_y} c_{\tilde{\mathbf{r}},k_y,\sigma} / \sqrt{L_y}$ の関係が成り立つ。ここで $\tilde{\mathbf{r}} = i_x \mathbf{x} + i_z \mathbf{z}$ である。タイトバインディング模型での本系の BdG ハミルトニアン $\check{H} = \sum_{k_y} \check{H}(k_y)$ は

$$\begin{aligned} \check{H}(k_y) = & -t \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{x},\sigma}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma} + c_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{x},\sigma} \right) - t \sum_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma} \left(c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{z},\sigma}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma} + c_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{z},\sigma} \right) \\ & + \sum_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma} \xi_{i_z} c_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma} + \sum_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma,\sigma'} V(\hat{\sigma}_y)_{\sigma,\sigma'} c_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma'} \\ & + \sum_{i_x} \sum_{i_z=1}^{L_S} \Delta e^{i\varphi/2} (c_{\tilde{\mathbf{r}},k_y,\uparrow}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}},-k_y,\uparrow}^\dagger + \text{H.c.}) + \sum_{i_x} \sum_{i_z=-L_S}^{-1} \Delta e^{-i\varphi/2} (c_{\tilde{\mathbf{r}},k_y,\uparrow}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}},-k_y,\uparrow}^\dagger + \text{H.c.}) \\ & + \sum_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma,\sigma'} \frac{i\lambda}{2} \delta_{i_z,0} (\hat{\sigma}_z)_{\sigma,\sigma'} \left(c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{x},\sigma}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma'} - c_{\tilde{\mathbf{r}},\sigma}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{x},\sigma'} \right), \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\xi_{i_z} = \begin{cases} 4t - \mu_N - 2t \cos(k_y a_0) & \text{for } i_z = 0 \\ 6t - \mu_S - 2t \cos(k_y a_0) & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (4.29)$$

と書ける。 t は最近接のホッピング、 $\mu_{S(N)}$ は超伝導体 (半導体薄膜) の化学ポテンシャルである。最初は解析計算の場合と同様に単純化した状況を考え、すべての層におけるホッピングを t としている。この BdG ハミルトニアンから再帰グリーン関数法を用いて各 k_y についてのグリーン関数 $G_{k_y}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}'; E)$ を導出する [6, 75]。また、ここから $\tilde{\mathbf{r}}$ における k_y 毎の LDOS は

$$\rho_{k_y}(\tilde{\mathbf{r}}; E) = -\frac{1}{\pi} \left\{ \text{Tr} [G_{k_y}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}; E + i\delta)] \right\}, \quad (4.30)$$

と与えられる。 δ は正の微小量である。半導体薄膜の端 (すなわち $i_x = i_z = 0$) にフラットバンドゼロエネルギー状態が現れると期待するので

$$\rho_{\text{edge}}(k_y; E) = \rho_{k_y}(i_x = 0, i_z = 0; E), \quad (4.31)$$

$$\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0) = \sum_{k_y} \rho_{\text{edge}}(k_y; E = 0). \quad (4.32)$$

に注目する。フラットバンドゼロエネルギー状態では $E = 0$ で高い縮退度を持つため、フラットバンドゼロエネルギー状態が存在する場合は $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ の値も大きくなると期待される。以後の数値計算ではパラメータの値として $t = 10\Delta$, $\mu_S = 30\Delta$, $\mu_N = 10\Delta$, $\lambda = 10\Delta$, $\delta = 10^{-4}\Delta$, $L_S = 30$ を選ぶ。

4.6 局所状態密度の数値計算結果

図 4.6(a) は $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E=0)$ のゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ V と位相差 φ に対する依存性を表している。 $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E=0)$ は先の図 4.5 の相図の I, II 相に対応する領域で非常に大きな値を持っている。これはフラットバンドゼロエネルギー状態の存在を示している。図 4.6(b) において $E=0$ で有限の幅の k_y に対し $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ が大きな値を持つことから、これらの領域でフラットバンドが生じていることが分かる。一方、 $\varphi = \pi$ 上などその他の領域では $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E=0)$ はほぼゼロである。この領域内で $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ を見てみるとフルギャップ構造になっておりフラットバンドゼロエネルギー状態が現れないことが分かる [図 4.6(c)]。これらの結果は有効ハミルトニアンから得た図 4.5 の相図とよく対応している。以上のように、系全体で一様なホッピング t を持つ場合、界面における有効ハミルトニアン \check{H}_{eff} とその解析結果から予想された通り、I 相, II 相でフラットバンドゼロエネルギー状態が表れることが数値的に示された。

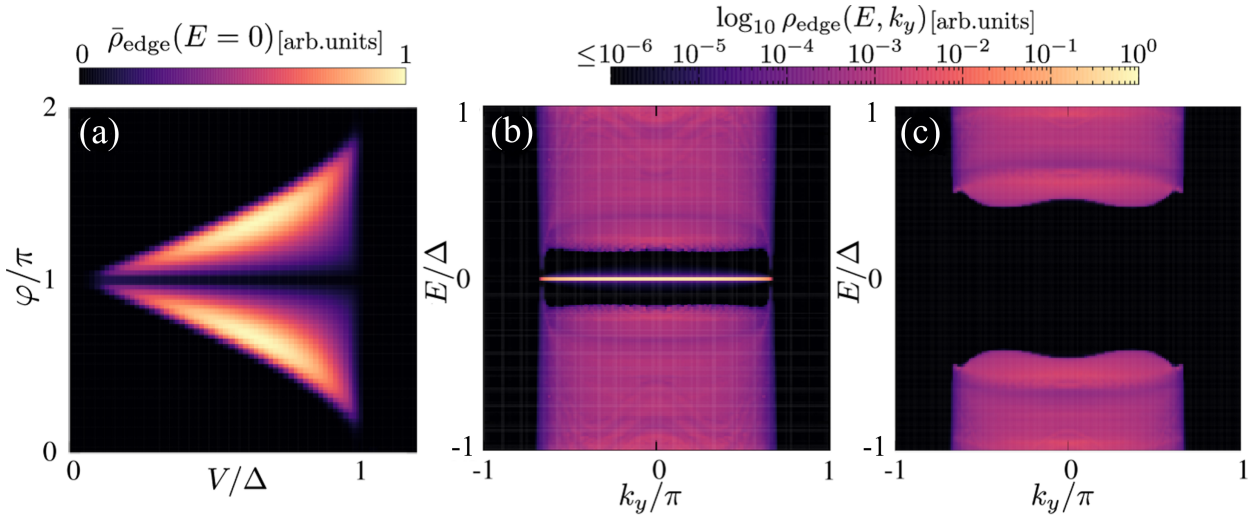


図 4.6 (a) ゼロエネルギー局所状態密度 $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E=0)$ の印加磁場によるゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ V と超伝導体の位相差 φ に対する依存性。(b) トポロジカルに非自明な状態、(c) トポロジカルに自明な状態における k_y 毎のゼロエネルギー局所状態密度 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ 。(b) は $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 0.65\pi)$ 、(c) は $(V, \varphi) = (0.25\Delta, 0.25\pi)$ である。 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ は $\log_{10} \rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ のように log スケールでプロットした。自身の論文 [4] からの転載。

次に式 (4.28) のハミルトニアンに次の二つの摂動 $H_{\delta t}$ と H_R を加えた場合にフラットバンドゼロエネルギー状態が現れるかを考える。一つ目は超伝導体層と半導体層間のホッピングを変化させる摂動 $H_{\delta t}$ である。これは物理的には超伝導体層と半導体薄膜間のバリアを考慮すること、それによって透過率を低下させることに相当する。

$$H_{\delta t} = - \sum_{\vec{r}, \sigma} (t_1 \delta_{i_z, 1} + t_2 \delta_{i_z, -1}) \left(c_{\vec{r}+\vec{z}, \sigma}^\dagger c_{\vec{r}, \sigma} + c_{\vec{r}, \sigma}^\dagger c_{\vec{r}+\vec{z}, \sigma} \right), \quad (4.33)$$

$t_1 = t_2$ の場合はカイラル対称性を保つが、 $t_1 \neq t_2$ の場合はカイラル対称性を破る。二つ目は半導体薄膜直近の超伝導体層 (すなわち $i_z = L_S - 1, L_S + 1$) に RSOC を付け加える摂動 H_R である。これは系の構造から無視していた半導体層薄膜近傍の RSOC を考慮するものである。

$$H_R = \sum_{\vec{r}, \sigma, \sigma'} \left\{ \lambda'_1 \sin(k_y a_0) \delta_{i_z, 1} + \lambda'_2 \sin(k_y a_0) \delta_{i_z, -1} \right\} (\hat{\sigma}_x)_{\sigma, \sigma'} c_{\vec{r}, \sigma}^\dagger c_{\vec{r}, \sigma'} \\ - \sum_{\vec{r}, \sigma, \sigma'} \left\{ \frac{i\lambda'_1}{2} \delta_{i_z, 1} + \frac{i\lambda'_2}{2} \delta_{i_z, -1} \right\} (\hat{\sigma}_y)_{\sigma, \sigma'} \left(c_{\vec{r}+\vec{x}, \sigma}^\dagger c_{\vec{r}, \sigma'} - c_{\vec{r}, \sigma}^\dagger c_{\vec{r}+\vec{x}, \sigma'} \right), \quad (4.34)$$

ここで RSOC はポテンシャルの勾配に比例するため、界面近傍での RSOC の強さ λ'_1, λ'_2 は逆符号であると仮定する。 $\lambda'_1 = -\lambda'_2$ の場合はカイラル対称性を保つが、 $\lambda'_1 \neq -\lambda'_2$ の場合はカイラル対称性を破る。以上の摂動を加えた際にフラットバンドゼロエネルギー状態が残るかを数値的に確認する。

まず初めに $t_1 = t_2$ の $H_{\delta t}$ を加えた場合を考える。このときカイラル対称性は保たれている。図 4.7(a) は $t_1 = t_2 = -2\Delta$ における $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ の V, φ 依存性を示している。カイラル対称性が保たれており巻き付き数が定義できるので、フラットバンドゼロエネルギー状態が現れる。そのため、図 4.6(a) と同様に $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ が大きな値を持っている。実際に $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ を確認すると図 4.6(b) とは異なり、複数分割されたフラットバンドを確認することができる。また、図 4.6(a) と比べ図 4.7(a) では $(V, \varphi) = (0, \pi)$ 近傍で $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ が大きな値を持つ領域が縮小していること、図 4.6(b) と図 4.6(d) を比べると誘起されるギャップのサイズが小さくなっていることが分かる。これらはトポロジカルジョセフソン接合の先行研究でも確認されている [89]。 $t_1 = t_2$ の値を更に増加させるとこれらの傾向はより顕著になる。図 4.8(a) は $t_1 = t_2 = -5\Delta$ における $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ の V, φ 依存性を示している。図 4.7(a) と比較すると、 $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ の値が抑制されていることが分かる (図 4.7(a) ではグラフの最大値が 1 であるが図 4.8(a) では最大値が 0.4 であることに注意したい)。また、図 4.8(b) では誘起されるギャップのサイズがより顕著に抑制されていることが分かる。

次に $\lambda'_1 = -\lambda'_2$ の H_R を加えた場合を考える。このときカイラル対称性は保たれている。図 4.9(a) は $\lambda'_1 = -\lambda'_2 = 2.5\Delta$ における $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ を表している。図 4.9(b), (c) はそれぞれ (b) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 0.7\pi)$, (c) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 1.3\pi)$ での $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ を表している。これまでと同様にフラットバンドが存在することが見て取れる。しかし、図 4.9(a) より、これまでの結果と異なり $\varphi = \pi$ を境に $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ が非対称になっている。実際に図 4.9(b), (c) を見ても $\varphi < \pi$ での誘起されるギャップが $\varphi > \pi$ でのギャップに比べ僅かに小さい様子が見て取れる。これらの傾向は RSOC が大きくなるとより顕著になる。図 4.10(a) は $\lambda'_1 = -\lambda'_2 = 5\Delta$ における $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ を表している。また、図 4.10(b), (c) はそれぞれ (a) のパラメータでの (b) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 0.7\pi)$, (c) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 1.3\pi)$ における $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ を表している。ここでは $\varphi = \pi$ に対して対称な点として (b) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 0.7\pi)$ と (c) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 1.3\pi)$ を選んだ。図 4.10(a) に示される通り、 $\varphi < \pi$ での $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ は $\varphi > \pi$ での $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ に比べ著しく小さくなっている。この場合でも依然どちらの領域でもフラットバンドは得られるが $\varphi < \pi$ での誘起ギャップは $\varphi > \pi$ の場合に比べ著しく小さくなっている。なお、ギャップサイズが小さくなるとエッジ状態の局在長が増加するため、接合系内部に浸透する状態が増加する。これによりエッジ近傍での状態密度が低下する。なお、ここでは I 相, II 相の境目を $\varphi = \pi$ のように記述しているが、図 4.9(a), 4.10(a) では厳密には相境界は $\varphi = \pi$ から外れており、図中の白の破線が境界となっている (この破線は付近の LDOS の値の最小値の点を繋いだものである)。実際、図 4.9(d) より、 $\varphi = \pi$ 上でもフラットバンドが現れることを確認した。

次に $t_1 \neq t_2$ の $H_{\delta t}$ を加えた場合を考える。このときカイラル対称性は破られる。図 4.11(a) は $t_1 = 2\Delta, t_2 = -2\Delta$ における $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ を示している。図 4.11(b), (c) はこのパラメータでの (b) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 0.85\pi)$, (c) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, \pi)$ における $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ を表している。この時カイラル対称性が壊れており巻き付き数が定義できないにも関わらず、図 4.11(a) 中の $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ は大きな値を持っておりフラットバンドが現れている。また、これまで相境界であった $\varphi = \pi$ 上でもフラットバンドが確認できる。この理由については後で考察を行う。

最後に $\lambda'_1 \neq -\lambda'_2$ の H_R を加えた場合を考える。このときカイラル対称性は破られる。図 4.12(a) は $\lambda'_1 = 3.5\Delta, \lambda'_2 = -1.5\Delta$ における $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ を示している。図 4.12(b) は $(V, \varphi) = (0.5\Delta, 0.8\pi)$ における $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ を示している。このとき $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ は全パラメータ領域に強く抑制されている。このときの $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ を見ると図 4.12(b) のように RSOC によってフラットバンドが壊されていることが分かる。ただし、本研究で提案した系では対称的な構造を前提としているため、 $\lambda'_1 \neq -\lambda'_2$ となることはありえない。

以上のように摂動 $H_{\delta t}, H_R$ を加えた場合、カイラル対称性が保たれる場合は依然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示された。また、 H_R でカイラル対称性を破った場合、フラットバンドゼロエネルギー状態が壊されることが示された。一方、 $H_{\delta t}$ でカイラル対称性を破った場合にはトポロジカル不変量として巻き付き数を定義

できないにも関わらず、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。また、このとき、その他の場合での結果と異なり $\varphi = \pi$ の相境界が無く、 $\varphi = \pi$ 上でもフラットバンドゼロエネルギー状態が現れた。

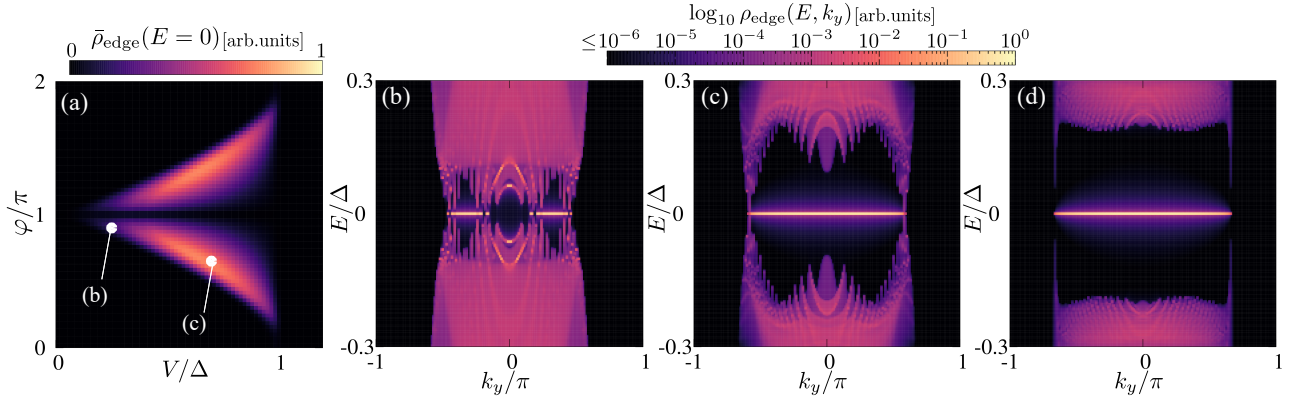


図 4.7 $t_1 = t_2 = -2\Delta$ における結果。このときカイラル対称性は保たれている。(a) ゼロエネルギー局所状態密度 $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ の印加磁場によるゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ V と超伝導体の位相差 φ に対する依存性。(b) $(V, \varphi) = (0.25\Delta, 0.9\pi)$ 、(c) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 0.65\pi)$ における k_y 毎のゼロエネルギー局所状態密度 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ 。(d) は $t_1 = t_2 = 0$ での $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 0.65\pi)$ における k_y 毎のゼロエネルギー局所状態密度 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ 。 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ は $\log_{10} \rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ のように \log スケールでプロットした。自身の論文 [4] からの転載。

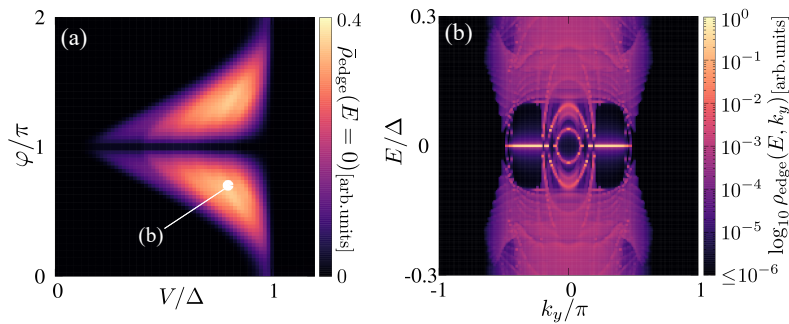


図 4.8 $t_1 = t_2 = -5\Delta$ における結果。このときカイラル対称性は保たれている。(a) ゼロエネルギー局所状態密度 $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ の印加磁場によるゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ V と超伝導体の位相差 φ に対する依存性。(b) $(V, \varphi) = (0.8\Delta, 0.7\pi)$ における k_y 毎のゼロエネルギー局所状態密度 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ 。 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ は $\log_{10} \rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ のように \log スケールでプロットした。自身の論文 [4] からの転載。

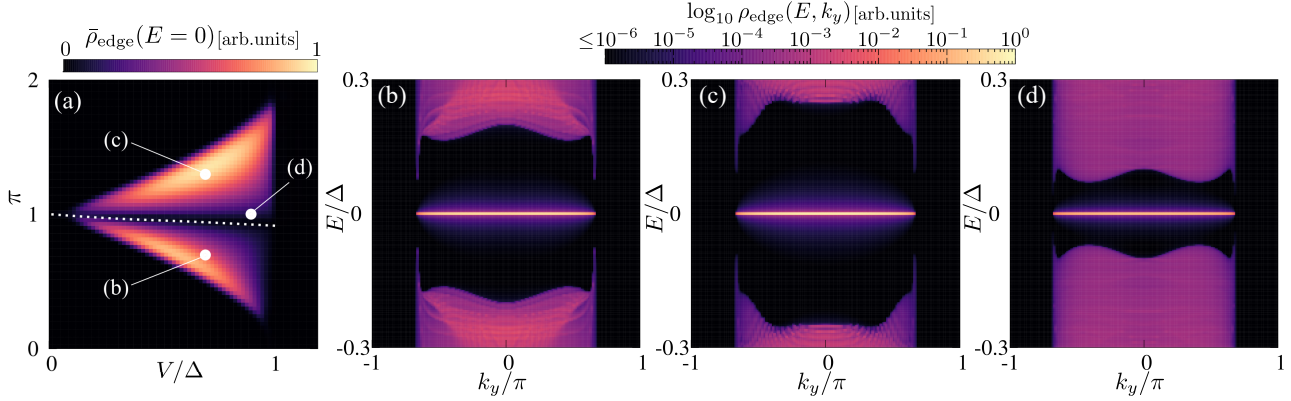


図 4.9 薄膜近傍に $\lambda'_1 = -\lambda'_2 = 2.5\Delta$ の RSOC を考慮した場合の結果。このときカイラル対称性は保たれている。(a) ゼロエネルギー局所状態密度 $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E=0)$ の印加磁場によるゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ V と超伝導体の位相差 φ に対する依存性。破線は $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E=0)$ が局所的に最小値をとる (V, φ) を表している。(b) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 0.7\pi)$ 、(c) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 1.3\pi)$ 、(d) $(V, \varphi) = (0.9\Delta, \pi)$ における k_y 毎のゼロエネルギー局所状態密度 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ 。 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ は $\log_{10} \rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ のように log スケールでプロットした。自身の論文 [4] からの転載。

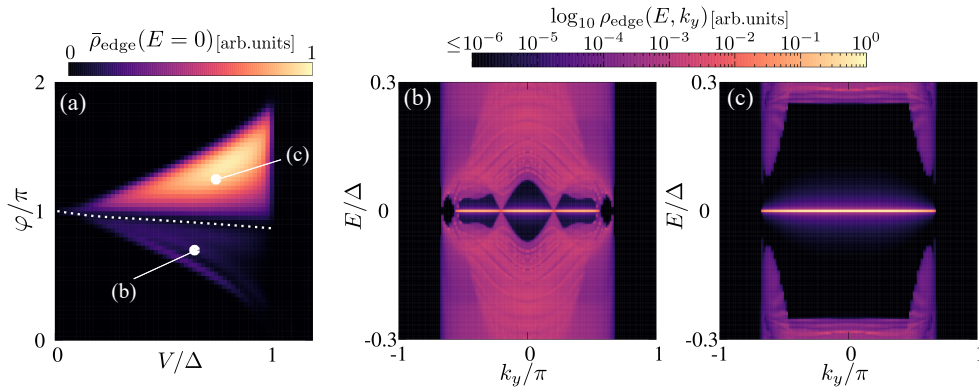


図 4.10 薄膜近傍に $\lambda'_1 = -\lambda'_2 = 5\Delta$ の RSOC を考慮した場合の結果。このときカイラル対称性は保たれている。(a) ゼロエネルギー局所状態密度 $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E=0)$ の印加磁場によるゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ V と超伝導体の位相差 φ に対する依存性。破線は $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E=0)$ が局所的に最小値をとる (V, φ) を表している。(b) $(V, \varphi) = (0.65\Delta, 0.7\pi)$ 、(c) $(V, \varphi) = (0.75\Delta, 1.25\pi)$ における k_y 毎のゼロエネルギー局所状態密度 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ 。 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ は $\log_{10} \rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ のように log スケールでプロットした。自身の論文 [4] からの転載。

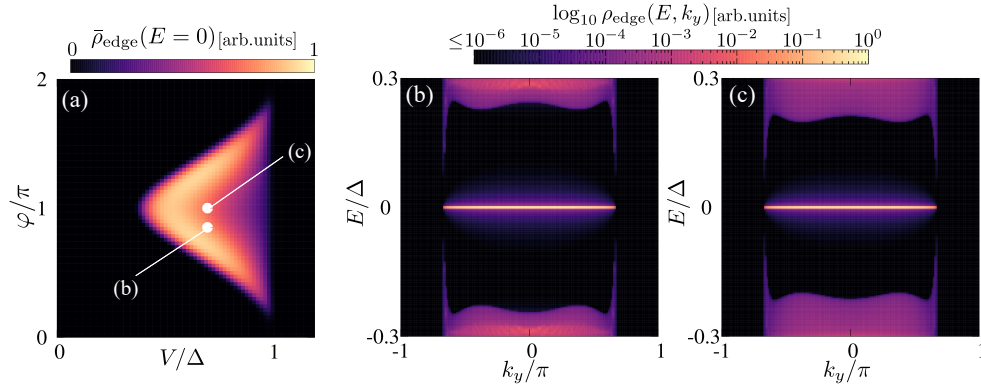


図 4.11 $t_1 = 2\Delta$, $t_2 = -2\Delta$ における結果。このときカイラル対称性は破れている。(a) ゼロエネルギー局所状態密度 $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ の印加磁場によるゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ V と超伝導体の位相差 φ に対する依存性。(b) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, 0.85\pi)$ 、(c) $(V, \varphi) = (0.7\Delta, \pi)$ における k_y 毎のゼロエネルギー局所状態密度 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ 。 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ は $\log_{10} \rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ のように log スケールでプロットした。自身の論文 [4] からの転載。

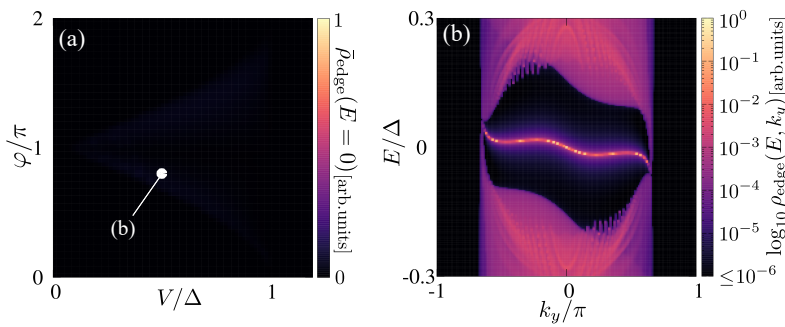


図 4.12 薄膜近傍に $\lambda'_1 = 3.5\Delta$, $\lambda'_2 = -1.5\Delta$ の RSOC を考慮した場合の結果。このときカイラル対称性は破れている。(a) ゼロエネルギー局所状態密度 $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ の印加磁場によるゼーマン磁場の作るポテンシャルの大きさ V と超伝導体の位相差 φ に対する依存性。破線は $\bar{\rho}_{\text{edge}}(E = 0)$ が局所的に最小値をとる (V, φ) を表している。(b) $(V, \varphi) = (0.5\Delta, 0.8\pi)$ における k_y 毎のゼロエネルギー局所状態密度 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ 。 $\rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ は $\log_{10} \rho_{\text{edge}}(k_y; E)$ のように log スケールでプロットした。自身の論文 [4] からの転載。

4.7 考察: $H_{\delta t}$ でカイラル対称性を破った場合に生じるフラットバンドの由来

これまでの結果として、 $H_{\delta t}$ によってカイラル対称性が破れ一次元巻き付き数が定義できなくなった場合においてもフラットバンドが現れることが確認された。この原因について考察する。今回の接合界面ではノードのある二次元系が実現している。ここでトポロジーについて議論するためには、 y 軸方向の波数を k_y に固定して一次元系と見なしその一次元系でトポロジカル不変量を定義する必要がある。そのため以下のようなカイラル対称性が必要であった。

$$\check{S}_{\text{eff}} \check{H}_{\text{eff}}(k_x, k_y) \check{S}_{\text{eff}}^{-1} = -\check{H}_{\text{eff}}(k_x, k_y)$$

本系では先述の時間反転対称性、電子正孔対称性、カイラル対称性だけでなく、以下のように y 軸についての反転対称性が存在する。

$$\check{R}_{k_y} \check{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}) \check{R}_{k_y}^{-1} = \check{H}_{\text{eff}}(k_x, -k_y) = \check{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}), \quad (4.35)$$

$$\check{R}_y \check{H}(\mathbf{r}) \check{R}_y^{-1} = \check{H}(x, -y, z) = \check{H}(\mathbf{r}), \quad (4.36)$$

\check{R}_{k_y} (\check{R}_y) は $k_y \rightarrow -k_y$ ($y \rightarrow -y$) とする演算子である。これらの対称性を組み合わせると以下の式 (4.37) 及び式 (4.38) ような時間反転対称性、電子正孔対称性を定義することができる。

$$\begin{aligned} \check{T}_{\text{eff}} \check{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}) \check{T}_{\text{eff}}^{-1} &= \check{H}_{\text{eff}}(-k_x, k_y), \\ \check{T}_{\text{eff}} &= \check{R}_{k_y} \check{T}_{\text{eff}}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

$$\begin{aligned} \check{C}_{\text{eff}} \check{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}) \check{C}_{\text{eff}}^{-1} &= -\check{H}_{\text{eff}}(-k_x, k_y), \\ \check{C}_{\text{eff}} &= \check{R}_{k_y} \check{C}_{\text{eff}}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

また、これらの対称性は元の系全体のハミルトニアンに対しても同様に定義することができる。

$$\check{T} \check{H}(\mathbf{r}) \check{T}^{-1} = \check{H}(\mathbf{r}), \quad \check{T} = \check{R}_y \check{T}, \quad (4.39)$$

$$\check{C} \check{H}(\mathbf{r}) \check{C}^{-1} = -\check{H}(\mathbf{r}), \quad \check{C} = \check{R}_y \check{C}. \quad (4.40)$$

また、これらを組み合わせて定義されるカイラル対称性は元々のカイラル対称性と一致する。

$$\check{S}_{\text{eff}} = \check{T}_{\text{eff}} \check{C}_{\text{eff}} = \check{S}_{\text{eff}}, \quad (4.41)$$

$$\check{S} = \check{T} \check{C} = \check{S}. \quad (4.42)$$

ここで注目すべき点はカイラル対称性だけでなくこれらの対称操作では波数 k_y の符号は反転しない点である。これらの対称操作の下で $\check{H}_{\text{eff}}(k_x, k_y)$ はパラメータ k_y を持つ一次元のハミルトニアンと見なすことができる [98]。この一次元のハミルトニアン $\check{H}_{\text{eff}}(k_x, k_y)$ はカイラル対称性だけでなく式 (4.37), (4.38) の対称性を有する。また、 $\check{T}_{\text{eff}}^2 = +1$, $\check{C}_{\text{eff}}^2 = +1$ が成り立つので、一次元のハミルトニアン $\check{H}_{\text{eff}}(k_x, k_y)$ は BDI クラスに分類される [101]。このとき、ハミルトニアンは一次元巻き付き数 ω で特徴づけられる。また、このとき同時に波数 k_y 毎に \mathbb{Z}_2 を定義することができ、その値は $(-1)^{\omega(k_y)}$ で与えられる [89]。摂動を加え対称性が破れてもカイラル対称性が保たれているとき、この系は BDI クラスから AIII クラスになる [表 4.1]。この場合、依然として系はトポロジカル不変量 \mathbb{Z} すなわち巻き付き数 ω で特徴づけられる。一方、カイラル対称性が破られても式 (4.38) の対称性が保たれれば系は D クラスになる。このとき巻き付き数は定義できないが、 \mathbb{Z}_2 のトポロジカル不変量が残る、系を特徴づける。

このように本系はカイラル対称性から定義される巻き付き数に対応してフラットバンドゼロエネルギー状態が現れるが、カイラル対称性が破れても式 (4.38) のような電子正孔対称性が保たれる場合は \mathbb{Z}_2 に対応してフラットバンドゼロ

エネルギー状態が現れる。このとき巻き付き数 ± 1 で区別されていた二つの相は同じ $\mathbb{Z}_2 = -1$ を持つ。また、相境界の $\varphi = \pi$ で $t_1 \neq t_2$ ではギャップが開き相境界が消失するため図 4.11(a) のような結果が得られたと考えられる。

表 4.1 トポロジカルなクラスと対称性・トポロジカル不変量との関係

クラス	時間反転対称性	電子正孔対称性	カイラル対称性	トポロジカル不変量
BDI	○	○	○	\mathbb{Z} (巻きつき数)
AIII	×	×	○	\mathbb{Z}
D	×	○	×	\mathbb{Z}_2

4.8 第4章まとめ

本研究では永久スピン旋回状態を実現するような一軸的なスピン軌道相互作用を持つ二次元半導体薄膜を s 波超伝導体で挟んだ三次元のトポロジカルジョセフソン接合について研究を行った。その結果として、半導体薄膜近傍が実効的に p_x 波超伝導体となっていること、弱いゼーマン磁場を印加するだけでフラットバンドゼロエネルギー状態が半導体薄膜の端に現れることを解析的・数値的に示した。この系の利点としては (i) 既存の物質を組み合わせることで作成可能である, (ii) ペアポテンシャルに比べ小さい磁場でフラットバンドが表れる, (iii) 対称的な構造から RSOC の存在が無視できるという三点があげられる。

第 5 章

全体のまとめ

本論文では第 2 章から第 4 章にかけて、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研究を行った。

第 2 章ではラシュバ型スピン (RSOC) とゼーマン磁場の共存する系の持つ、スピン構造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電気伝導にどのような変化を与えるかを調べた。その結果として

- RSOC とゼーマン磁場の共存する系の波動関数はゼーマン磁場により生じるギャップ内で関数形が変化する。この変化は波数の二乗とエネルギーの分散関係から理解できる。また、その変化を踏まえないと正常にコンダクタンスの計算が行えない。
- コンダクタンスは RSOC とゼーマン磁場の共存する系の各電子状態における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を反映している。

ことが明らかになった。

第 3 章ではトポロジカルディラック半金属 (TDSM) のスピンホールコンダクタンス (SHC) を格子モデルから計算した。その結果として

- TDSM には SHC のパラメータ依存性の異なる二つの領域が存在する。
- SHC のパラメータ依存性の違いはミラーチェーン数の違いを反映している。

ことが明らかになった。

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数値的に示した。その結果として

- 超伝導ペアポテンシャルに比べ弱いゼーマン磁場でフラットバンドゼロエネルギー状態が現れる。
- 半導体薄膜近傍で生じる実効的な p_x 波のペアポテンシャルによりフラットバンドゼロエネルギー状態が現れる。
- カイラル対称性が破れなければ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。これらの計算及び結果はバンド構造からは自明でなく、系の数学的構造に起因するものであった。

論文リスト

本博士論文における主要な出版論文は以下の通りである。

- [1] Daisuke Oshima, Katsuhisa Taguchi, and Yukio Tanaka, "Tunneling conductance in two-dimensional junctions between a normal metal and a ferromagnetic Rashba metal", *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 87, 034710 (2018)
- [2] Daisuke Oshima, Katsuhisa Taguchi, and Yukio Tanaka, "Unconventional gate voltage dependence of the charge conductance caused by spin-splitting Fermi surface by Rashba-type spin-orbit coupling", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 114, 113615 (2019)
- [3] Katsuhisa Taguchi, Daisuke Oshima, Yusuke Yamaguchi, Tatsuki Hashimoto, Yukio Tanaka, and Masatoshi Sato, "Spin Hall conductivity in topological Dirac semimetals", *Physical Review B*, vol 101, 235201 (2020)
- [4] Daisuke Oshima, Satoshi Ikegaya, Andreas P. Schnyder, and Yukio Tanaka, "Flat-band Majorana bound states in topological Josephson junctions", arXiv:2111.03880 (投稿中)

謝辞

研究及び論文の執筆を行うにあたり様々な人にお世話になりました。指導教員の田仲由喜夫教授には学部時代から個人的な悩みや研究についてなどを含めて様々な相談にのっていただきました。心よりお礼申し上げます。第2章・第3章の研究については当研究室の研究者であった田口勝久氏に大変お世話になりました。田口氏には名古屋大学から移動された後も研究・プレゼンテーションの仕方、論文執筆に関して多大なご助言、ご協力を頂きました。心よりお礼申し上げます。第4章の研究に関しては当研究室研究員の池谷聡氏に大変お世話になりました。私自身これまで携わってこなかったトポロジカル超伝導について研究を進めることができたのはひとえに池谷氏の多大なご尽力によるものです。また、池谷氏と研究できたことは私自身にとって大変勉強になりました。心よりお礼申し上げます。また、本論文の副査を担当していただいた川口由紀教授、柏谷聡教授、伊東裕准教授、小林晃人准教授と当研究室特任助教の藤本 和也氏、田村 駿氏には本論文の作成、プレゼンテーションに当たり貴重なご意見をいただきました。心よりお礼申し上げます。同研究室の後輩の米屋斗馬君には本論文の構成に協力していただきました。心よりお礼申し上げます。友人の奥田真子さんにはこの論文の校正に多大なご協力をいただきました。深く感謝致します。その他研究室のメンバー、友人のおかげで楽しく5年間が過ごすことが出来ました。感謝いたします。

最後に母 幸子、妹 美月、祖母の歌子に深い感謝を捧げます。また、令和三年に死去した祖父 峯廣に拙い論文ではありますが、本論文を捧げます。

付録 1-1: グリーン関数を用いた 2次元 FRM の状態密度の導出

ここではグリーン関数を用いて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二次元系の状態密度 (DOS) を計算する。波数 k に対する遅延グリーン関数 \mathcal{G}_k^R と状態密度に対応する行列 ρ は以下の関係にある。

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_k \mathcal{G}_k^R(E). \quad (1)$$

ここで \mathcal{G}_k^R を以下のように固有値 E_+ と E_- に対応するグリーン関数 \mathcal{G}_k^{R+} と \mathcal{G}_k^{R-} に分解する。

$$\mathcal{G}_k^R = \mathcal{G}_k^{R+} + \mathcal{G}_k^{R-}, \quad (2)$$

$$\mathcal{G}_k^{R\pm} = \frac{\Omega_{\pm}}{E - E_{\pm} + i\delta}, \quad (3)$$

$$\Omega_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \mathbf{n} \cdot \hat{\sigma}), \quad (4)$$

$$\mathbf{n} \equiv -\frac{\alpha(\mathbf{k} \times \hat{z}) + M\hat{z}}{\sqrt{\alpha^2 k^2 + M^2}}. \quad (5)$$

\hat{z} は z 軸方向の単位ベクトルである。これに合わせて、 ρ を以下のように ρ^{\pm} に分解する。

$$\rho(E) = \rho^+(E) + \rho^-(E), \quad (6)$$

$$\rho^{\pm}(E) \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_k \mathcal{G}_k^{R\pm}(E). \quad (7)$$

まず初めに $\rho^-(E)$ を計算する。

$$\begin{aligned} \rho^-(E) &= -\frac{1}{2\pi} \text{Im} \sum_k \frac{1 - \mathbf{n} \cdot \hat{\sigma}}{E - E_- + i\delta} \\ &= -\frac{1}{4\pi^2} \text{Im} \int_0^{\infty} k dk \frac{1 - n_z \hat{\sigma}_z}{E - E_- + i\delta} \\ &= \frac{\nu_e}{2\pi} \text{Im} \int_0^{\infty} d\epsilon_0 \frac{1 - n_z(\epsilon_0) \hat{\sigma}_z}{\epsilon_0 - 2\sqrt{E_c} \sqrt{\epsilon_0 + E_c} - (E + i\delta)}, \end{aligned} \quad (8)$$

$\epsilon_0 = \hbar^2 k^2 / (2m)$ は運動エネルギー、 $2\nu_e = m / (\pi \hbar^2)$ は 2次元電子ガスの DOS、 n_z は式 (5) の \mathbf{n} の z 成分である。 $\xi = \sqrt{\epsilon_0 + E_c}$ と置換すると、 ρ^- は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \rho^-(E) &= \frac{\nu_e}{\pi} \text{Im} \int_{\sqrt{E_c}}^{\infty} d\xi \frac{[1 - n_z(\xi) \hat{\sigma}_z] \xi}{\xi^2 - 2\sqrt{E_c} \xi - (E + E_c) - i\delta} \\ &= \frac{\nu_e}{\pi} \text{Im} \int_{\sqrt{E_c}}^{\infty} d\xi \frac{\xi + \sqrt{E_c} \hat{\sigma}_z}{F_-(\xi) - i\delta} \\ &= \frac{\nu_e}{2i\pi} \int_{\sqrt{E_c}}^{\infty} d\xi \left[\frac{\xi + \sqrt{E_c} \hat{\sigma}_z}{F_-(\xi) - i\delta} - \frac{\xi + \sqrt{E_c} \hat{\sigma}_z}{F_-(\xi) + i\delta} \right] \\ &= \nu_e \int_{\sqrt{E_c}}^{\infty} d\xi (\xi + \sqrt{E_c} \hat{\sigma}_z) \delta[F_-(\xi)]. \end{aligned} \quad (9)$$

ここで非対角項は積分後に 0 になるので無視した。また、式 (9) の 1 行目から 2 行目の変形では n_z が次のように書けることを用いた。

$$n_z = -\frac{M}{\sqrt{\alpha^2 k^2 + M^2}} = -\sqrt{\frac{E_c}{\epsilon_0 + E_c}} = -\frac{\sqrt{E_c}}{\xi}. \quad (10)$$

また、 $F_-(\xi)$ は以下の関数である。

$$F_-(\xi) = \xi^2 - 2\sqrt{E_\alpha}\xi - (E + E_c) = (\xi - \xi_1)(\xi - \xi_2). \quad (11)$$

$\xi_{1(2)} = \sqrt{E_\alpha} + (-)\sqrt{\epsilon}$, $\epsilon = E + E_\alpha + E_c$ である。ここから式 (9) 中の $\delta[F_-(\xi)]$ は以下のように変形される。

$$\begin{aligned} \delta[F_-(\xi)] &= \frac{1}{|\partial_\xi F_-(\xi_1)|} \delta(\xi - \xi_1) + \frac{1}{|\partial_\xi F_-(\xi_2)|} \delta(\xi - \xi_2) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\epsilon}} [\delta(\xi - \xi_1) + \delta(\xi - \xi_2)]. \end{aligned} \quad (12)$$

以上の結果より最終的に以下のように ρ^- を得る。

$$\begin{aligned} \rho^-(E) &= \frac{\nu_e}{2\sqrt{\epsilon}} \int_{\sqrt{E_c}}^{\infty} d\xi \left(\xi + \sqrt{E_c} \hat{\sigma}_z \right) [\delta(\xi - \xi_1) + \delta(\xi - \xi_2)] \\ &= \frac{\nu_e}{2} \left[\left(1 + \frac{2E_\alpha + M\hat{\sigma}_z}{2\sqrt{E_\alpha}\epsilon} \right) \theta(\sqrt{\epsilon} + \sqrt{E_\alpha} - \sqrt{E_c}) \right. \\ &\quad \left. + \left(-1 + \frac{2E_\alpha + M\hat{\sigma}_z}{2\sqrt{E_\alpha}\epsilon} \right) \theta(-\sqrt{\epsilon} + \sqrt{E_\alpha} - \sqrt{E_c}) \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

式 (4) より α を $-\alpha$ に置き換えることで (即ち $\sqrt{E_\alpha} \rightarrow -\sqrt{E_\alpha}$) ρ^+ を以下のように得る。

$$\rho^+(E) = \frac{\nu_e}{2} \left(1 - \frac{2E_\alpha + M\hat{\sigma}_z}{2\sqrt{E_\alpha}\epsilon} \right) \theta(\sqrt{\epsilon} - \sqrt{E_\alpha} - \sqrt{E_c}). \quad (14)$$

式 (13) 及び (14) より行列 $\rho(E)$ は以下のようになる。

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{\nu_e}{2} \left[\left(1 - \frac{2E_\alpha + M\hat{\sigma}_z}{2\sqrt{E_\alpha}\epsilon} \right) \theta(\sqrt{\epsilon} - \sqrt{E_\alpha} - \sqrt{E_c}) \right. \\ &\quad + \left(1 + \frac{2E_\alpha + M\hat{\sigma}_z}{2\sqrt{E_\alpha}\epsilon} \right) \theta(\sqrt{\epsilon} + \sqrt{E_\alpha} - \sqrt{E_c}) \\ &\quad \left. + \left(-1 + \frac{2E_\alpha + M\hat{\sigma}_z}{2\sqrt{E_\alpha}\epsilon} \right) \theta(-\sqrt{\epsilon} + \sqrt{E_\alpha} - \sqrt{E_c}) \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

ここで、 ρ の (1,1) 成分を $\rho_{\uparrow\uparrow}$, (2,2) 成分を $\rho_{\downarrow\downarrow}$ と置くと $\rho_{\uparrow\uparrow}$ はアップスピン電子の DOS、 $\rho_{\downarrow\downarrow}$ はダウンスピン電子の DOS に対応している。ここから電子の DOS は ρ のトレース $\text{Tr}[\rho] = \rho_{\uparrow\uparrow} + \rho_{\downarrow\downarrow}$ である。

付録 2-1: スピンホールコンダクタンスの導出

ここではグリーン関数を用いたトポロジカルディ半金属のスピホールコンダクタンスの計算から、式 (3.20) の導出を行う。グリーン関数は以下の式 (16) の形で書くことができる。

$$G^a(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\mathcal{P}_+(\mathbf{k})}{\hbar\omega - i\delta - E(\mathbf{k})} + \frac{\mathcal{P}_-(\mathbf{k})}{\hbar\omega - i\delta + E(\mathbf{k})} \quad (16)$$

ここで $\mathcal{P}_\pm(\mathbf{k}) = [1 \pm \tilde{H}/E(\mathbf{k})]/2$ 、 δ は正の微小量である。式 (16) の第一項と第二項はそれぞれ $E(\mathbf{k})$ の分散と $-E(\mathbf{k})$ の分散からの寄与である。式 (3.21) に式 (16) を代入すると

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^z &= e\hbar \sum_{\mathbf{k}, \omega} \left\{ \frac{\partial f_\omega}{\partial \omega} \text{tr} \left[v_{s,x}^z G_{\mathbf{k}, \omega}^r v_y G_{\mathbf{k}, \omega}^a \right] + \frac{1}{2} \text{tr} \left[v_{s,x}^z \left(\frac{\partial G^a}{\partial \omega} v_y G^a - G^a v_y \frac{\partial G^a}{\partial \omega} \right) - \text{h.c.} \right] \right\} \\ &= e\hbar^2 \sum_{\mathbf{k}, \omega} \left\{ \frac{\partial f_\omega}{\partial (\hbar\omega)} \text{tr} \left[\frac{v_{s,x}^z \mathcal{P}_+ v_y \mathcal{P}_+}{|h - E|^2} + \frac{v_{s,x}^z \mathcal{P}_- v_y \mathcal{P}_-}{|h + E|^2} + \frac{v_{s,x}^z \mathcal{P}_+ v_y \mathcal{P}_-}{(h^* - E)(h + E)} + \frac{v_{s,x}^z \mathcal{P}_- v_y \mathcal{P}_+}{(h - E)(h^* + E)} \right] \right. \\ &\quad \left. + \text{tr} \left[v_{s,x}^z (\mathcal{P}_+ v_y \mathcal{P}_- - \mathcal{P}_- v_y \mathcal{P}_+) \right] \left[\frac{f_\omega E}{[h^2 - E^2]^2} - \text{h.c.} \right] \right\}, \end{aligned}$$

となる。ここで $h \equiv \hbar\omega - i\delta$ である。ここで以下の式 (19) の関係式が成り立つ。

$$\text{tr} [v_{s,x}^z v_y] = 0, \quad (17)$$

$$\text{tr} [v_{s,x}^z \mathcal{H} v_y \mathcal{H}] = 0, \quad (18)$$

$$\text{tr} [\mathcal{H}(v_{s,x}^z v_y + v_y v_{s,x}^z)] = 0. \quad (19)$$

よって式 (17) の $\text{tr} [v_{s,x}^z \mathcal{P}_\pm v_y \mathcal{P}_\pm]$ と $\text{tr} [v_{s,x}^z \mathcal{P}_\pm v_y \mathcal{P}_\mp]$ は

$$\text{tr} [v_{s,x}^z \mathcal{P}_\pm v_y \mathcal{P}_\pm] = \frac{1}{4} \text{tr} \left[v_{s,x}^z v_y + v_{s,x}^z \mathcal{H} v_y \mathcal{H} \pm \frac{1}{E} \mathcal{H}(v_{s,x}^z v_y + v_y v_{s,x}^z) \right] = 0 \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \text{tr} [v_{s,x}^z \mathcal{P}_\pm v_y \mathcal{P}_\mp] &= \frac{1}{4} \text{tr} \left[v_{s,x}^z v_y - v_{s,x}^z \mathcal{H} v_y \mathcal{H} \pm \frac{1}{E} \mathcal{H}(v_{s,x}^z v_y - v_y v_{s,x}^z) \right] \\ &= \pm \frac{1}{4E} \text{tr} [\mathcal{H}(v_{s,x}^z v_y - v_y v_{s,x}^z)] \\ &= \pm \frac{i\eta}{E\hbar} [a_z \eta \cos k_x \cos k_y - a_x t_{xy} \sin k_x \cos k_y + a_y t_{xy} \sin k_y \cos k_x] \end{aligned} \quad (21)$$

となる。ここでスピンベリー曲率 $\Omega_{xy}^z(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned} \Omega_{xy}^z(\mathbf{k}) &\equiv i \sum_{m \neq n, E_n > E_m} \frac{\langle n, \mathbf{k} | v_{s,x}^z | m, \mathbf{k} \rangle \langle m, \mathbf{k} | v_y | n, \mathbf{k} \rangle - (x \leftrightarrow y)}{[E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k})]^2} \\ &= \frac{\eta^2}{2\hbar E^3} [\cos k_x \cos k_y (M - t_z \cos k_z) - t_{xy} (\cos k_x + \cos k_y)]. \end{aligned} \quad (22)$$

と書ける。ここで $|m, \mathbf{k}\rangle$ は固有値 E_m の波動関数である。式 (22) のスピンベリー曲率 $\Omega_{xy}^z(\mathbf{k})$ を用いると式 (21) は

$$\text{tr} [v_{s,x}^z \mathcal{P}_\pm v_y \mathcal{P}_\mp] = \pm 2i \Omega_{xy}^z(\mathbf{k}) E^2(\mathbf{k}) \quad (23)$$

と書くことができる。よって式 (17) は

$$\sigma_{xy}^z = e\hbar^2 \sum_{\mathbf{k}, \omega} [2iE^2 \Omega_{xy}^z(\mathbf{k})] \left\{ \frac{\partial f_\omega}{\partial (\hbar\omega)} \left[\frac{1}{(h^* - E)(h + E)} - \frac{1}{(h - E)(h^* + E)} \right] + 2 \left[\frac{f_\omega E}{[h^2 - E^2]^2} - \text{h.c.} \right] \right\}. \quad (24)$$

ここで式 (24) の ω についての和の部分を取り出すと

$$\sum_{\omega} \left\{ \frac{\partial f_{\omega}}{\partial(\hbar\omega)} \left[\frac{1}{(\hbar^* - E)(\hbar + E)} - \frac{1}{(\hbar - E)(\hbar^* + E)} \right] + 2 \left[\frac{f_{\omega} E}{[(\hbar\omega - i\delta)^2 - E^2]^2} - \text{h.c.} \right] \right\} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\hbar\omega \left[\frac{\partial f_{\omega}}{\partial(\hbar\omega)} \left[\frac{1}{(\hbar\omega + i\delta - E)(\hbar\omega - i\delta + E)} - \frac{1}{(\hbar\omega - i\delta - E)(\hbar\omega + i\delta + E)} \right] \right. \\ &\quad \left. + 2 \left[\frac{f_{\omega} E}{[(\hbar\omega - i\delta) - E]^2 [(\hbar\omega - i\delta) + E]^2} - \frac{f_{\omega} E}{[(\hbar\omega + i\delta) - E]^2 [(\hbar\omega + i\delta) + E]^2} \right] \right] \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \oint_{\text{upper half circle}} dz \left\{ f'_z \left[\frac{1}{[z - (E - i\delta)][z - (-E + i\delta)]} - \frac{1}{[z - (E + i\delta)][z - (-E - i\delta)]} \right] \right. \\ &\quad \left. + 2 \left[\frac{f_z E}{[z - (E + i\delta)]^2 [z - (-E + i\delta)]^2} - \frac{f_z E}{[z - (E - i\delta)]^2 [z - (-E - i\delta)]^2} \right] \right\} \\ &= \frac{i}{2\hbar} \left[\frac{f'_z(-E + i\delta)}{-E + i\delta} - \frac{f'_z(E + i\delta)}{E + i\delta} \right] + 2 \times \frac{i}{4\hbar} \left[\frac{f'(E) + f'(-E)}{E} - \frac{f(E) - f(-E)}{E^2} \right] \quad (26) \end{aligned}$$

$$=_{\delta \rightarrow 0} \frac{i}{2\hbar} \frac{f'_z(E) + f'_z(-E)}{E} + 2 \times \frac{i}{4\hbar} \left[\frac{f'(E) + f'(-E)}{E} - \frac{f(E) - f(-E)}{E^2} \right] \quad (27)$$

$$= \frac{i}{2\hbar} \frac{f(E) - f(-E)}{E^2} \quad (28)$$

となる。ここで $f(E)$ はフェルミ分布関数である。よって最終的にスピンホールコンダクタンスの表式として以下を得る。

$$\sigma_{xy}^z = e\hbar \sum_{\mathbf{k}} [f(E) - f(-E)] \Omega_{xy}^z(\mathbf{k}) \quad (29)$$

付録 2-2: トポロジカルディラック半金属のエッジ状態

トポロジカルディラック半金属相とトポロジカル絶縁体相はノンゼロのミラーチャーン数を持つ。これに対応してエッジ状態を持つ。図 1 は $y-z$ 面に平行な表面における $k_z = 0, k_z = \pi$ でのバンド分散である。 $M/t_z < 1, M/t_z > 1$ でのトポロジカルディラック半金属相のエッジ状態 [図 1(a) と (b)] を比較すると、 $k_z = 0$ 面でのミラーチャーン数の違いを反映してエッジ状態のバンド (青色の破線と緑色の破線) の交差する位置が異なる。また、トポロジカル絶縁体相でも同様に $M/t_z < 1, M/t_z > 1$ での $k_z = 0$ 面でのミラーチャーン数の違いを反映してエッジ状態のバンドの交差する位置が異なる [図 1(c) と (d)]。

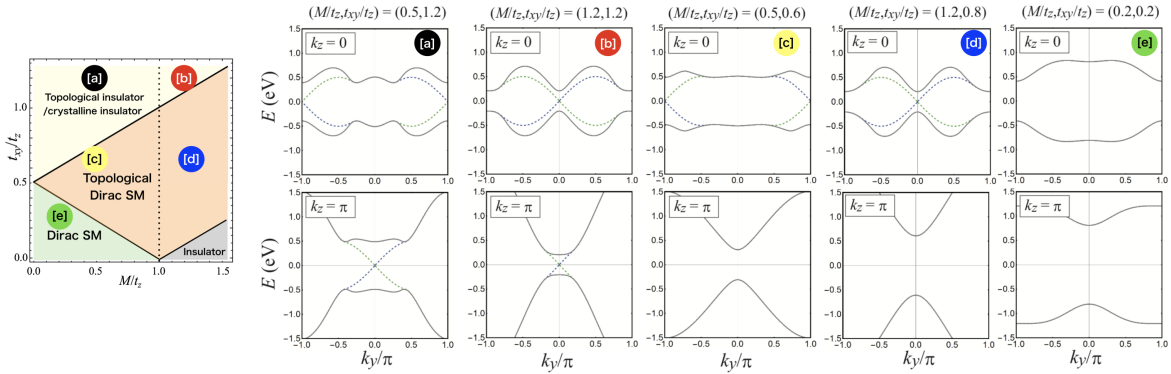


図 1 $y-z$ 面に平行な表面における $k_z = 0, k_z = \pi$ でのバンド分散。(a) は $M/t_z < 1$ のトポロジカル絶縁体相、(b) は $M/t_z > 1$ のトポロジカル絶縁体相、(c) は $M/t_z < 1$ のトポロジカルディラック半金属相、(d) は $M/t_z > 1$ のトポロジカルディラック半金属相、(e) はディラック半金属相である。青色 (緑色) の破線はハミルトニアンのアップスピン (ダウンスピン) の部分から生じるエッジ状態である。

付録 3-1:束縛状態の波動関数の導出

ここでは半導体薄膜近傍を記述する有効ハミルトニアンを構築する際に使用した、薄膜近傍の束縛状態の波動関数の導出過程を紹介する。式 (4.1) の \hat{H}_0 を満たす束縛状態を求めるには以下の BdG 方程式を解けばよい。今、ここでゼーマン磁場の作るポテンシャル V はエネルギーをシフトさせるだけなので無視している。

$$\begin{bmatrix} \xi(\mathbf{r}) & s\Delta(z) \\ s\Delta^*(z) & -\xi(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_s(\mathbf{r}) \\ v_s(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} u_s(\mathbf{r}) \\ v_s(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (30)$$

ここから $z < 0$ と $x > 0$ の超伝導体中の波動関数として以下の $\psi_{b,s}$ と $\psi_{t,s}$ を得る。

$$\psi_{b,s}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} u_{b,s}(\mathbf{r}) \\ v_{b,s}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \left(\frac{A_{b,s}}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} e^{i\eta} \\ se^{-i\varphi/2} \end{bmatrix} e^{-ik_+z} + \frac{B_{b,s}}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} se^{i\varphi/2} \\ e^{i\eta} \end{bmatrix} e^{ik_-z} \right) \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x}} \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}}, \quad (31)$$

$$\psi_{t,s}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} u_{t,s}(\mathbf{r}) \\ v_{t,s}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \left(\frac{A_{t,s}}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} e^{i\eta} \\ se^{i\varphi/2} \end{bmatrix} e^{ik_+z} + \frac{B_{t,s}}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} se^{-i\varphi/2} \\ e^{i\eta} \end{bmatrix} e^{-ik_-z} \right) \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x}} \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}}, \quad (32)$$

ここで

$$k_{\pm} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{\mu_z^2 + \Omega^2} e^{\pm iQ}}, \quad 2Q = \arctan \frac{\Omega}{\mu_z}, \quad \mu_z = \mu - \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2), \quad (33)$$

$$\eta = \arctan \frac{\Omega}{\varepsilon}, \quad \Omega = \sqrt{\Delta^2 - \varepsilon^2}, \quad (34)$$

である。

ここで接続条件として以下の条件を課す。

$$\lim_{z \rightarrow 0} \psi_{b,s}(\mathbf{r}) = \lim_{z \rightarrow 0} \psi_{t,s}(\mathbf{r}), \quad (35)$$

$$\partial_z \psi_{b,s}(\mathbf{r})|_{z=0} = \partial_z \psi_{t,s}(\mathbf{r})|_{z=0}, \quad (36)$$

また、規格化条件として以下を課す。

$$\int dx \int dy \left\{ \int_{-\infty}^0 dz \psi_{b,s}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{b,s}(\mathbf{r}) + \int_0^{\infty} dz \psi_{t,s}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{t,s}(\mathbf{r}) \right\} = 1, \quad (37)$$

ここから ε , D と各係数について以下を得る。

$$\varepsilon = \Delta \sqrt{1 - D \sin^2(\varphi/2)}, \quad (38)$$

$$D = \frac{\Delta^2 \sin^2(\varphi/2) - \mu_z^2 + \mu_z \sqrt{2\Delta^2 \sin^2(\varphi/2) + \mu_z^2}}{2\Delta^2 \sin^2(\varphi/2)}, \quad (39)$$

$$A_{b,s} = \frac{-sie^{-iQ/2} f_-}{\sqrt{N}}, \quad B_{b,s} = \frac{e^{-i\varphi/2} e^{iQ/2} f_+}{\sqrt{N}}, \quad A_{t,s} = \frac{se^{-i\varphi/2} e^{-iQ/2} f_+}{\sqrt{N}}, \quad B_{t,s} = \frac{ie^{iQ/2} f_-}{\sqrt{N}}. \quad (40)$$

ここで

$$f_{\pm} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\sqrt{D \sin^2(\varphi/2)}}{\sqrt{1 - D \sin^2(\varphi/2)}} \cot(\varphi/2) \right)}, \quad N = \frac{1}{\kappa} D(3 - 2D), \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{\mu_z^2 + \Omega^2} \sqrt{1 - D}}, \quad (42)$$

である。また、 $[u_s, v_s]^T$ が BdG の解であるとき $[-v_s^*, u_s^*]^T$ も解となる:

$$\begin{bmatrix} \xi(\mathbf{r}) & s\Delta(z) \\ s\Delta^*(z) & -\xi(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -v_s^*(\mathbf{r}) \\ u_s^*(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = -\varepsilon \begin{bmatrix} -v_s^*(\mathbf{r}) \\ u_s^*(\mathbf{r}) \end{bmatrix}. \quad (43)$$

付録 3-2: 巻きつき数の計算方法

トポロジカル不変量はエネルギーギャップを閉じない限り変化しないので、式 (4.8) の有効ハミルトニアンをギャップが閉じないように加減すると、有効ハミルトニアンは以下の \hat{H}_+ と \hat{H}_- の項に簡単化される。

$$\hat{H}_s = \begin{bmatrix} \varepsilon + sV & -s\tilde{\Delta}k_x \\ -s\tilde{\Delta}k_x & -\varepsilon - sV \end{bmatrix} \quad (44)$$

ここで \hat{H}_+ と \hat{H}_- のどちらも以下のようにカイラル対称性を持つ。

$$\hat{S}_s \hat{H}_s(\mathbf{k}_{\parallel}) \hat{S}_s^{-1} = -\hat{H}_s(\mathbf{k}_{\parallel}), \quad \hat{S}_s = s \begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}. \quad (45)$$

ここで \hat{H}_+ の項は完全にギャップが開いている。フラットバンドゼロエネルギー状態に関係するのは \hat{H}_- のみであるので、 \hat{H}_- から巻き付き数を計算すればよい。結果として巻き付き数は以下のように計算できる。

$$w(k_y) = \frac{i}{4\pi} \int dk_x \text{Tr}[\hat{S}_- \{\hat{H}_-(\mathbf{k}_{\parallel})\}^{-1} \partial_{k_x} \hat{H}_-(\mathbf{k}_{\parallel})]. \quad (46)$$

ここで連続体モデルにおけるトポロジカル不変量の厳密な定義に従えば、式 (46) の積分区間は $-\infty \leq k_x \leq \infty$ である。また、 $\hat{H}_-(k_x = \infty) = \hat{H}_-(k_x = -\infty)$ を満たすように、 $k_x = \pm\infty$ で $\tilde{\Delta} \rightarrow 0$ とする必要がある [98]。しかし、今回の場合には特にこれらの取り扱いをすることなく巻き付き数を計算すること出来る。結果、巻き付き数として

$$w(k_y) = \frac{1}{2} \sum_{\varepsilon(\mathbf{k}_{\parallel})=V} \text{sgn}[\tilde{\Delta}k_x] \text{sgn}[\partial_{k_x} \varepsilon(\mathbf{k}_{\parallel})], \quad (47)$$

を得る。ここで $\sum_{\varepsilon(\mathbf{k}_{\parallel})=V}$ は y 軸方向の波数が k_y のときに $\varepsilon(\mathbf{k}_{\parallel}) = V$ を満たすような k_x についての和である。最終的に I 相については

$$w(k_y) = \begin{cases} +1 & \text{for } |k_y| < \tilde{k}_F \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (48)$$

II 相については

$$w(k_y) = \begin{cases} -1 & \text{for } |k_y| < \tilde{k}_F \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (49)$$

となる。

参考文献

- [1] M. A. U. Absor and F. Ishii. Doping-induced persistent spin helix with a large spin splitting in monolayer s₂se. *Physical Review B*, 99(7):075136, 2019.
- [2] M. A. U. Absor and F. Ishii. Intrinsic persistent spin helix state in two-dimensional group-iv monochalcogenide m_x monolayers (m= sn or ge and x= s, se, or te). *Physical Review B*, 100(11):115104, 2019.
- [3] H. Ai, X. Ma, X. Shao, W. Li, and M. Zhao. Reversible out-of-plane spin texture in a two-dimensional ferroelectric material for persistent spin helix. *Physical Review Materials*, 3(5):054407, 2019.
- [4] M. N. Ali, Q. Gibson, S. Jeon, B. B. Zhou, A. Yazdani, and R. J. Cava. The crystal and electronic structures of cd₃as₂, the three-dimensional electronic analogue of graphene. *Inorganic chemistry*, 53(8):4062–4067, 2014.
- [5] J. Alicea. Majorana fermions in a tunable semiconductor device. *Physical Review B*, 81(12):125318, 2010.
- [6] T. Ando. Quantum point contacts in magnetic fields. *Physical Review B*, 44(15):8017, 1991.
- [7] A. Andreev. The thermal conductivity of the intermediate state in superconductors. *Журнал экспериментальной и теоретической физики*, 46(5):1823–1828, 1964.
- [8] Y. Araki. Strain-induced nonlinear spin hall effect in topological dirac semimetal. *Scientific reports*, 8(1):1–7, 2018.
- [9] Y. Asano, Y. Tanaka, A. A. Golubov, and S. Kashiwaya. Conductance spectroscopy of spin-triplet superconductors. *Physical review letters*, 99(6):067005, 2007.
- [10] Y. Asano, Y. Tanaka, and S. Kashiwaya. Phenomenological theory of zero-energy andreev resonant states. *Physical Review B*, 69(13):134501, 2004.
- [11] Y. Asano, Y. Tanaka, and S. Kashiwaya. Anomalous josephson effect in p-wave dirty junctions. *Physical review letters*, 96(9):097007, 2006.
- [12] Y. Asano, Y. Tanaka, T. Yokoyama, and S. Kashiwaya. Josephson current through superconductor/diffusive-normal-metal/superconductor junctions: interference effects governed by pairing symmetry. *Physical Review B*, 74(6):064507, 2006.
- [13] C. R. Ast, J. Henk, A. Ernst, L. Moreschini, M. C. Falub, D. Pacilé, P. Bruno, K. Kern, and M. Grioni. Giant spin splitting through surface alloying. *Phys. Rev. Lett.*, 98(18):186807, 2007.
- [14] C. R. Ast, D. Pacilé, L. Moreschini, M. C. Falub, M. Papagno, K. Kern, M. Grioni, J. Henk, A. Ernst, S. Ostanin, et al. Spin-orbit split two-dimensional electron gas with tunable rashba and fermi energy. *Physical Review B*, 77(8):081407, 2008.
- [15] C. Autieri, P. Barone, J. Sławińska, and S. Picozzi. Persistent spin helix in rashba-dresselhaus ferroelectric csbinb 2 o 7. *Physical Review Materials*, 3(8):084416, 2019.
- [16] Y. S. Barash, H. Burkhardt, and D. Rainer. Low-temperature anomaly in the josephson critical current of junctions in d-wave superconductors. *Physical review letters*, 77(19):4070, 1996.

-
- [17] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Physical review*, 108(5):1175, 1957.
- [18] S. Barraza-Lopez, B. M. Fregoso, J. W. Villanova, S. S. Parkin, and K. Chang. Colloquium: Physical properties of group-iv monochalcogenide monolayers. *Reviews of Modern Physics*, 93(1):011001, 2021.
- [19] S. Barraza-Lopez, T. P. Kaloni, S. P. Poudel, and P. Kumar. Tuning the ferroelectric-to-paraelectric transition temperature and dipole orientation of group-iv monochalcogenide monolayers. *Physical Review B*, 97(2):024110, 2018.
- [20] D. Bercioux and P. Lucignano. Quantum transport in Rashba spinorbit materials: a review. *Rep. Prog. Phys*, 78, 2015.
- [21] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *science*, 314(5806):1757–1761, 2006.
- [22] B. A. Bernevig, J. Orenstein, and S.-C. Zhang. Exact su (2) symmetry and persistent spin helix in a spin-orbit coupled system. *Physical review letters*, 97(23):236601, 2006.
- [23] C. Bruder. Andreev scattering in anisotropic superconductors. *Physical review B*, 41(7):4017, 1990.
- [24] L. Buchholtz and G. Zwicknagl. Identification of p-wave superconductors. *Physical Review B*, 23(11):5788, 1981.
- [25] A. A. Burkov and Y. B. Kim. Z₂ and chiral anomalies in topological dirac semimetals. *Physical review letters*, 117(13):136602, 2016.
- [26] J. Cayao, E. Prada, P. San-Jose, and R. Aguado. Sns junctions in nanowires with spin-orbit coupling: Role of confinement and helicity on the subgap spectrum. *Physical Review B*, 91(2):024514, 2015.
- [27] H. Cercellier, C. Didiot, Y. Fagot-Revurat, B. Kierren, L. Moreau, D. Malterre, and F. Reinert. Interplay between structural, chemical, and spectroscopic properties of ag/ au (111) epitaxial ultrathin films: A way to tune the rashba coupling. *Physical Review B*, 73(19):195413, 2006.
- [28] S. Charpentier, L. Galletti, G. Kunakova, R. Arpaia, Y. Song, R. Baghdadi, S. M. Wang, A. Kalaboukhov, E. Olsson, F. Tafuri, et al. Induced unconventional superconductivity on the surface states of bi₂te₃ topological insulator. *Nature communications*, 8(1):1–8, 2017.
- [29] Y. Chen, S. Fält, W. Wegscheider, and G. Salis. Unidirectional spin-orbit interaction and spin-helix state in a (110)-oriented gaas/(al, ga) as quantum well. *Physical Review B*, 90(12):121304, 2014.
- [30] S. Cho, B. Dellabetta, A. Yang, J. Schneeloch, Z. Xu, T. Valla, G. Gu, M. J. Gilbert, and N. Mason. Symmetry protected josephson supercurrents in three-dimensional topological insulators. *Nature communications*, 4(1):1–6, 2013.
- [31] S. Datta and B. Das. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Appl. Phys. Lett.*, 56(7):665–667, 1990.
- [32] P. de Gennes. Boundary effects in superconductors. *Reviews of Modern Physics*, 36(1):225, 1964.
- [33] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 117(778):610–624, 1928.
- [34] S. Döhrmann, D. Hägele, J. Rudolph, M. Bichler, D. Schuh, and M. Oestreich. Anomalous spin dephasing in (110) gaas quantum wells: Anisotropy and intersubband effects. *Physical review letters*, 93(14):147405, 2004.
- [35] G. Dresselhaus. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. *Phys. Rev.*, 100:580–586, Oct 1955.
- [36] M. Dyakonov and V. Perel. Spin relaxation of conduction electrons in noncentrosymmetric semiconductors. *Soviet Physics Solid State, Ussr*, 13(12):3023–3026, 1972.

- [37] R. Fei, W. Kang, and L. Yang. Ferroelectricity and phase transitions in monolayer group-iv monochalcogenides. *Physical review letters*, 117(9):097601, 2016.
- [38] L. Fu and C. L. Kane. Superconducting proximity effect and majorana fermions at the surface of a topological insulator. *Physical review letters*, 100(9):096407, 2008.
- [39] T. Fukumoto, K. Taguchi, S. Kobayashi, and Y. Tanaka. Theory of tunneling conductance of anomalous rashba metal/superconductor junctions. *Physical Review B*, 92(14):144514, 2015.
- [40] A. Furusaki, M. Matsumoto, and M. Sigrist. Spontaneous hall effect in a chiral p-wave superconductor. *Physical Review B*, 64(5):054514, 2001.
- [41] L. Galletti, S. Charpentier, M. Iavarone, P. Lucignano, D. Massarotti, R. Arpaia, Y. Suzuki, K. Kadowaki, T. Bauch, A. Tagliacozzo, et al. Influence of topological edge states on the properties of al/bi 2 se 3/al hybrid josephson devices. *Physical Review B*, 89(13):134512, 2014.
- [42] W. Gordon. The compton effect according to schrödinger' s theory. *Z. Phys*, 40:117–133, 1926.
- [43] P. Goswami and S. Tewari. Axionic field theory of (3+ 1)-dimensional weyl semimetals. *Physical Review B*, 88(24):245107, 2013.
- [44] G. Guo, Y. Yao, and Q. Niu. Ab initio calculation of the intrinsic spin hall effect in semiconductors. *Physical review letters*, 94(22):226601, 2005.
- [45] G.-Y. Guo, S. Murakami, T.-W. Chen, and N. Nagaosa. Intrinsic spin hall effect in platinum: First-principles calculations. *Physical review letters*, 100(9):096401, 2008.
- [46] J. Hara and K. Nagai. A polar state in a slab as a soluble model of p-wave fermi superfluid in finite geometry. *Progress of theoretical physics*, 76(6):1237–1249, 1986.
- [47] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium: topological insulators. *Reviews of modern physics*, 82(4):3045, 2010.
- [48] T. Hashimoto, S. Kobayashi, Y. Tanaka, and M. Sato. Superconductivity in doped dirac semimetals. *Physical Review B*, 94(1):014510, 2016.
- [49] L. He, X. Hong, J. Dong, J. Pan, Z. Zhang, J. Zhang, and S. Li. Quantum transport evidence for the three-dimensional dirac semimetal phase in cd 3 as 2. *Physical review letters*, 113(24):246402, 2014.
- [50] M. Hell, M. Leijnse, and K. Flensberg. Two-dimensional platform for networks of majorana bound states. *Physical review letters*, 118(10):107701, 2017.
- [51] S. Higashitani. Mechanism of paramagnetic meissner effect in high-temperature superconductors. *Journal of the Physical Society of Japan*, 66(9):2556–2559, 1997.
- [52] J. Hirsch. Spin hall effect. *Physical review letters*, 83(9):1834, 1999.
- [53] Y. S. Hor, A. J. Williams, J. G. Checkelsky, P. Roushan, J. Seo, Q. Xu, H. W. Zandbergen, A. Yazdani, N. P. Ong, and R. J. Cava. Superconductivity in cu x bi 2 se 3 and its implications for pairing in the undoped topological insulator. *Physical review letters*, 104(5):057001, 2010.
- [54] C.-R. Hu. Midgap surface states as a novel signature for $d_{xa}^2-x_b^2$ -wave superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, 72:1526–1529, Mar 1994.
- [55] T. Hyart, A. R. Wright, and B. Rosenow. Zeeman-field-induced topological phase transitions in triplet superconductors. *Phys. Rev. B*, 90:064507, Aug 2014.
- [56] S. Ikegaya, Y. Asano, and Y. Tanaka. Anomalous proximity effect and theoretical design for its realization. *Phys. Rev. B*, 91:174511, May 2015.
- [57] S. Ikegaya, S. Kobayashi, and Y. Asano. Symmetry conditions of a nodal superconductor for generating robust flat-band andreev bound states at its dirty surface. *Phys. Rev. B*, 97:174501, May 2018.

-
- [58] S. Ikegaya, J. Lee, A. P. Schnyder, and Y. Asano. Strong anomalous proximity effect from spin-singlet superconductors. *Phys. Rev. B*, 104:L020502, Jul 2021.
- [59] S. Ikegaya, S.-I. Suzuki, Y. Tanaka, and Y. Asano. Quantization of conductance minimum and index theorem. *Phys. Rev. B*, 94:054512, Aug 2016.
- [60] K. Ishizaka, M. Bahramy, H. Murakawa, M. Sakano, T. Shimojima, T. Sonobe, K. Koizumi, S. Shin, H. Miyahara, A. Kimura, K. Miyamoto, T. Okuda, H. Namatame, M. Taniguchi, R. Arita, N. Nagaosa, K. Kobayashi, Y. Murakami, R. Kumai, Y. Kaneko, Y. Onose, and Y. Tokura. Giant rashba-type spin splitting in bulk bitei. *Nat. Mater.*, 10(7):521–526, 2011.
- [61] A. Jantayod and P. Pairor. Charge and spin transport across two-dimensional non-centrosymmetric semiconductor/metal interface. *Phys. E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 48:111–117, 2013.
- [62] D. Jerome, A. Mazaud, M. Ribault, and K. Bechgaard. Superconductivity in a synthetic organic conductor (tmsf)₂pf₆. <http://dx.doi.org/10.1051/jphyslet:0198000410409500>, 41, 01 1980.
- [63] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical review letters*, 95(22):226801, 2005.
- [64] C. L. Kane and E. J. Mele. Z₂ topological order and the quantum spin hall effect. *Physical review letters*, 95(14):146802, 2005.
- [65] S. Kashiwaya, Y. Tanaka, M. Koyanagi, and K. Kajimura. Theory for tunneling spectroscopy of anisotropic superconductors. *Phys. Rev. B*, 53:2667–2676, Feb 1996.
- [66] O. Klein. Electrodynamics and wave mechanics from the standpoint of the correspondence principle. *Z Phys*, 41:407–442, 1927.
- [67] S. Kobayashi and M. Sato. Topological superconductivity in dirac semimetals. *Phys. Rev. Lett.*, 115:187001, Oct 2015.
- [68] M. Kohda, V. Lechner, Y. Kunihashi, T. Dollinger, P. Olbrich, C. Schönhuber, I. Caspers, V. Bel'kov, L. Golub, D. Weiss, et al. Gate-controlled persistent spin helix state in (in, ga) as quantum wells. *Physical Review B*, 86(8):081306, 2012.
- [69] M. Kohda and G. Salis. Physics and application of persistent spin helix state in semiconductor heterostructures. *Semiconductor Science and Technology*, 32(7):073002, 2017.
- [70] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318(5851):766–770, 2007.
- [71] J. D. Koralek, C. P. Weber, J. Orenstein, B. A. Bernevig, S.-C. Zhang, S. Mack, and D. Awschalom. Emergence of the persistent spin helix in semiconductor quantum wells. *Nature*, 458(7238):610, 2009.
- [72] Y. M. Koroteev, G. Bihlmayer, J. Gayone, E. Chulkov, S. Blügel, P. M. Echenique, and P. Hofmann. Strong spin-orbit splitting on bi surfaces. *Physical Review Letters*, 93(4):046403, 2004.
- [73] A. Larionov and L. Golub. Electric-field control of spin-orbit splittings in gaas/al x ga 1- x as coupled quantum wells. *Physical Review B*, 78(3):033302, 2008.
- [74] H. Lee, J. Im, and H. Jin. Emergence of the giant out-of-plane rashba effect and tunable nanoscale persistent spin helix in ferroelectric snte thin films. *Applied Physics Letters*, 116(2):022411, 2020.
- [75] P. A. Lee and D. S. Fisher. Anderson localization in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 47:882–885, Sep 1981.
- [76] T. Liang, Q. Gibson, M. Ali, M. Liu, R. Cava, and N. Ong. Ultrahigh mobility and giant magnetoresistance in the dirac semimetal cd₃as₂. *Nature materials*, 14:280–284, 11 2015.
- [77] M.-H. Liu, K.-W. Chen, S.-H. Chen, and C.-R. Chang. Persistent spin helix in rashba-dresselhaus two-

- dimensional electron systems. *Physical Review B*, 74(23):235322, 2006.
- [78] Z. Liu, J. Jiang, B. Zhou, Z. Wang, Y. Zhang, H. Weng, D. Prabhakaran, S.-K. Mo, H. Peng, P. Dudin, T. Kim, M. Hoesch, Z. Fang, X. Dai, Z. Shen, D. Feng, Z. Hussain, and Y. Chen. A stable three-dimensional topological dirac semimetal cd_3as_2 . *Nature materials*, 13, 05 2014.
- [79] Z. Liu, B. Zhou, Y. Zhang, Z. Wang, H. Weng, D. Prabhakaran, S.-K. Mo, Z. Shen, Z. Fang, X. Dai, Z. Hussain, and Y. Chen. Discovery of a three-dimensional topological dirac semimetal, na_3bi . *Science (New York, N.Y.)*, 343, 01 2014.
- [80] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. D. Sarma. Majorana fermions and a topological phase transition in semiconductor-superconductor heterostructures. *Physical review letters*, 105(7):077001, 2010.
- [81] S. Mathias, A. Ruffing, F. Deicke, M. Wiesenmayer, I. Sakar, G. Bihlmayer, E. Chulkov, Y. M. Koroteev, P. Echenique, M. Bauer, and M. Aeschlimann. Quantum-well-induced giant spin-orbit splitting. *Phys. Rev. Lett.*, 104(6):066802, 2010.
- [82] C. Molenaar, D. Leusink, X. Wang, and A. Brinkman. Geometric dependence of $\text{nb-bi}_2\text{te}_3\text{-nb}$ topological josephson junction transport parameters. *Superconductor Science and Technology*, 27, 08 2014.
- [83] L. W. Molenkamp, G. Schmidt, and G. E. Bauer. Rashba hamiltonian and electron transport. *Phys. Rev. B*, 64(12):121202, 2001.
- [84] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang. Dissipationless quantum spin current at room temperature. *Science (New York, N.Y.)*, 301:1348–51, 10 2003.
- [85] M. Neupane, S.-Y. Xu, R. Sankar, N. Alidoust, G. Bian, C. Liu, I. Belopolski, T.-R. Chang, H.-T. Jeng, H. Lin, et al. Observation of a three-dimensional topological dirac semimetal phase in high-mobility cd 3 as 2 . *Nature communications*, 5(1):1–8, 2014.
- [86] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki. Gate control of spin-orbit interaction in an inverted $\text{in}_{0.53}\text{ga}_{0.47}\text{as}/\text{in}_{0.52}\text{al}_{0.48}\text{as}$ heterostructure. *Phys. Rev. Lett.*, 78:1335–1338, Feb 1997.
- [87] Y. Ohno, R. Terauchi, T. Adachi, F. Matsukura, and H. Ohno. Spin relaxation in gaas (110) quantum wells. *Physical Review Letters*, 83(20):4196, 1999.
- [88] Y. Oreg, G. Refael, and F. Von Oppen. Helical liquids and majorana bound states in quantum wires. *Physical review letters*, 105(17):177002, 2010.
- [89] F. Pientka, A. Keselman, E. Berg, A. Yacoby, A. Stern, and B. I. Halperin. Topological superconductivity in a planar josephson junction. *Physical Review X*, 7(2):021032, 2017.
- [90] D. Popovic, F. Reinert, S. Hüfner, V. Grigoryan, M. Springborg, H. Cercellier, Y. Fagot-Revurat, B. Kierren, and D. Malterre. High-resolution photoemission on ag/au (111): Spin-orbit splitting and electronic localization of the surface state. *Physical Review B*, 72(4), 2005.
- [91] X.-L. Qi, T. L. Hughes, S. Raghu, and S.-C. Zhang. Time-reversal-invariant topological superconductors and superfluids in two and three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 102:187001, May 2009.
- [92] E. I. Rashba. Properties of semiconductors with an extremum loop. 1. cyclotron and combinational resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop. *Sov. Phys. Solid State*, 2(6):1109–1122, 1960.
- [93] N. Read and D. Green. Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum hall effect. *Phys. Rev. B*, 61:10267–10297, Apr 2000.
- [94] C. Reeg, D. Loss, and J. Klinovaja. Metallization of a rashba wire by a superconducting layer in the strong-proximity regime. *Phys. Rev. B*, 97:165425, Apr 2018.
- [95] C. Reeg and D. L. Maslov. Transport signatures of topological superconductivity in a proximity-coupled

-
- nanowire. *Phys. Rev. B*, 95:205439, May 2017.
- [96] V. A. Sablikov and Y. Y. Tkach. Evanescent states in two-dimensional electron systems with spin-orbit interaction and spin-dependent transmission through a barrier. *Phys. Rev. B*, 76:245321, Dec 2007.
- [97] B. Saccp, J. Oostinga, J. Li, A. Ubaldini, N. Couto, E. Giannini, and A. Morpurgo. Gate-tuned normal and superconducting transport at the surface of a topological insulator. *Nature communications*, 2:575, 12 2011.
- [98] M. Sato, Y. Tanaka, K. Yada, and T. Yokoyama. Topology of andreev bound states with flat dispersion. *Phys. Rev. B*, 83:224511, Jun 2011.
- [99] J. D. Sau, R. M. Lutchyn, S. Tewari, and S. D. Sarma. Generic new platform for topological quantum computation using semiconductor heterostructures. *Physical review letters*, 104(4):040502, 2010.
- [100] J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss. Nonballistic spin-field-effect transistor. *Physical review letters*, 90(14):146801, 2003.
- [101] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. Ludwig. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. *Physical Review B*, 78(19):195125, 2008.
- [102] K. Sengupta, I. Žutić, H.-J. Kwon, V. M. Yakovenko, and S. Das Sarma. Midgap edge states and pairing symmetry of quasi-one-dimensional organic superconductors. *Phys. Rev. B*, 63:144531, Mar 2001.
- [103] K. Sengupta, R. Roy, and M. Maiti. Spin hall effect in triplet chiral superconductors and graphene. *Phys. Rev. B*, 74:094505, Sep 2006.
- [104] M. Sigrist and K. Ueda. Phenomenological theory of unconventional superconductivity. *Rev. Mod. Phys.*, 63:239–311, Apr 1991.
- [105] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald. Universal intrinsic spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 92:126603, Mar 2004.
- [106] J. Sinova, S. O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back, and T. Jungwirth. Spin hall effects. *Rev. Mod. Phys.*, 87:1213–1260, Oct 2015.
- [107] J. Ślawińska, F. T. Cerasoli, P. Gopal, M. Costa, S. Curtarolo, and M. B. Nardelli. Ultrathin snte films as a route towards all-in-one spintronics devices. *2D Materials*, 7(2):025026, 2020.
- [108] I. Sochnikov, L. Maier, C. A. Watson, J. R. Kirtley, C. Gould, G. Tkachov, E. M. Hankiewicz, C. Brüne, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, and K. A. Moler. Nonsinusoidal current-phase relationship in josephson junctions from the 3d topological insulator hgte. *Phys. Rev. Lett.*, 114:066801, Feb 2015.
- [109] B. Srisongmuang, P. Pairor, and M. Berciu. Tunneling conductance of a two-dimensional electron gas with rashba spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B*, 78(15):155317, 2008.
- [110] G. Stewart, Z. Fisk, J. Willis, and J. Smith. Possibility of coexistence of bulk superconductivity and spin fluctuations in upt 3. In *Ten Years of Superconductivity: 1980–1990*, pages 85–88. Springer, 1984.
- [111] P. Středa and P. Šeba. Antisymmetric spin filtering in one-dimensional electron systems with uniform spin-orbit coupling. *Phys. Rev. Lett.*, 90(25):256601, 2003.
- [112] M. Studer, G. Salis, K. Ensslin, D. Driscoll, and A. Gossard. Gate-controlled spin-orbit interaction in a parabolic gaas/algaas quantum well. *Physical review letters*, 103(2):027201, 2009.
- [113] S.-I. Suzuki and Y. Asano. Paramagnetic instability of small topological superconductors. *Phys. Rev. B*, 89:184508, May 2014.
- [114] S.-I. Suzuki and Y. Asano. Effects of surface roughness on the paramagnetic response of small unconventional superconductors. *Phys. Rev. B*, 91:214510, Jun 2015.
- [115] T. Tanaka, H. Kontani, M. Naito, T. Naito, D. S. Hirashima, K. Yamada, and J. Inoue. Intrinsic spin hall

- effect and orbital hall effect in $4d$ and $5d$ transition metals. *Phys. Rev. B*, 77:165117, Apr 2008.
- [116] Y. Tanaka and S. Kashiwaya. Theory of tunneling spectroscopy of d -wave superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 74:3451–3454, Apr 1995.
- [117] Y. Tanaka and S. Kashiwaya. Theory of the josephson effect in d -wave superconductors. *Physical review. B, Condensed matter*, 53:R11957–R11960, 06 1996.
- [118] Y. Tanaka and S. Kashiwaya. Anomalous charge transport in triplet superconductor junctions. *Phys. Rev. B*, 70:012507, Jul 2004.
- [119] Y. Tanaka, S. Kashiwaya, and T. Yokoyama. Theory of enhanced proximity effect by midgap andreev resonant state in diffusive normal-metal/triplet superconductor junctions. *Phys. Rev. B*, 71:094513, Mar 2005.
- [120] Y. Tanaka, M. Sato, and N. Nagaosa. Symmetry and topology in superconductors—odd-frequency pairing and edge states—. *Journal of the Physical Society of Japan*, 81(1):011013, 2011.
- [121] Y. Tanaka, T. Yokoyama, A. V. Balatsky, and N. Nagaosa. Theory of topological spin current in noncentrosymmetric superconductors. *Phys. Rev. B*, 79:060505, Feb 2009.
- [122] Y. Tanuma, K. Kuroki, Y. Tanaka, and S. Kashiwaya. Theoretical study of quasiparticle states near the surface of a quasi-one-dimensional organic superconductor $(\text{TMTSF})_2\text{pf}_6$. *Phys. Rev. B*, 64:214510, Nov 2001.
- [123] L. Tao and E. Y. Tsymbal. Persistent spin texture enforced by symmetry. *Nature communications*, 9(1):1–7, 2018.
- [124] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Physical review letters*, 49(6):405, 1982.
- [125] H. Tou, Y. Kitaoka, K. Asayama, N. Kimura, Y. Ōnuki, E. Yamamoto, and K. Maezawa. Odd-parity superconductivity with parallel spin pairing in Upt 3 : evidence from 195 pt knight shift study. *Physical review letters*, 77(7):1374, 1996.
- [126] M. Uchida, Y. Nakazawa, S. Nishihaya, K. Akiba, M. Kriener, Y. Kozuka, A. Miyake, Y. Taguchi, M. Tokunaga, N. Nagaosa, Y. Tokura, and M. Kawasaki. Quantum Hall states observed in thin films of Dirac semimetal Cd_3As_2 . *Nature Communication*, 8(1):2274, 2017.
- [127] M. M. Vazifeh and M. Franz. Electromagnetic response of weyl semimetals. *Phys. Rev. Lett.*, 111:027201, Jul 2013.
- [128] G. Volovik. On edge states in superconductor with time inversion symmetry breaking. *JETP Letters*, 66:522–527, 10 1997.
- [129] K. Von Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. Realization of a resistance standard based on fundamental constants. *Phys. Rev. Lett*, 45:494, 1980.
- [130] M. Walser, C. Reichl, W. Wegscheider, and G. Salis. Direct mapping of the formation of a persistent spin helix. *Nature Physics*, 8(10):757, 2012.
- [131] Z. Wang, Y. Sun, X.-Q. Chen, C. Franchini, G. Xu, H. Weng, X. Dai, and Z. Fang. Dirac semimetal and topological phase transitions in A_3bi ($a = \text{Na, k, rb}$). *Phys. Rev. B*, 85:195320, May 2012.
- [132] Z. Wang, H. Weng, Q. Wu, X. Dai, and Z. Fang. Three-dimensional dirac semimetal and quantum transport in cd_3as_2 . *Phys. Rev. B*, 88:125427, Sep 2013.
- [133] J. R. Williams, A. J. Bestwick, P. Gallagher, S. S. Hong, Y. Cui, A. S. Bleich, J. G. Analytis, I. R. Fisher, and D. Goldhaber-Gordon. Unconventional josephson effect in hybrid superconductor-topological insulator devices. *Phys. Rev. Lett.*, 109:056803, Jul 2012.

-
- [134] C. L. Wong, J. Liu, K. T. Law, and P. A. Lee. Majorana flat bands and unidirectional majorana edge states in gapless topological superconductors. *Physical Review B*, 88(6):060504, 2013.
- [135] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H.-H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. Hor, R. Cava, and M. Z. Hasan. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single dirac cone on the surface. *Nature Physics*, 5:398–402, 05 2009.
- [136] B.-J. Yang and N. Nagaosa. Classification of stable three-dimensional dirac semimetals with nontrivial topology. *Nature Communication*, 5:4898, 2014.
- [137] R. Yano, H. T. Hirose, K. Tsumura, S. Yamamoto, M. Koyanagi, M. Kanou, H. Kashiwaya, T. Sasagawa, and S. Kashiwaya. Proximity-induced superconducting states of magnetically doped 3d topological insulators with high bulk insulation. *Condensed Matter*, 4(1), 2019.
- [138] R. Yano, M. Koyanagi, H. Kashiwaya, K. Tsumura, H. T. Hirose, Y. Asano, T. Sasagawa, and S. Kashiwaya. Unusual superconducting proximity effect in magnetically doped topological josephson junctions. *Journal of the Physical Society of Japan*, 89(3):034702, 2020.
- [139] J. You, C. H. Oh, and V. Vedral. Majorana fermions in s -wave noncentrosymmetric superconductor with dresselhaus (110) spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B*, 87:054501, Feb 2013.
- [140] S. M. Young, S. Zaheer, J. C. Teo, C. L. Kane, E. J. Mele, and A. M. Rappe. Dirac semimetal in three dimensions. *Physical review letters*, 108(14):140405, 2012.
- [141] S. Zhang. Spin hall effect in the presence of spin diffusion. *Phys. Rev. Lett.*, 85:393–396, Jul 2000.
- [142] U. Zülicke and C. Schroll. Interface conductance of ballistic ferromagnetic-metal-2deg hybrid systems with rashba spin-orbit coupling. *Phys. Rev. Lett.*, 88(2):029701, 2001.
- [143] 上田和夫、大貫惇睦. 重い電子系の物理. 裳華房, 1998.
- [144] 井上順一郎、伊藤博介. スピントロニクス-基礎編-. 共立出版株式会社, 2010.
- [145] 安藤陽一. トポロジカル絶縁体入門. 株式会社 講談社, 2014.
- [146] 家泰弘. 朝倉物性物理シリーズ 5 超伝導. 株式会社朝倉書店, 2005.
- [147] 日笠健一. ディラック方程式相対論的量子力学と量子場理論. 株式会社 サイエンス社, 2014.
- [148] 田仲由喜夫. 超伝導接合の物理. 名古屋大学出版会, 2021.
- [149] 野村健太郎. 現代理論物理学シリーズ 6 トポロジカル絶縁体・超伝導体. 丸善出版株式会社, 2016.