

名古屋大学 博士論文

結晶対称性に保護されたマヨラナ準粒子の
電気応答とスピン流の理論

令和5年 2月

理学研究科
物性理論研究室 量子輸送理論グループ (St)
学籍番号 462002085
山崎 勇樹

要 旨

トポロジカル物質はバルク電子の幾何学的性質（トポロジー）によって特徴付けられ、その表面に非自明な状態をもつ。その一種であるトポロジカル超伝導体は、通常の超伝導体とは異なり、表面にギャップレスかつ電荷中性の素励起をもつ。これは素粒子である質量が零のマヨラナ粒子と等価な性質をもつため、マヨラナ準粒子と呼ばれている。この状態を用いた安定な量子計算が提案されており、応用の観点からも興味を集めている。

しかしながら、トポロジカル超伝導体表面におけるマヨラナ準粒子を観測できたかどうかについては多くの議論があり、未だ確たる証拠は得られていない。電荷中性のマヨラナ粒子を、外部電磁場により検出・制御することは困難である。一方で、物質中に現れるマヨラナ準粒子は真空中のマヨラナ粒子と比べ、より低い対称性による制約しか受けないため、真空中にはなかった電磁応答が可能となる。マヨラナ準粒子が外場に対してどのように応答するかは基礎学理・実用性の双方から見て、理論的に解明すべき課題である。

この問題に関して、先行研究では、時間反転対称性があるトポロジカル超伝導体（表面マヨラナ準粒子がクラマース対をなす）において、2対のマヨラナクラマース対が、超伝導ギャップの対称性・結晶対称性に依存して、電氣的な外場に対して応答可能なことを示した。しかし、これらの対称性と電気応答との関係は明らかでなく、系統的な理解は得られていない。

そこで私は、結晶対称性に保護されたマヨラナ準粒子の電氣的な外場に対する応答を理論的に解析した。その結果、2対のマヨラナクラマース対が示す電気応答を全ての文様群に対して明らかにした。特に、2対のマヨラナクラマース対と結合する歪みテンソルと結晶対称性・超伝導対称性との関係を系統的に示した。さらに、具体的なモデルとしてアンチペロブスカイト超伝導 Sr_3SnO を考え、その表面に現れる2対のマヨラナクラマース対が結晶歪みによってギャップを開くことを示した。次に私は、得られた一般論を動的な外場へ拡張することで、マヨラナ準粒子のスピン輸送を議論した。具体的には、時間反転不変なアンチペロブスカイト超伝導 Sr_3SnO の (001) 面において、動的格子歪みによって2対のマヨラナクラマース対がスピン流を生じることを明らかにした。2対のマヨラナクラマース対が線形分散をもち、そのフェルミエネルギーが厳密にゼロであることから、緩和時間に依存しないスピン流が生成される。また、磁化によってマヨラナ準粒子にギャップが開いた状況では、スピン流はバンド構造を反映した特徴的な振動数依存性（ピークや跳び）をもつことも明らかにした。

これらの結果は対称性の議論によって導いた系の詳細（パラメーター等）に依らない普遍的な現象であり、電氣的な手法によるマヨラナ準粒子の観測や操作・輸送のための理論提案や新しい物理現象の予言を可能とする。

目次

第 1 章 序論	5
1.1 真空中におけるマヨラナ粒子の電磁気応答	5
1.2 トポジカル超伝導体とマヨラナ準粒子	6
1.2.1 トポジカル超伝導体に現れるマヨラナ準粒子の検出	6
1.2.2 マヨラナ準粒子と結晶対称性・超伝導対称性との関係	6
1.3 本論文の意義と目的	7
1.4 本論文の構成	7
第 2 章 マヨラナ準粒子の電気応答	8
2.1 導入	8
2.2 超伝導状態における内部・結晶対称性と超伝導対称性の関係	9
2.3 2 対のマヨラナクラマース対に対するトポジカル不変量	10
2.3.1 バルクで定義されるトポジカル不変量	10
2.3.2 表面の有効理論とトポジカル不変量	12
2.4 マヨラナ電気多極子の分類理論	14
2.5 全ての文様群に対するマヨラナ電気多極子の分類	16
2.6 アンチペロブスカイト超伝導 Sr_3SnO への適用	20
2.6.1 アンチペロブスカイト	20
2.6.2 具体的なモデルハミルトニアン	20
2.6.3 数値計算	23
2.7 結論	23
第 3 章 マヨラナ準粒子の動的格子歪みに対するスピン流応答	26
3.1 導入	26
3.2 アンチペロブスカイト表面の有効モデルの構成	28
3.2.1 対称操作	28
3.2.2 ハミルトニアン	29
3.2.3 スピン	31
3.3 動的格子歪みによって誘起されるスピン流	31
3.3.1 スピン流	32
3.3.2 動的歪みに対するスピン流応答	32
3.4 応答関数の具体的な計算	34
3.4.1 $M_z = 0$ のとき	34
3.4.2 $M_z \neq 0$ のとき	36
3.5 結論	43

第 4 章	まとめ	45
付 録 A	マヨラナ準粒子の有効モデル	46
付 録 B	マヨラナ多極子の分類例	48
	B.0.1 $p4$	48
	B.0.2 $p31m$	51
	B.0.3 $p4m$	55
	B.0.4 $p6m$	57
	B.0.5 pg	59
	B.0.6 pmg	60
付 録 C	$\omega \rightarrow \infty$ で $\text{Re}[K_2]$ が定数になる理由	63
付 録 D	バルクと表面におけるスピン流演算子の関係	64

第1章 序論

1.1 真空中におけるマヨラナ粒子の電磁気応答

マヨラナ粒子は1937年にエッソーレ・マヨラナによってその存在を予言された、粒子と反粒子が同一の粒子である [1]。具体的には、ディラック方程式の解のうち実数解がマヨラナ粒子となる。これを見るために、ディラック方程式

$$[i\gamma_M^\mu \partial_\mu - m] \psi = 0 \quad (1.1.1)$$

を考える。ここで、 γ_M^μ ($\mu = 0, 1, \dots, 3$) はマヨラナ表示のガンマ行列であり、

$$\gamma_M^0 = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{bmatrix}, \quad \gamma_M^1 = \begin{bmatrix} i\sigma_3 & 0 \\ 0 & i\sigma_3 \end{bmatrix}, \quad \gamma_M^2 = \begin{bmatrix} 0 & -\sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{bmatrix}, \quad \gamma_M^3 = \begin{bmatrix} i\sigma_1 & 0 \\ 0 & -i\sigma_1 \end{bmatrix} \quad (1.1.2)$$

で与えられる (σ_i はパウリ行列を表す)。このとき行列の成分が全て純虚数であるため、(1.1.1) 式の括弧の中は実数であり、解として実数解が存在しうることが分かる。この表示での荷電共役行列は $C \equiv -\gamma_M^0$ で与えられるため、 ψ の荷電共役変換を

$$\psi^C \equiv C\bar{\psi}^T \quad (1.1.3)$$

で定義したとき ($\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_M^0$)、マヨラナ条件 (粒子 = 反粒子) は

$$\psi = \psi^C = \psi^* \quad (1.1.4)$$

となる。したがって ψ が実数であるならば、マヨラナ条件を満足していることが分かる。このようにマヨラナ粒子は、元々のディラック方程式に存在していた粒子と反粒子という2つの自由度が消失する (粒子と反粒子が同一の) ため、電荷をもたない粒子でなければならない。

一般に、相対論に従うスピン1/2 フェルミオンの電磁カレント (の行列要素) は

$$i\bar{u}(\mathbf{p}_f) [F\gamma_\mu + M\sigma_{\mu\nu}q_\nu + iE\sigma_{\mu\nu}q_\nu\gamma_5 + G(q^2\gamma_\mu - \not{A}q_\mu)\gamma_5] u(\mathbf{p}_i), \quad q = p_f - p_i \quad (1.1.5)$$

で与えられる [2, 3]。ここで $u(\mathbf{p}_i)$ はディラックスピノルであり、 F, M, E, G はそれぞれ形状因子と呼ばれる量である。第1項目は電荷、第2項目は磁気双極子モーメント、第3項目は電気双極子モーメント、第4項目がトロイダルモーメントに相当する項である。フェルミオンとしてマヨラナ粒子を考えれば、**CPT 対称性** (P は空間反転、 T は時間反転を表す) の存在により、上式は CPT 変換の下で自己共役性をもつため、

$$i\bar{u}_M(\mathbf{p}_f) [0 + 0 + 0 + G(q^2\gamma_\mu - \not{A}q_\mu)\gamma_5] u_M(\mathbf{p}_i) \quad (1.1.6)$$

となる [2-6]。したがって、マヨラナ粒子は電荷だけでなく、トロイダルモーメント以外の電磁気的自由度をもたない。しかしながら、仮にもっと対称性が低い (すなわち P や T 対称性が存在し

ない)系にマヨラナ粒子が現れるとすれば、それは何らかの(トロイダルモーメント以外の)電磁気的自由度をもちうると予想できる。実は後ほど見るように、**トポロジカル超伝導体**表面に準粒子状態として創発するマヨラナ準粒子がその例であり、真空中に比べ豊かな性質を示しうる。

1.2 トポロジカル超伝導体とマヨラナ準粒子

近年、数学におけるトポロジーの概念と物理学を結び付けたトポロジカル物理と呼ばれる分野が注目を浴びている。この分野において代表的なものはトポロジカル絶縁体と呼ばれる物質で、バルクは絶縁体であるにも関わらず、その表面は金属的であるという性質をもつ。このようにトポロジカルな性質をもつ物質はその表面に非自明な電子状態をもつ。最近では、超伝導体においてもトポロジーの概念が適用され、その表面においてはギャップレスな電荷中性のマヨラナ準粒子が創発されることが明らかになった [7-11]。このような超伝導体は特にトポロジカル超伝導体と呼ばれている。表面に束縛されたマヨラナ準粒子は、電磁気的性質以外にも、非可換統計性に従うなどの興味深い性質を持ち、工学的にも安定な量子計算への応用が期待されている [12-14]。

1.2.1 トポロジカル超伝導体に現れるマヨラナ準粒子の検出

これまでトポロジカル超伝導体に現れるマヨラナ準粒子の検出に向けた実験が数多く行われてきた。トポロジカル超伝導を実現する上で様々な戦略が取られており、例えば、*s*波超伝導体の上にスピン軌道相互作用の強い半導体ナノワイヤーを接合した系で、磁場中においてトポロジカル超伝導が実現することが理論的に提案され [15, 16]、実験的にも確かめられた [17-20]。他にも同様に、*s*波超伝導体の上に磁性元素を1次元的に並べた系 [21] やトポロジカル絶縁体と *s*波超伝導体の接合系 [22, 23]、量子異常ホール系と *s*波超伝導体の接合系 [24] においてもマヨラナ準粒子由来とみられるコンダクタンスのピークが観測された。ここで述べた系は人工的にトポロジカル超伝導体を実現させた例である。その一方で、トポロジカル超伝導状態を示す単一の超伝導体も実験的に確認されており、 $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ [25]、 $\text{FeTe}_{0.55}\text{Se}_{0.45}$ [26]、 $\beta\text{-Bi}_2\text{Pd}$ [27]、 $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ [28] 等が挙げられる。これらの系においてもマヨラナ準粒子由来とみられるゼロバイアスピークが観測された。しかしながら、これらの実験において本当にマヨラナ準粒子を観測できたかどうかについては多くの議論があり、未だ確たる証拠は得られていない [29, 30]。電荷中性のマヨラナ粒子を、外部電磁場により検出・制御することは困難である。一方で、物質中に現れるマヨラナ準粒子は真空中のマヨラナ粒子と異なり *CPT* 対称性をもたず、より低い対称性(離散的な結晶対称性)による制約しか受けなため、真空中にはなかった電磁応答が可能となる。マヨラナ準粒子が外場に対してどのように応答するかは基礎学理・実用性の両方の観点から見て、理論的に解明しなければならない課題である。その解決の糸口の1つとして、以下に述べる結晶対称性・超伝導対称性とマヨラナ準粒子との関係を用いた方法がある。

1.2.2 マヨラナ準粒子と結晶対称性・超伝導対称性との関係

トポロジカル超伝導体と通常の超伝導体との違いはバルクの電子状態にある。すなわち、バルク電子がもつ幾何学的な性質(トポロジカル不変量)が超伝導体のトポロジーを決定し、非自明なトポロジカル不変量をもつ超伝導体が、表面にマヨラナ準粒子をもつトポロジカル超伝導体となる。バルク電子がもつトポロジカル不変量を決定する上で重要となる要素は2つ存在する。1つは固体

物質に固有の対称性である結晶対称性、もう1つは超伝導体固有の秩序変数である超伝導ギャップ (の対称性) である。これら2つの要素が非自明なトポロジカル不変量、すなわち、マヨラナ準粒子を特徴づける。このように結晶対称性まで考慮したトポロジカル超伝導体は、特にトポロジカル結晶超伝導体と呼ばれている。これらの関係を明らかにすることは物質探索の上でも極めて重要である。例えばこれまで、鏡映対称性 [31,32], order-2 の対称性 [33], 非共形対称性 [34], 回転対称性 [35,36] を用いた分類がされてきた。また最近では、常伝導状態のバンド構造のみからトポロジカル超伝導か否かを判定する対称性指標を用いた方法も開発されている [37-41]。

1.3 本論文の意義と目的

トポロジカル超伝導 (超流動) 体表面のマヨラナ準粒子が異方的な磁気応答を示すことは以前から知られていたが [33,42-48], 先行研究 [49-53] によって結晶対称性・超伝導対称性との関係が一般的に明らかにされた。興味深いことに、磁気応答 (マヨラナ準粒子が形成する磁気多極子) の対称性と超伝導対称性は同じである。すなわち、磁気応答の観測によってトポロジカル超伝導体の超伝導対称性を同定することが可能となる。しかしながら、これまでの研究では磁気応答についてのみ研究がされており、また磁気応答の観測はマイスナー効果によって実験的な困難がある。その意味で、電気的な外部摂動に対する応答の観測はより実現可能性がある。この問題に関して、自身の先行研究では、時間反転対称性があるトポロジカル超伝導体 (表面マヨラナ準粒子がクラマース対をなす) において、2対のマヨラナクラマース対が、超伝導ギャップの対称性・結晶対称性に依存して、電気的な外場に対して応答可能なことを示した [51]。しかし、これらの対称性と電気応答との関係は明らかでなく、系統的な理解は得られていない。そこで本研究の目的は、結晶対称性に保護されたマヨラナ準粒子の電気応答と結晶対称性・超伝導対称性との関係を一般的に明らかにすることである。

1.4 本論文の構成

次章以降の構成は以下の通りである。第2章では、マヨラナ準粒子が形成する電気多極子と結晶対称性・超伝導対称性の関係を解明する。電気応答の具体例として、静的な格子歪みによってマヨラナ準粒子の分散にギャップが開くことを数値的に示す。第3章では、動的格子歪みに対するマヨラナ準粒子のスピンの流応答を明らかにする。これは前章で具体的に示した静的な外場に対する応答を、動的な外場に対する応答へと拡張させたものである。第4章では、これまでのまとめを述べる。

第2章 マヨラナ準粒子の電気応答

2.1 導入

マヨラナ粒子は、自身とその反粒子が同一である電荷中性の粒子である [1]. マヨラナ粒子はトポロジカル超伝導体の表面にアンドレーエフ束縛状態 (マヨラナ準粒子) として存在し, 超伝導ギャップが開いている限り極めて安定に存在する [7,9,11,54–57]. マヨラナ準粒子もトポロジカル超伝導体表面では電荷中性条件を満たし, さらに2次元平面に束縛されたマヨラナ準粒子は非可換統計性に従う. これらのユニークな性質から, マヨラナ準粒子を用いたフォールトトレラントな量子計算への応用が期待されている [12].

3次元トポロジカル超伝導体のトポロジカルな性質はそれ自身もつ対称性によって特徴づけられる. 例えば, 時間反転対称性は表面に現れるマヨラナ準粒子をクラマース対という形で保護し, それらは特にマヨラナクラマース対と呼ばれている. 超伝導状態がドーブされたトポロジカル絶縁体 [25,58–64] やディラック半金属 [65–70] が時間反転対称性をもつトポロジカル超伝導体の候補として挙げられている. 一方で固体物理では, 真空中ではなかった結晶の対称性が時間反転対称性に加えて存在する. 結晶対称性を考慮することで新しい種類のトポロジカル超伝導体を定義することができ, それらはトポロジカル結晶超伝導体と呼ばれている [31–36,71–73].

結晶対称性からトポロジカルに保護されたマヨラナ準粒子は豊かな磁気応答を示すことが明らかにされている [33,42–48]. 例えば, 結晶対称性に保護された1対のマヨラナクラマース対は磁気双極子 (イジングスピン) 応答や磁気八極子応答を示すことが示されており, それらは通常のスピン1/2 フェルミオンが示す応答とは質的に異なる [49–51,53]. 興味深いことに, これらの磁気多極子が属する既約表現はバルクの超伝導ペアポテンシャルが属する既約表現と同じである. すなわち, 磁気多極子の観測は1対のマヨラナクラマース対をもつトポロジカル結晶超伝導体の超伝導対称性を同定する, 新しい方向性を示している. しかしながら, これまでの研究では磁気応答についてのみ研究がされており, また磁気応答の観測はマイスナー効果によって実験的な困難がある. その意味で, 電氣的な外部摂動に対する応答の観測はより実現可能性がある.

我々は先行研究で, 結晶対称性に保護された2対のマヨラナクラマース対が電氣的な摂動に対して応答できることを明らかにした [51]. また電気応答は, マヨラナクラマース対が現れる表面の対称性が文様群のうち pgg と $p4g$ の時に, 各々の超伝導対称性に対して分類がされている [53]. つまり, 2対のマヨラナクラマース対が示す電気応答のいくつかの特徴はすでに明らかにされているが, 本研究がこれまでとは異なる, 電気応答の新たな可能性を提示する.

本研究では, 2対のマヨラナクラマース対が示す電気応答を全ての文様群に対して明らかにする. 2対のマヨラナクラマース対が形成する磁気多極子もバルクの超伝導対称性 (あるいは表面の文様群に対する既約表現) と関係がある. そのため電気応答もまた, 2対のマヨラナクラマース対をもつトポロジカル結晶超伝導体の超伝導対称性を決定しうる. 本研究では, 具体的なモデルとして3次元アンチペロブスカイト超伝導体を考え, その表面に現れる2対のマヨラナクラマース対が外部一様歪みによってギャップを開くことを示す. 我々の研究結果はトポロジカル結晶超伝導体表面の2対のマヨラナクラマース対を電氣的に操作できる可能性を示唆している.

2.2 超伝導状態における内部・結晶対称性と超伝導対称性の関係

マヨラナ準粒子は3次元トポロジカル超伝導体の表面に局在して存在する。粒子正孔対称性に加えて時間反転対称性が存在する時は、1対のマヨラナクラマース対が安定に存在する。一方で、これらの内部対称性に加えて（表面を不変に保つ）結晶の対称性、すなわち文様群の対称性が存在する時は、複数のマヨラナクラマース対が安定に存在する場合もある。対称性に保護されたマヨラナクラマース対についての系統的な分類が、多くの研究グループによって行われてきた [31–34, 36, 74]。先行研究より、2対のマヨラナクラマース対は磁気カイラルまたはグライド対称性が存在する場合のみ現れる [34, 51, 52, 75]。したがって、以降の議論ではこれらの対称性（で定義されるトポロジカル不変量）のみを考える。

出発点となるのは時間反転対称性をもつ3次元超伝導体を記述する BdG ハミルトニアン

$$H_{\text{bulk}}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} h(\mathbf{k}) - \mu & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^\dagger(\mathbf{k}) & -h^T(-\mathbf{k}) + \mu \end{bmatrix} \quad (2.2.1)$$

である。今スピンと軌道あるいは副格子の自由度は暗に含まれているものとする。 μ は化学ポテンシャルを表す。この系では時間反転対称性 (TRS) と粒子正孔対称性 (PHS) が存在する；

$$TH_{\text{bulk}}(\mathbf{k})T^{-1} = H_{\text{bulk}}(-\mathbf{k}), \quad T = -is_y\mathcal{K}, \quad CH_{\text{bulk}}(\mathbf{k})C^{-1} = -H_{\text{bulk}}(-\mathbf{k}), \quad C = \tau_x\mathcal{K} \quad (2.2.2)$$

ここで、 s_i, τ_i はそれぞれスピン空間と南部空間における i 番目のパウリ行列を表し、 \mathcal{K} は複素共役演算子である。また、これらを組み合わせたカイラル対称性 (CS)；

$$\{\Gamma, H_{\text{bulk}}(\mathbf{k})\} = 0, \quad \Gamma = iCT \quad (2.2.3)$$

が存在する [9, 10]。一方、系（結晶）は内部対称性に加えて空間群の対称性をもっている。議論を簡単にするため、マヨラナ準粒子が (xy) 面に存在すると仮定する。本研究では、文様群の対称性に対する電気応答の分類を行うので、このように1つの面を取り上げるだけで良い。このとき、ゼロエネルギーのマヨラナ準粒子は時間反転不変な波数 (TRIM) $\mathbf{k}_0 = (k_{0x}, k_{0y})$ に現れる。

表面には、考えている空間群 (SG) に対応した文様群 (WG) の対称性が存在する ($WG \subset SG$)。TRIM 上では BdG ハミルトニアンの常伝導部分 $h(\mathbf{k})$ は文様群の対称操作 g に対して不変であり、その表現行列を $D_{\mathbf{k}_0}(g)$ で表すと、

$$[D_{\mathbf{k}_0}(g), h(\mathbf{k}_0, k_z)] = 0 \quad (2.2.4)$$

を満たす。一方で、超伝導状態の秩序変数であるペアポテンシャル $\Delta(\mathbf{k})$ は空間群の既約表現のいずれかに属している。そのため、TRIM 上では1次元既約表現に対して

$$D_{\mathbf{k}_0}(g)\Delta(\mathbf{k}_0, k_z)D_{\mathbf{k}_0}^\dagger(g) = \eta_g\Delta(\mathbf{k}_0, k_z) \quad (2.2.5)$$

を満たす。ここで、 η_g は対称操作 g に対するパリティを意味しており、 $\eta_g = 1$ は偶パリティ、 $\eta_g = -1$ は奇パリティを表す。ここまでは常伝導状態の対称操作を用いた対称変換であるが、超伝導状態における対称操作は

$$\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g) \equiv D_{\mathbf{k}_0}(g) \oplus \eta_g D_{\mathbf{k}_0}^*(g) \quad (2.2.6)$$

であり、この対称操作に対して BdG ハミルトニアンは（偶パリティ、奇パリティのどちらの場合

も) $[\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g), H_{\text{bulk}}(\mathbf{k}_0, k_z)] = 0$ を満足する. また $\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g), C, \Gamma$ の間には,

$$\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}^\dagger(g) C \tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g) = \eta_g C, \quad (2.2.7)$$

$$\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}^\dagger(g) \Gamma \tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g) = \eta_g \Gamma \quad (2.2.8)$$

なる関係式が存在する. これらの関係式は後の議論で極めて重要になる. 高次の既約表現も部分群の 1 次元表現とみなせるため, 本研究では 1 次元表現のみを取り扱う.

$[\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g), H_{\text{bulk}}(\mathbf{k}_0, k_z)] = 0$ より, $\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g)$ と $H_{\text{bulk}}(\mathbf{k}_0, k_z)$ は同時対角化可能なため, そのユニタリ-行列を $U(g)$ とおけば

$$U(g)^\dagger H_{\text{bulk}}(\mathbf{k}_0, k_z) U(g) = H_{\text{bulk}}^1(\mathbf{k}_0, k_z) \oplus \cdots \oplus H_{\text{bulk}}^{|g|}(\mathbf{k}_0, k_z) \quad (2.2.9)$$

$$U(g)^\dagger \tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g) U(g) = \omega_1(g) 1_{\dim H_{\text{bulk}}^1(\mathbf{k}_0, k_z)} \oplus \cdots \oplus \omega_{|g|}(g) 1_{\dim H_{\text{bulk}}^{|g|}(\mathbf{k}_0, k_z)} \quad (2.2.10)$$

である. ここで $|g|$ は g の位数を表し, 1_n は $n \times n$ の単位行列である. g が回転または鏡映操作の場合は $\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g)$ の j 番目の固有値は

$$\omega_j(g) = e^{-i\pi(2j-1)/|g|}, \quad j = 1, \dots, |g|, \quad (2.2.11)$$

で与えられる. 一方で, グライド操作 $g = \{m_g | \tau_g\}$ (m_g は鏡映, τ_g は並進操作を表す) に対しては, ブリュリアルゾーン端 $\mathbf{k}_0 \cdot 2\tau_g = \pi$ において $\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}^2(g) = -e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot 2\tau_g} = 1$ であるので $\omega_1(g) = 1, \omega_2(g) = -1$ となる.

2.3 2 対のマヨラナクラマース対に対するトポロジカル不変量

この節では, 2 対のマヨラナクラマース対を保護するトポロジカル不変量について議論する. トポロジカル不変量は本来バルクで定義される量である. しかしながら, 表面に現れる 2 対のマヨラナクラマース対の既約表現を指定することで, 表面の有効理論からトポロジカル不変量の値を決定できる (バルクエッジ対応). これにより, 3 次元トポロジカル超伝導体表面において 2 対のマヨラナクラマース対を保護するトポロジカル不変量を, 各々の文様群に対して系統的に分類することが出来る. この分類と後ほど導出するマヨラナ多極子の分類理論を合わせることで, 2 対のマヨラナクラマース対が示す電気応答を全ての文様群に対して網羅的に示すことができる.

2.3.1 バルクで定義されるトポロジカル不変量

シンモルフィックな対称操作 g において, 時間反転によって $\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g)$ の固有空間は $H_{\text{bulk}}^1(\mathbf{k}_0, k_z) \rightarrow H_{\text{bulk}}^{|g|-i+1}(\mathbf{k}_0, -k_z)$ のように移り変わる ($\omega_i^*(g) = \omega_{|g|-i+1}(g)$). 一方で, 偶パリティのペアポテンシャル $\eta_g = 1$ に対しては, (2.2.8) 式より各固有空間にカイラル対称性 Γ^i が存在するため, $H_{\text{bulk}}^i(\mathbf{k}_0, k_z)$ は AIII クラスに属し, 巻き付き数 [76]

$$W^i[g] = \frac{i}{4\pi} \int dk_\perp \text{tr} \left(\Gamma^i (H_{\text{bulk}}^i(k_\perp))^{-1} \frac{\partial H_{\text{bulk}}^i(k_\perp)}{\partial k_\perp} \right) \in \mathbb{Z}, \quad (2.3.1)$$

によって特徴付けることができる [71]. 時間反転対称性によって上式は

$$W^i[g] = \frac{-i}{4\pi} \int dk_{\perp} \text{tr} \left(-\Gamma^{|g|^{-i+1}} (H_{\text{bulk}}^{|g|^{-i+1}}(-k_{\perp}))^{-1} \frac{\partial H_{\text{bulk}}^{|g|^{-i+1}}(-k_{\perp})}{\partial k_{\perp}} \right) = -W^{|g|^{-i+1}}[g] \quad (2.3.2)$$

となるので, $\sum_{i=1}^{|g|} W^i[g] = 0$ である. ここで, 時間反転によって $\Gamma^i \rightarrow -\Gamma^{|g|^{-i+1}}$ となることを用いた ($\{T, \Gamma\} = 0$). また, 指数定理とバルクエッジ対応から, 表面に存在するマヨラナ準粒子の数は $\sum_{i=1}^{|g|} |W^i[g]|$ に等しいので, マヨラナクラマース対の数は

$$N[g] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{|g|} |W^i[g]|. \quad (2.3.3)$$

によって与えられる ($\sum_{i=1}^{|g|} W^i[g] = 0$ より $\sum_{i=1}^{|g|} |W^i[g]|$ は必ず偶数になる). この値が有限であるとき, マヨラナクラマース対は磁気カイラル対称性 $\Gamma[g] \equiv i\Gamma \tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g)$ (=磁気巻き付き数 $W^i[g]$) によって保護されていると言える.

ここで, 後ほどマヨラナ多極子の分類を行う上で重要となる $W^i[g]$ が有限になる条件について述べる. 先行研究 [49] より, $W^i[g]$ は g とは別の対称操作 g' と関係があることが明らかにされており, 特に表面を不変に保つ対称操作に対して $W^i[g]$ が非ゼロになるための条件は

$$\eta_g = -\eta_{g'} = +1 \quad \text{for } \{g, g'\} = 0, \quad (2.3.4)$$

$$\eta_g = \eta_{g'} = +1 \quad \text{for } [g, g'] = 0 \quad (2.3.5)$$

である. この条件は言い換えれば, g 以外の表面の対称性 g' の各固有空間に磁気カイラル対称性 $\Gamma[g]$ が存在するのということである. $\Gamma[g]$ によって保護されたマヨラナクラマース対が存在するならば, もちろん g' の各固有空間にも $\Gamma[g]$ によって保護されたマヨラナクラマース対は存在するはずなので, 上式の条件はこのことを表している.

次に, ノンシンモルフィックな対称操作, すなわちグライド操作 g で定義されるトポロジカル不変量を考える. 先ほどの議論より, ブリュリアルゾーン端では, $\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g)$ の固有値は時間反転によって変化しない ($\omega_1(g) = 1, \omega_2(g) = -1$) ので, 各々の $H_{\text{bulk}}^i(\mathbf{k}_0, k_z)$ はカイラル対称性に加え時間反転対称性をもつ. すなわち, $H_{\text{bulk}}^i(\mathbf{k}_0, k_z)$ は DIII クラスに属し, \mathbb{Z}_2 トポロジカル不変量

$$\nu^i[g] = \int \frac{dk_{\perp}}{2\pi} a^i \in \mathbb{Z}_2, \quad (2.3.6)$$

$$a^i = -i \sum_{\alpha} \sum_{s=I,II} \langle k_{\perp}, i, \alpha, s | \frac{\partial |k_{\perp}, i, \alpha, s\rangle}{\partial k_{\perp}}, \quad (2.3.7)$$

によって特徴付けられる. ここで, α は $H_{\text{bulk}}^i(k_{\perp})$ の α 番目の負エネルギー固有状態

$$H_{\text{bulk}}^i(k_{\perp}) |k_{\perp}, i, \alpha, s\rangle = -E_{\alpha}(k_{\perp}) |k_{\perp}, i, \alpha, s\rangle, \quad (2.3.8)$$

を表し ($E_{\alpha}(k_{\perp}) > 0$), s はクラマース対のラベル

$$T^i |k_{\perp}, i, \alpha, I\rangle = |-k_{\perp}, i, \alpha, II\rangle, \quad (2.3.9)$$

$$T^i |k_{\perp}, i, \alpha, II\rangle = -|-k_{\perp}, i, \alpha, I\rangle, \quad (2.3.10)$$

を表す. $\nu^i[g] = 1$ の時, 固有空間 $H_{\text{bulk}}^i(k_{\perp})$ に表面を作ると, その表面には1つのマヨラナクラマース対が存在する [77]. すなわち, 2対のマヨラナクラマース対は $\nu^1[g] = \nu^2[g] = 1$ のときのみ

表 2.3.1: 各々の文様群 (WG) とペアポテンシャルの既約表現に対するトポロジカル不変量. ここでの既約表現はバルクのペアポテンシャルを表面に射影して得られたものを表す. ノンシンモルフィックな WG (pg , pmg , pgg , $p4g$) に対しては, B , X , S , M 点などの高対称点の運動量を考える (文字の定義は Bilbao Crystallographic Server [78, 79] を参照). 特に pgg や $p4g$ では, 高対称点において必ず 0 か 2 対のマヨラナクラマース対しか現れず, 1 対のマヨラナクラマース対は単体として存在できないことに注意する.

Topo	WG (irrep)
$N[g] = 2$	$p2(A), p3(A), p4(A), p6(A), pm(A'),$ $pmm(A_2, B_1, B_2), p31m(A_1, A_2),$ $p3m1(A_1, A_2), p4m(A_2),$ $p6m(A_2, B_1, B_2),$ $pmg(A_1), pgg(A_2), p4g(A_2)$
$\nu^1[g] = \nu^2[g] = 1$	$pg(A'), pmg(B_1), pgg(A_1, B_1, B_2),$ $p4g(A_1, B_1)$
$N[C_3] = \nu^2[C_3] = 1$	$p3(A), p31m(A_2), p3m1(A_2),$ $p6(A), p6m(A_2)$

現れる. またここで定義した $\nu^i[g]$ については, 表面を不変に保つ対称操作に対して $W^i[g]$ の時のような非ゼロになるための条件は存在しない [52]. ここまでの議論を表 2.3.1 にまとめた. $W^i[g]$ と $\nu^i[g]$ が有限になりうる文様群とペアポテンシャルの既約表現の組み合わせはこれで全てである. 3 回回転対称性 C_3 についての議論は後ほど改めて行う.

以上で導出したトポロジカル不変量はバルクで定義され, バルクの波動関数 (エネルギー固有状態) を用いて計算することが出来る. しかしながら, これから見るように表面のマヨラナ準粒子状態 (ゼロエネルギー固有状態) を用いても \mathbb{Z} 不変量に関しては直接計算することが出来る. また \mathbb{Z}_2 不変量は直接計算することは出来ないが, \mathbb{Z} 不変量を計算することにより, マヨラナ電気多極子の対称性との関係から間接的に求めることが出来る.

2.3.2 表面の有効理論とトポロジカル不変量

まず表面の有効理論について簡単に説明する. 詳細は付録 A に記した. マヨラナ場の演算子 $\psi_i(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} = (x, y)$ は自己共役性 $\psi_i^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{ij} U_{ij}^C \psi_j(\mathbf{x})$, $i, j = 1, 2, \dots, 2N$ を満たす. また, $\{\psi_i(\mathbf{x}), \psi_j^\dagger(\mathbf{x}')\} = \delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ である. 表面の有効理論における粒子正孔対称性は $\mathcal{C} = U^C \mathcal{K}$ で与えられる. $N = 2$ の時が 2 対のマヨラナクラマース対が存在するときに対応する. このとき TRIM 付近での低エネルギー表面有効ハミルトニアンは

$$H_{\text{surf}} = \int d^2x \psi(\mathbf{x})^\dagger h_{\text{surf}}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}), \quad (2.3.11)$$

で与えられる. $h_{\text{surf}}(\mathbf{x})$ はエネルギー密度行列であり, $\{\mathcal{C}, h_{\text{surf}}(\mathbf{x})\} = 0$ を満たしている. さらに系に時間反転対称性があると仮定しているので,

$$[\mathcal{T}, h_{\text{surf}}(\mathbf{x})] = 0, \quad \mathcal{T} = (-is_y \mathcal{K}) \oplus \dots \oplus (-is_y \mathcal{K}) \quad (2.3.12)$$

も満たしている. s_i はバルク同様にスピン空間のパウリ行列を表す. TRIM 上の小群 \mathcal{G} は文様群の対称操作を含み, ハミルトニアン H_{surf} は対称操作 $g \in \mathcal{G}$ に対して不変でなければならない. すなわち, エネルギー密度行列に対して

$$D(g)h_{\text{surf}}(\mathbf{x})D^\dagger(g) = h_{\text{surf}}(g\mathbf{x}), \quad \psi(\mathbf{x}) \rightarrow D^\dagger(g)\psi(g\mathbf{x}) \quad (2.3.13)$$

が成立する.

(i) g が 2 回回転または鏡映対称性の場合

この場合, バルクにおいて定義される磁気巻き付き数は

$$W^1[g] - W^2[g] = \frac{i}{4\pi} \int dk_\perp \text{tr} \left(i\Gamma \tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g) (H_{\text{bulk}}(k_\perp))^{-1} \frac{\partial H_{\text{bulk}}(k_\perp)}{\partial k_\perp} \right) \quad (2.3.14)$$

となる [49]. 指数定理とバルクエッジ対応より, 表面のマヨラナ準粒子状態は磁気カイラル対称性の固有状態であり, 各々の磁気巻き付き数 $W^i[g]$ とカイラリティは一致する [77]. すなわち, 表面において $D(g)$ を対角化する基底を用いると

$$\text{tr}(i\Gamma D(g))_{\text{surf}} = i \sum_{i=1}^{|g|} \Gamma^i \omega_i(g) = i \sum_{i=1}^{|g|} W^i[g] \omega_i(g) = 2W^1[g] \quad (2.3.15)$$

(ここで $\omega_i(g)$ は, $\tilde{D}_{\mathbf{k}_0}(g)$ の i 番目の固有値を表す ((2.2.11) 式を参照)). これより, 表面のマヨラナクラマス対の数は

$$N[g] = \frac{1}{2} |\text{tr}(i\Gamma D(g))_{\text{surf}}| \quad (2.3.16)$$

で与えられる. また, $\text{tr}(\dots)_{\text{surf}}$ は表面のマヨラナ準粒子状態を基底として計算することも可能であり, 後ほど行う分類では具体的にマヨラナ準粒子状態の既約表現を指定することでこの計算を行う (つまり, いちいち $D(g)$ を対角化する基底を求める必要がない).

(ii) g が 4 回回転対称性の場合

この場合, まず時間反転対称性 ($W^i[g] = -W^{|g|-i+1}[g]$) より,

$$W^1[C_4] + W^4[C_4] = W^2[C_4] + W^3[C_4] = 0 \quad (2.3.17)$$

である. したがって,

$$\text{tr}(\Gamma D(C_4))_{\text{surf}} = \sum_{i=1}^4 W^i[C_4] \omega_i(C_4) = -i\sqrt{2}(W^1[C_4] + W^2[C_4]) \quad (2.3.18)$$

である. また, 4 回回転対称性が存在するとき, 必ず 2 回回転対称性も存在するので, $\text{tr}(i\Gamma D(C_2))_{\text{surf}}$ も計算すると

$$\text{tr}(\Gamma D(C_4))_{\text{surf}} = \text{tr}(\Gamma D^2(C_4))_{\text{surf}} = \sum_{i=1}^4 W^i[C_4] \omega_i^2(C_4) = -i2(W^1[C_4] - W^2[C_4]) \quad (2.3.19)$$

となる。これらを (2.3.3) 式に代入すると

$$N[C_4] = \left| \frac{1}{2\sqrt{2}} \text{tr}(\Gamma D(C_4))_{\text{surf}} + \frac{1}{4} \text{tr}(\Gamma D(C_2))_{\text{surf}} \right| + \left| \frac{1}{2\sqrt{2}} \text{tr}(\Gamma D(C_4))_{\text{surf}} - \frac{1}{4} \text{tr}(\Gamma D(C_2))_{\text{surf}} \right| \quad (2.3.20)$$

を得る。

(iii) g が 6 回回転対称性の場合

この場合も 4 回回転対称性の時と同様の議論により、

$$N[C_6] = \left| \frac{1}{6} \text{tr}(\Gamma D(C_6))_{\text{surf}} + \frac{\sqrt{3}}{6} \text{tr}(\Gamma D(C_3))_{\text{surf}} + \frac{1}{6} \text{tr}(\Gamma D(C_2))_{\text{surf}} \right| + \left| \frac{1}{3} \text{tr}(\Gamma D(C_6))_{\text{surf}} - \frac{1}{6} \text{tr}(\Gamma D(C_2))_{\text{surf}} \right| + \left| \frac{1}{6} \text{tr}(\Gamma D(C_6))_{\text{surf}} - \frac{\sqrt{3}}{6} \text{tr}(\Gamma D(C_3))_{\text{surf}} + \frac{1}{6} \text{tr}(\Gamma D(C_2))_{\text{surf}} \right| \quad (2.3.21)$$

となる。

(iv) g が 3 回回転対称性の場合

この場合は議論がやや複雑となる。なぜなら、以下で見るとように 3 回回転対称性があるときは、 \mathbb{Z}_2 不変量 $\nu^i[C_3]$ も定義できるためである。まず時間反転対称性より、

$$W^1[C_3] + W^3[C_3] = W^2[C_3] = 0 \quad (2.3.22)$$

である。特徴的なのは $W^2[C_3]$ が必ず 0 となることである。なぜなら、 $\omega_2^*(C_3) = \omega_2(C_3)$ であり、この固有値をもつ固有空間はそれ自身で時間反転対称性を有するためである。したがって、 $\text{tr}(\Gamma D(C_3))_{\text{surf}} = -i\sqrt{3}W^1[C_3]$ より、

$$N[C_3] = \frac{1}{\sqrt{3}} |\text{tr}(\Gamma D(C_3))_{\text{surf}}| \quad (2.3.23)$$

となる。一方で、 $\omega_2(C_3)$ の固有空間では時間反転対称性が存在するため、 \mathbb{Z}_2 不変量 $\nu^2[C_3]$ を定義することができる。したがって、2 対のマヨラナクラマース対が現れる場合として $N[C_3] = 2$ の場合と $N[C_3] = \nu^2[C_3] = 1$ の 2 通りが考えられる。

2.4 マヨラナ電気多極子の分類理論

この節では、マヨラナクラマース対が形成する多極子の分類理論について説明する。まずバルクの超伝導状態における局所的な物理量は、電子場の演算子を用いて

$$O_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \mathcal{O}_i \Psi(\mathbf{x}), \quad \Psi^T = (c(\mathbf{x}), c^\dagger(\mathbf{x})) \quad (2.4.1)$$

と表される．このときバルクの中の演算子を表面状態で展開することで，表面におけるマヨラナクラマース対が形成する多極子演算子

$$O_{i,\text{MF}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\psi^\dagger(\mathbf{x})\mathcal{O}_{i,\text{MF}}\psi(\mathbf{x}) \quad (2.4.2)$$

を得る．時間反転対称性がある場合，マヨラナ多極子はそのパリティで2つの要素に分けることができる．すなわち，

$$O_{i,\text{MF}}^\pm(\mathbf{x}) \equiv \frac{O_{\text{MF}}(\mathbf{x}) \pm \mathcal{T}O_{i,\text{MF}}(\mathbf{x})\mathcal{T}^{-1}}{2} \quad (2.4.3)$$

であり， O^+ が時間反転に対して偶の， O^- が奇パリティの多極子を表す．これらの多極子はTRIM上の小群 \mathcal{G} に対して

$$O_{i,\text{MF}}^\pm(\mathbf{x}) = \sum_A O_{i,\text{MF}}^{A\pm}(\mathbf{x}) \quad (2.4.4)$$

のように既約分解することができる．ここで， $O_{i,\text{MF}}^{A\pm}(\mathbf{x})$ は \mathcal{G} のいずれかの既約表現に属する． $O_{\text{MF}}^{A+}(\mathbf{x})$ の中には全対称表現の多極子（例えば電気単極子＝密度演算子 $\rho(\mathbf{x}) = \psi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$ ）も含まれている．しかしながら，マヨラナクラマース対がもつ電荷中性条件よりこの演算子は恒等的に0となるので [33]，マヨラナ電気単極子は存在しない．一方で，マヨラナクラマース対が1対のみ存在する時の $O_{\text{MF}}^{A-}(\mathbf{x})$ の分類は先行研究で網羅的に行われた [53]．

$O_{i,\text{MF}}^\pm(\mathbf{x})$ の対称操作 $g \in \mathcal{G}$ に対する変換は

$$O_{i,\text{MF}}^\pm(\mathbf{x}) \rightarrow \sum_j \mathcal{U}_{ij}^\pm(g) O_{j,\text{MF}}^\pm(g\mathbf{x}) \quad (2.4.5)$$

で与えられ，このときマヨラナ多極子の指標 $\chi^\pm(g) = \text{tr}\mathcal{U}^\pm(g)$ は

$$\chi^\pm(g) = \frac{\eta_g}{4} \left(\left\{ \text{tr}[D(g)] \right\}^2 - \text{tr}[D(g)^2] \right) \pm \frac{\eta_g}{4} \left(\left\{ \text{tr}[\Gamma D(g)] \right\}^2 - \text{tr}[(\Gamma D(g))^2] \right) \quad (2.4.6)$$

となる．ここで $\eta_g = \pm 1$ はバルクで定義したペアポテンシャルの g に対する指標を表す ((2.2.5)式)．この式と前節で導出したトポロジカル不変量の表式を見比べると分かるように，マヨラナ多極子の対称性とトポロジカル不変量は $\text{tr}[D(g)]$ （または $\text{tr}[\Gamma D(g)]$ ）を通して関係している．例えば，表面に存在する2対のマヨラナクラマース対がトポロジカル不変量 $N[g]$ または $\nu[g]$ によって保護されていたとしよう．このとき， $\eta_g = 1$ である（すなわち，ペアポテンシャルは g に対して偶パリティ）．この系に時間反転不変な空間的に一様な摂動を加えたとしよう．すると，この摂動が g に対して偶パリティならば， $N[g]$ または $\nu[g]$ の値（整数）は変化しない．しかしながら， g に対して奇パリティのとき整数 $N[g]$ と $\nu[g]$ のどちらも定義することができず，したがって，この摂動で2対のマヨラナクラマース対にはエネルギーギャップが開く．この事実は， $N[g]$ または $\nu[g]$ によって保護された2対のマヨラナクラマース対は g に対して奇パリティの電気多極子を形成するということである（同時に g に対して偶パリティの電気多極子は存在しないことも分かる）．次節の分類では，これらの結果を全ての文様群とペアポテンシャルの既約表現に対して導く．

2.5 全ての文様群に対するマヨラナ電気多極子の分類

この節ではこれまでの結果をまとめて、以下の手順 (I)–(IV) に従って、各々の文様群とペアポテンシャルの既約表現に対して、マヨラナ多極子の対称性を分類する。いくつかの具体的な計算例は付録 B に示した。

(I) 表面における文様群 (WG) を指定する。さらにどの TRIM 上のマヨラナクラマース対を考えているか、すなわち、対応する小群 $\mathcal{G} \subset \text{WG}$ を指定する。また、この小群 (点群) に対するペアポテンシャル Δ の既約表現を指定する。

(II) 2 対のマヨラナクラマース対の表現 \bar{X} を指定する。方法は Bilbao Crystallographic Server [80] から WGs に対する時間反転不変な 2 重群の既約表現のいずれかを選択する。これには 2 通りの方法が存在し、1 つは 2 次元表現の直和 $X = \bar{A}_1 \oplus \bar{A}_2$ ($\bar{A}_1 = \bar{A}_2$ の場合も含む) を考える方法、あるいはノンシンモルフィックな場合は、1 つの 4 次元表現 \bar{X} を考える方法である。

(III) 具体的に g の 4×4 表現行列 $D(g)$ を構成する。これは Bilbao Crystallographic Server を見れば、指定したマヨラナクラマース対の表現 \bar{X} の欄に具体的な行列が与えられている。

(IV) 荷電共役演算子 $\mathcal{C} = U^C \mathcal{K}$ を構成する。このとき、 \mathcal{C} は関係式

$$[\mathcal{C}, D(g)] = 0, \quad \text{for } \eta(g) = 1, \quad (2.5.1)$$

$$\{\mathcal{C}, D(g)\} = 0, \quad \text{for } \eta(g) = -1. \quad (2.5.2)$$

を満たしてなければならない ((2.2.7) 式)。これより \mathcal{C} が得られればカイラル対称性 $\Gamma = i\mathcal{C}\mathcal{T}$ も得られる。いくつかのケースでは、カイラル対称性は一意に決まらず、それぞれの表現で異なるトポロジカル不変量とマヨラナ多極子の対称性が与えられる。

(V) 得られた表式を (2.4.6) 式に代入し、マヨラナ多極子の対称性を決定する。もし $\chi^+(g)$ として全対称表現の指標が得られた場合、それは電荷中性条件と矛盾するので、マヨラナクラマース対は存在しないことを意味する。

全ての文様群に対して分類した結果が表 2.5.1 と表 2.5.2 である。Strain の欄はマヨラナ電気四極子と結合する (空間反転対称性のある)、電気的な摂動を表している。対称化されていない歪みテンソルは $u_{ij} \equiv \partial_i u_j$ のように定義され、 $u_i(\mathbf{x})$ は格子変位場と呼ばれるベクトル場を表す。文様群 (小群 \mathcal{G}) の対称操作 g に対する変換性は $\mathbf{x} \rightarrow g\mathbf{x}$ より、 $u_i \rightarrow g_{ij}u_j(g\mathbf{x})$ のように与えられ、歪みテンソルは \mathcal{G} の既約表現 Γ_i に既約分解される。これを u_{Γ_i} のように書けば、マヨラナ電気四極子 O_{Γ_i} との結合は

$$H_{\text{surf,ex}} = - \sum_{i=1} O_{\Gamma_i} u_{\Gamma_i} \quad (2.5.3)$$

と表される。ここで、いくつかの例外について説明する。

3 回回転対称性で定義される \mathbb{Z}_2 不変量

例として WG が $p3$ で、マヨラナクラマース対の既約表現が $2\bar{\Gamma}_4 \oplus \bar{\Gamma}_5 \oplus \bar{\Gamma}_6$ の時を考える。 $\bar{\Gamma}_4$ ($D(C_3) = \omega_2(C_3) = -1$) は 1 次元の 2 重実表現であり [80], 時間反転対称性をもたない。しかし $2\bar{\Gamma}_4$ は時間反転不変な表現となるため, $\omega_2(C_3)$ の固有空間では巻き付き数 $W^2[C_3]$ をもたないが, \mathbb{Z}_2 不変量 $\nu^2[C_3] = 1$ に保護された 1 対のマヨラナクラマース対が存在する。一方で表現 $\bar{\Gamma}_5 \oplus \bar{\Gamma}_6$ に対しては巻き付き数 $N[C_3] = \sqrt{3}^{-1} |\text{tr}(\Gamma D(C_3))_{\text{surf}}| = 1$ に保護された 1 対のマヨラナクラマース対が存在しうる。したがって, 2 対のマヨラナクラマース対を保護するトポロジカル不変量は

$$N[C_3] = \nu^2[C_3] = 1 \quad (2.5.4)$$

となる。同様の状況は $\bar{\Gamma}_4 \oplus \bar{\Gamma}_5 \oplus \bar{\Gamma}_6$ ($p31m$), $\bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_8 \oplus \bar{\Gamma}_{10} \oplus \bar{\Gamma}_{11}$ ($p6$), $\bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_8 \oplus \bar{\Gamma}_9 \oplus \bar{\Gamma}_{12}$ ($p6$), $\bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_9$ ($p6m$), $\bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_8$ ($p6m$) でも起こる。

可換群における \mathbb{Z}_2 不変量

2 重群において注意しなければならないのは, 互いに異なる対称操作が非可換になる場合と可換になる場合が両方存在することである。特に文様群のうち, シンモルフィックな系 (小群) では互いに異なる対称操作は非可換である。一方で, ノンシンモルフィックな系では互いに異なる対称操作が可換となる場合がある。このとき, 2 対のマヨラナクラマース対を保護するトポロジカル不変量にも注意が必要となる。

例として pmg で $\Delta = A_1$ 表現の場合を考える。このとき, 2 対のマヨラナクラマース対の既約表現が $\bar{X}_2 \oplus \bar{X}_5 \oplus \bar{X}_3 \oplus \bar{X}_4$ ならば, 表 2.5.2 より, これらを保護するトポロジカル不変量として $N[m_{10}] = 2$ & $\nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$ と $N[C_2] = 2$ & $\nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$ の 2 通りの場合が存在する。このように可換群では, 2 対のマヨラナクラマース対は \mathbb{Z} だけでなく \mathbb{Z}_2 不変量にも保護されている場合がある。それぞれの場合で電気多極子の対称性は $2A_2$ と $2B_2$ となっており, 互いに異なる対称性の電気多極子をもっている。この任意性はカイラル対称性の表現を唯一に決められないことに起因する。以下では, $N[m_{10}] = 2$ & $\nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$ の場合をどのように \mathbb{Z}_2 不変量を求めるかについて説明する。

まず \mathbb{Z} 不変量は具体的に計算することができ, その結果 $N[m_{10}] = 2$ が得られる。このとき, 電気多極子の対称性として $\chi^+(g) \rightarrow 2A_2$ も同時に得られる。一方でもし, $\nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 0$ であるならば, 2 対のマヨラナクラマース対は磁気カイラル対称性 $\Gamma[m_{10}]$ のみに保護されていることから, B_1 表現の電氣的な摂動に対しても応答する (エネルギーギャップが開く) はずである。したがって, B_1 表現の電気多極子を除くためには $\nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$ でなければならず, 結果として $N[m_{10}] = 2$ & $\nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$ が得られる。

表 2.5.1: 2 対のマヨラナクラマース対がもつ電気磁気自由度 (マヨラナ多極子) の分類. バルクのペアポテンシャルの既約表現が Δ のとき, 表面に文様群の対称性をもった 2 対のマヨラナクラマース対が現れる. 3 列目左から, 2 対のマヨラナクラマース対の既約表現 (MKPs), トポロジカル不変量 (Topo), 歪みテンソル $u_{ij}(\mathbf{x}) = \partial_i u_j(\mathbf{x})$ (Strain) と結合する電気多極子の既約表現 (Electric) がそれぞれ示されている. 一番右は, 先行研究でも明らかにされている磁気多極子の既約表現 (Magnetic) を示してある. ここでは Bilbao Crystallographic Server [80] の定義に則って文様群や既約表現を記した. $\bar{\Gamma}_i$ は Γ 点における小群の i 番目の 2 重群の既約表現を示す. $2\bar{\Gamma}_i = \bar{\Gamma}_i \oplus \bar{\Gamma}_i$ である. 八極子 O_i は $O_x = \partial_x u_{xx} - \partial_x u_{yy} - \partial_y u_{xy} - \partial_y u_{yx}$ と $O_y = \partial_y u_{yy} - \partial_y u_{xx} - \partial_x u_{yx} - \partial_x u_{xy}$ で定義される. $P3m1$ と $P31m$ の結果は同一である.

WG	Δ	MKPs	Topo	Electric	Strain	Magnetic
$p2$	A	$2(\bar{\Gamma}_3 \oplus \bar{\Gamma}_4)$	$N[C_2] = 2$	$2B$	$u_{xz}, u_{zx}, u_{yz}, u_{zy}$	$4A$
$p3$	A	$2(\bar{\Gamma}_5 \oplus \bar{\Gamma}_6)$	$N[C_3] = 2$	E	$(u_{xx} - u_{yy}, u_{xy} + u_{yx}),$ $(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$4A$
$p3$	A	$2\bar{\Gamma}_4 \oplus \bar{\Gamma}_5 \oplus \bar{\Gamma}_6$	$N[C_3] = \nu^2[C_3] = 1$	E	$(u_{xx} - u_{yy}, u_{xy} + u_{yx}),$ $(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$2A + E$
$p4$	A	$2(\bar{\Gamma}_5 \oplus \bar{\Gamma}_7), 2(\bar{\Gamma}_6 \oplus \bar{\Gamma}_8)$	$N[C_4] = N[C_2] = 2$	E	$(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$4A$
$p4$	A	$\bar{\Gamma}_5 \oplus \bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_6 \oplus \bar{\Gamma}_8$	$N[C_4] = N[C_2] = 2$	E	$(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$2A + 2B$
$p4$	A	$\bar{\Gamma}_5 \oplus \bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_6 \oplus \bar{\Gamma}_8$	$N[C_4] = 2$	$2B$	$(u_{xx} - u_{yy}, u_{xy} + u_{yx})$	$2A + E$
$p6$	A	$2(\bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_8)$	$N[C_6] = N[C_2] = 2$	$2B$	O_x, O_y	$4A$
$p6$	A	$2(\bar{\Gamma}_9 \oplus \bar{\Gamma}_{12}), 2(\bar{\Gamma}_{10} \oplus \bar{\Gamma}_{11})$	$N[C_6] = N[C_3] = N[C_2] = 2$	E_1	$(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$4A$
$p6$	A	$\bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_8 \oplus \bar{\Gamma}_9 \oplus \bar{\Gamma}_{12},$ $\bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_8 \oplus \bar{\Gamma}_{10} \oplus \bar{\Gamma}_{11}$	$N[C_6] = N[C_2] = 2,$ $N[C_3] = \nu^2[C_3] = 1$	E_1	$(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$2A + E_2$
$p6$	A	$\bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_8 \oplus \bar{\Gamma}_9 \oplus \bar{\Gamma}_{12},$ $\bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_8 \oplus \bar{\Gamma}_{10} \oplus \bar{\Gamma}_{11}$	$N[C_6] = N[C_3] = 2,$ $N[C_3] = \nu^2[C_3] = 1$	E_2	$(u_{xx} - u_{yy}, u_{xy} + u_{yx})$	$2A + E_1$
$p6$	A	$\bar{\Gamma}_9 \oplus \bar{\Gamma}_{12} \oplus \bar{\Gamma}_{10} \oplus \bar{\Gamma}_{11}$	$N[C_6] = N[C_2] = 2$	$2B$	O_x, O_y	$2A + E_2$
$p6$	A	$\bar{\Gamma}_9 \oplus \bar{\Gamma}_{12} \oplus \bar{\Gamma}_{10} \oplus \bar{\Gamma}_{11}$	$N[C_6] = N[C_3] = 2$	E_2	$(u_{xx} - u_{yy}, u_{xy} + u_{yx})$	$2A + 2B$
pm	A'	$2(\bar{\Gamma}_3 \oplus \bar{\Gamma}_4)$	$N[m_{10}] = 2$	$2A''$	$u_{xy}, u_{yx}, u_{yz}, u_{zy}$	$4A'$
pmm	A_2	$2\bar{\Gamma}_5$	$N[C_2] = 2$	$B_1 + B_2$	$u_{xz}, u_{zx}, u_{yz}, u_{zy}$	$4A_2$
pmm	B_1	$2\bar{\Gamma}_5$	$N[m_{01}] = 2$	$A_2 + B_2$	$u_{xy}, u_{yx}, u_{yz}, u_{zy}$	$4B_1$
pmm	B_2	$2\bar{\Gamma}_5$	$N[m_{10}] = 2$	$A_2 + B_1$	$u_{xy}, u_{yx}, u_{xz}, u_{zx}$	$4B_2$
$p31m$	A_1	$2(\bar{\Gamma}_4 \oplus \bar{\Gamma}_5)$	$N[m_{1\bar{1}}] = N[m_{12}] = N[m_{21}] = 2$	$2A_2$	$u_{xy} - u_{yx}$	$4A_1$
$p31m$	A_2	$2\bar{\Gamma}_6$	$N[C_3] = 2$	E	$(u_{xx} - u_{yy}, u_{xy} + u_{yx}),$ $(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$A_1 + 3A_2$
$p31m$	A_2	$\bar{\Gamma}_4 \oplus \bar{\Gamma}_5 \oplus \bar{\Gamma}_6$	$N[C_3] = \nu^2[C_3] = 1$	E	$(u_{xx} - u_{yy}, u_{xy} + u_{yx}),$ $(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$2A_2 + E$
$p4m$	A_2	$2\bar{\Gamma}_6, 2\bar{\Gamma}_7$	$N[C_4] = N[C_2] = 2$	E	$(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$A_1 + 3A_2$
$p4m$	A_2	$\bar{\Gamma}_6 \oplus \bar{\Gamma}_7$	$N[C_4] = N[C_2] = 2$	E	$(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$2A_2 + B_1 + B_2$
$p4m$	A_2	$\bar{\Gamma}_6 \oplus \bar{\Gamma}_7$	$N[C_4] = 2$	$B_1 + B_2$	$u_{xx} - u_{yy}, u_{xy} + u_{yx}$	$2A_2 + E$
$p6m$	A_2	$2\bar{\Gamma}_8, 2\bar{\Gamma}_9$	$N[C_6] = N[C_3] = N[C_2] = 2$	E_1	$u_{xz}, u_{zx}, u_{yz}, u_{zy}$	$A_1 + 3A_2$
$p6m$	A_2	$2\bar{\Gamma}_7$	$N[C_6] = N[C_2] = 2$	$B_1 + B_2$	O_x, O_y	$A_1 + 3A_2$
$p6m$	A_2	$\bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_9, \bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_8$	$N[C_6] = N[C_2] = 2,$ $N[C_3] = \nu^2[C_3] = 1$	E_1	$(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$2A_2 + E_2$
$p6m$	A_2	$\bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_9, \bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_8$	$N[C_6] = 2, N[C_3] = \nu^2[C_3] = 1$	E_2	$(u_{xx} - u_{yy}, u_{xy} + u_{yx})$	$2A_2 + E_1$
$p6m$	A_2	$\bar{\Gamma}_8 \oplus \bar{\Gamma}_9$	$N[C_6] = N[C_2] = 2$	$B_1 + B_2$	O_x, O_y	$2A_2 + E_2$
$p6m$	A_2	$\bar{\Gamma}_8 \oplus \bar{\Gamma}_9$	$N[C_6] = N[C_3] = 2$	E_2	$(u_{xx} - u_{yy}, u_{xy} + u_{yx})$	$2A_2 + B_1 + B_2$
$p6m$	B_1	$2\bar{\Gamma}_7$	$N[m_{1\bar{1}}] = N[m_{12}] = N[m_{21}] = 2$	$A_2 + B_2$	$u_{xy} - u_{yx}, O_y$	$A_1 + 3B_1$
$p6m$	B_2	$2\bar{\Gamma}_7$	$N[m_{11}] = N[m_{10}] = N[m_{01}] = 2$	$A_2 + B_1$	$u_{xy} - u_{yx}, O_x$	$A_1 + 3B_2$

表 2.5.2: ノンシンモルフィックな文様群に対する表 2.5.1 の続き. $\bar{B}_i, \bar{X}_i, \bar{S}_i, \bar{M}_i$ は B, X, S, M 点の小群に対する 2 重表現を表す (定義は Bilbao Crystallographic Server [80] を参照).

WG	Δ	MKPs	Topo	Electric	Strain	Magnetic
pg	A'	$2\bar{B}_3 \oplus 2\bar{B}_4$	$\nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$	$2A''$	$u_{xy}, u_{yx}, u_{yz}, u_{zy}$	$2A' + 2A''$
pmg	A_1	$2(\bar{X}_2 \oplus \bar{X}_5), 2(\bar{X}_3 \oplus \bar{X}_4)$	$N[C_2] = N[m_{10}] = 2$	$2B_1$	u_{xz}, u_{zx}	$4A_1$
pmg	A_1	$\bar{X}_2 \oplus \bar{X}_5 \oplus \bar{X}_3 \oplus \bar{X}_4$	$N[m_{10}] = 2, \nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$	$2A_2$	u_{xy}, u_{yx}	$2A_1 + 2B_2$
pmg	A_1	$\bar{X}_2 \oplus \bar{X}_5 \oplus \bar{X}_3 \oplus \bar{X}_4$	$N[C_2] = 2, \nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$	$2B_2$	u_{yz}, u_{zy}	$2A_1 + 2A_2$
pmg	B_1	$\bar{X}_2 \oplus \bar{X}_5 \oplus \bar{X}_3 \oplus \bar{X}_4$	$\nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$	$A_2 + B_2$	$u_{xy}, u_{yx}, u_{yz}, u_{zy}$	$A_2 + 2B_1 + B_2$
pgg	A_1	$2\bar{S}_5$	$\nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$ $= \nu^1[g_{10}] = \nu^2[g_{10}] = 1$	$2A_2$	u_{xy}, u_{yx}	$A_1 + A_2 + B_1 + B_2$
pgg	A_2	$2\bar{S}_5$	$N[C_2] = 2$	$B_1 + B_2$	$u_{xz}, u_{zx}, u_{yz}, u_{zy}$	$3A_1 + A_2$
pgg	B_1	$2\bar{S}_5$	$\nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$	$A_2 + B_2$	$u_{xy}, u_{yx}, u_{yz}, u_{zy}$	$A_1 + B_1 + 2B_2$
pgg	B_2	$2\bar{S}_5$	$\nu^1[g_{10}] = \nu^2[g_{10}] = 1$	$A_2 + B_1$	$u_{xy}, u_{yx}, u_{xz}, u_{zx}$	$A_1 + 2B_1 + B_2$
$p4g$	A_1	$\bar{M}_6 \oplus \bar{M}_7$	$N[C_4] = 2,$ $\nu^1[g_{10}] = \nu^2[g_{10}] = 1$ $= \nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$	$2B_2$	$u_{xy} + u_{yx}$	$A_1 + A_2 + E$
$p4g$	A_2	$\bar{M}_6 \oplus \bar{M}_7$	$N[C_4] = N[C_2] = 2$	E	$(u_{xz}, u_{yz}), (u_{zx}, u_{zy})$	$A_1 + A_2 + 2B_1$
$p4g$	B_1	$\bar{M}_6 \oplus \bar{M}_7$	$\nu^1[g_{10}] = \nu^2[g_{10}] = 1$ $= \nu^1[g_{01}] = \nu^2[g_{01}] = 1$	$A_2 + B_2$	$u_{xy} - u_{yx}, u_{xy} + u_{yx}$	$A_2 + B_1 + E$

Space group: $Pm\bar{3}m$

(Point group: O_h)

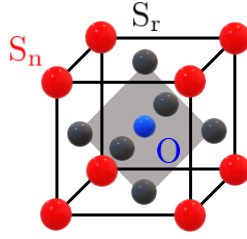


図 2.6.1: Sr_3SnO の結晶構造. 空間群は $Pm\bar{3}m$ (点群 O_h). 赤が Sn サイト, 灰色が Sr サイト, 青が O サイトを表す.

2.6 アンチペロブスカイト超伝導 Sr_3SnO への適用

この節では実際に具体的なモデルを用いて, 2 対のマヨラナクラーマース対が歪み (電氣的な摂動) に対して応答することを示す.

2.6.1 アンチペロブスカイト

本題に入る前に, アンチペロブスカイトについて簡単に説明する. アンチペロブスカイトとは図 2.6.1 のように, ペロブスカイト構造を構成する陽イオン (金属イオン) と陰イオン (酸素イオン) の位置を入れ替えた構造をしている. アンチペロブスカイトとして, A_3BX ($A = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{La}$, $B = \text{Pb}, \text{Sn}$, $X = \text{C}, \text{N}, \text{O}$) 等は, $J = 3/2$ の多軌道バンドをもち, 2 つの軌道のバンド反転に由来したトポロジカル結晶絶縁体の候補物質とされている [81–83]. 特に興味深いことに, Sr_3SnO は 5K 以下において超伝導状態を示し [69], 強い混成軌道を伴った非従来型超伝導になる可能性がある [70]. 以下で具体的なモデルを用いて示すように, ペアポテンシャルの既約表現によっては, Sr_3SnO は (001) 表面に 2 対のマヨラナクラーマース対をもつ場合があり, 歪みとの結合によってゼロモードにギャップが開きうる.

2.6.2 具体的なモデルハミルトニアン

考えるモデルは, アンチペロブスカイトの結晶構造を反映した, ペアポテンシャルの既約表現が点群 O_h の A_{1u} 表現に属するモデルである. この時, バルクの BdG ハミルトニアンは

$$H_{\text{bulk}}(\mathbf{k}) = h(\mathbf{k}) + \Delta_0 \sigma_x \tau_x, \quad (2.6.1)$$

$$h(\mathbf{k}) = \left[-m_0 + \alpha \sum_i \{2 - 2 \cos(k_i)\} \right] \sigma_z + \sin \mathbf{k} \cdot (v_1 \mathbf{J} + v_2 \tilde{\mathbf{J}}) \sigma_x - \mu \sigma_0. \quad (2.6.2)$$

表 2.6.1: 点群 O_h の生成子の偶パリティの既約表現. 定義は Bilbao Crystallographic Server [84] による. E_g 表現は Bilbao Crystallographic Server とは異なる基底で与えられている.

Irrep	2_{001}	2_{010}	3_{111}^+	2_{110}	$\bar{1}$
A_{1g}	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	1	-1	1
E_g	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
T_{1g}	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
T_{2g}	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

で与えられる [70]. ここで, \mathbf{J} と $\tilde{\mathbf{J}}$ はスピン 3/2 の 4×4 行列であり,

$$J_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.6.3)$$

$$J_y = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.6.4)$$

$$J_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}, \quad (2.6.5)$$

と $\tilde{J}_i \equiv \frac{5}{3} \sum_{j \neq i} J_j J_i J_j - \frac{7}{6} J_i$ より,

$$\tilde{J}_x = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & -5 \\ \sqrt{3} & 0 & -3 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & \sqrt{3} \\ -5 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.6.6)$$

$$\tilde{J}_y = \frac{i}{4} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{3} & 0 & -5 \\ \sqrt{3} & 0 & 3 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & -\sqrt{3} \\ 5 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.6.7)$$

$$\tilde{J}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.6.8)$$

表 2.6.2: 軌道のパリティ σ_μ , 角運動量 \mathbf{J} , 歪み u_{ij} の既約分解. $\tilde{\mathbf{J}}$ と \mathbf{J} は全く同じ表現に属する.

Irrep	Parity	Angular momentum	Strain
A_{1g}	σ_0, σ_z	1	$u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}$
E_g		$(2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2, -\sqrt{3}(J_x^2 - J_y^2))$	$(2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy}, -\sqrt{3}(u_{xx} - u_{yy}))$
T_{1g}		(J_z, J_x, J_y)	$(u_{xy} - u_{yx}, u_{yz} - u_{zy}, u_{zx} - u_{xz})$
T_{2g}		$(J_x J_y + J_y J_x, J_y J_z + J_z J_y, J_z J_x + J_x J_z)$	$(u_{xy} + u_{yx}, u_{yz} + u_{zy}, u_{zx} + u_{xz})$
A_{1u}	σ_x, σ_y		

で与えられている. さらに σ_0 と σ_i は, それぞれ単位行列と i 番目のパウリ行列であり, 軌道のパリティを表す (すなわち, パウリ行列の基底は偶パリティと奇パリティの 2 つの軌道である). ここで, アンチペロブスカイトがもつ点群 O_h の生成子の表現をいくつか Bilbao Crystallographic Server をもとに表 2.6.1 に示した. (2.6.2) 式を見ると分かるように, 常伝導状態での対称操作の表現は 8×8 行列で与えられる. したがって, 対称性だけから具体的なモデルを構築することは一般的には複雑となる. しかしながら, 実用上は, 文献 [70] に示されているように, 結晶対称性を反映した具体的なモデル (ペアポテンシャルや外部摂動を含む) を構築するのに, パウリ行列 σ_μ とスピン 3/2 の行列 $\mathbf{J}, \tilde{\mathbf{J}}$ を用いるだけで十分である. 興味深いことに, $\mathbf{J}, \tilde{\mathbf{J}}$ は角運動量と同じ既約表現に属し, それゆえ点群 O_h においてはこれらを角運動量として見なすことができる. また今のモデルでは σ_0, σ_z はスカラー (全対称表現) であり, σ_x, σ_y は擬スカラー (空間反転に対してのみ奇パリティ) である [70]. 特に σ_y は時間反転対称性を破っていることに注意する. これらは表 2.6.2 にまとめたように, 点群 O_h の既約表現へ既約分解することができる.

歪みハミルトニアン

分類理論の節で述べたように, 対称化されていない歪みテンソルは $u_{ij} = \partial_i u_j$ で与えられる. \mathbf{u} は格子変位場である. これらはバルクにおいて角運動量演算子 (\mathbf{J} または $\tilde{\mathbf{J}}$) を 2 乗した演算子 (時間反転対称性と空間反転対称性をもつ演算子) と結合する. 対称性による制約から, 歪みテンソルと結合する角運動量の 2 乗の演算子は同じ既約表現に属していなければならない. したがって, 表 2.6.2 より可能な, バルクの 8×8 歪みハミルトニアンとして

$$(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz})(1), \quad (2.6.9)$$

$$(2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy})(2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2) + 3(u_{xx} - u_{yy})(J_x^2 - J_y^2), \quad (2.6.10)$$

$$(u_{xy} + u_{yx})(J_x J_y + J_y J_x) + (u_{yz} + u_{zy})(J_y J_z + J_z J_y) + (u_{zx} + u_{xz})(J_z J_x + J_x J_z) \quad (2.6.11)$$

が得られる. パウリ行列の部分は全て単位行列が掛かっている (σ_x, σ_y は空間反転に対して奇パリティである. さらに最も簡単なモデルを考えたいため, σ_z が掛かった項は考えなかった). 実は, これらの歪みハミルトニアンをマヨラナゼロエネルギー固有状態を用いて表面に射影して得られる行列のうち, いずれかが (2.5.3) 式と一致する. 本研究と直接関係はないが, T_{1g} 表現の角運動量 (J_x, J_y, J_z) について触れておこう. これらは時間反転対称性を破っているため, 歪みと直接は結合しない. しかし時間変化する動的歪みに対しては, $(\dot{u}_{xy} - \dot{u}_{yx})J_z + (\dot{u}_{yz} - \dot{u}_{zy})J_x + (\dot{u}_{zx} - \dot{u}_{xz})J_y = \nabla \times \dot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{J}$ のような結合が可能となる. これはスピン 3/2 渦度結合に他ならない [85].

トポロジカル不変量と2対のマヨラナクラマース対

先行研究 [70] の結果と前節で得られた分類結果を用いて、2対のマヨラナクラマース対と結合可能な摂動（外部歪み）について明らかにする．考えるのは、 $p4m$ の対称性をもつ (001) 面である．(2.6.2) 式中のパラメーターとして $-1/3 < v_2/v_1 < 1/2$ を選ぶと、4回回転対称性 $D(C_4)$ の固有空間のうち、 $e^{\mp i\pi/4}$ の空間では $-W^1[C_4] = W^4[C_4] = 1$ の巻き付き数が存在し、 $e^{\mp i3\pi/4}$ の空間では $-W^2[C_4] = W^3[C_4] = 1$ の巻き付き数が存在する．これらは、角運動量 $J = 1/2$ のフェルミ面と $J = 3/2$ のフェルミ面からの寄与で与えられている．したがって、 $N[C_4] = (1/2) \sum_{i=1}^4 |W^i[C_4]| = 2$ である．一方で、表面には2回回転対称性も存在するが、それで定義できる巻き付き数は $W^1[C_2] = W^2[C_4] + W^4[C_4] = 0$ 、 $W^2[C_2] = W^1[C_4] + W^3[C_4] = 0$ となる．以上より、 Sr_3SnO の (001) 面において、 C_4 対称性で保護された2対のマヨラナクラマース対が存在し、表 2.5.1 より、それらが形成するマヨラナ電気四極子の対称性は $B_1 + B_2$ である．すなわち、 $u_{xx} - u_{yy}$ と $u_{xy} + u_{yx}$ の歪みと結合する．以下の数値計算では、実際にこのことを確認する．

2.6.3 数値計算

具体的に計算で用いる歪みハミルトニアンは、(2.6.9) – (2.6.10) 式から

$$H_{\text{bulk}, E_g} = \alpha_E \left[(2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2)(2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy}) + 3(J_x^2 - J_y^2)(u_{xx} - u_{yy}) \right] \tau_z \quad (2.6.12)$$

与えられる．(2.6.9) 式の歪み ($u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}$) は A_{1g} 表現に属しており、単にフェルミ準位といったパラメーターを変化させるだけの摂動である．また (2.6.11) 式の歪みも考えることが出来るが、歪みによるギャップの有無自体は $u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}$ の場合と同様の結果になる．一方で上式の歪みは E_g 表現に属するため、同じ E_g 表現の演算子と結合している．各々の項は (001) 表面において、それぞれ点群 C_{4v} の A_1 表現 ($u_{zz}, u_{xx} + u_{yy}$) と B_1 表現 ($u_{xx} - u_{yy}$) に属する歪みである．すなわち、表面に存在する2対のマヨラナクラマース対と結合する歪みは B_1 表現の $u_{xx} - u_{yy}$ の項である．

BdG ハミルトニアン (2.6.2) 式から得られる、(001) 方向に表面を作った有限サイズハミルトニアンのエネルギースペクトルを図 2.6.2 に示した．図 (a) は歪みがないとき ($\alpha_E = 0$) のエネルギースペクトルであり、 $\bar{\Gamma}$ 点 ($k_x = k_y = 0$) に2対のマヨラナクラマース対が現れている．この系に (2.6.12) 式の歪みハミルトニアンを印加すると、 $2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy} \neq 0$ 、 $u_{xx} - u_{yy} = 0$ の場合には系の対称性は変化せず、2対のマヨラナクラマース対には影響がないので図 (b) のようなギャップレスのままのスペクトルとなる．一方で、 $2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy} = 0$ 、 $u_{xx} - u_{yy} \neq 0$ の場合には、4回回転対称性は破れ、図 (c) のようなギャップが開いたスペクトルが得られる．これらの結果は表 2.5.1 と整合している．

2.7 結論

本研究では、トポロジカル結晶超伝導体表面における2対のマヨラナクラマース対が形成する電気多極子と歪みとの結合理論を確立した．特に、2対のマヨラナクラマース対と結合する歪みテンソルとバルクの超伝導対称性との関係を系統的に示した．この関係は、トポロジカル結晶超伝導体表面で印加された歪みの効果を、予測することを容易とする．最も簡単な例として、空間的に一様な静的歪みを印加した際に、2対のマヨラナクラマース対は対応する電気多極子の存在によってギャップを開く．この効果は具体的に Sr_3SnO のモデルを用いて確認した．これらの結果は、例え

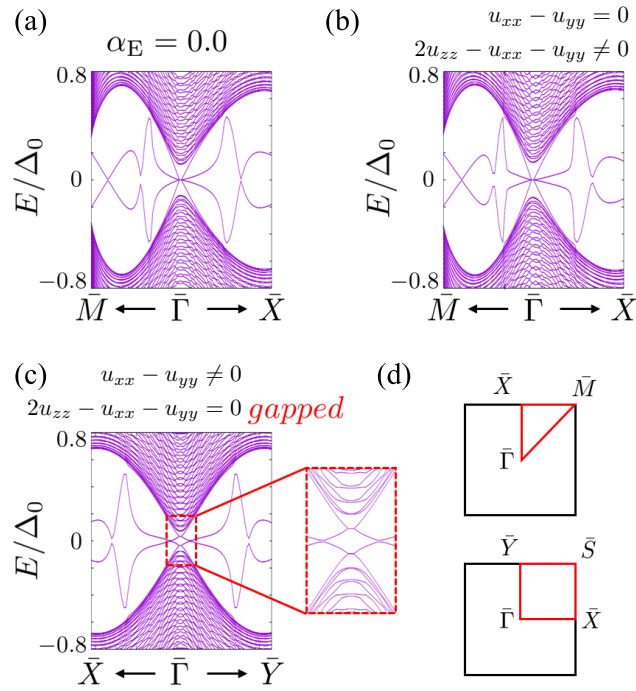


図 2.6.2: Sr_3SnO の有効モデル (2.6.2) 式から得られる有限サイズハミルトニアンのエネルギースペクトル. (a) 歪みを印加していない場合 ($\alpha_E = 0$). 2 対のマヨラナクラマース対は $\bar{\Gamma}$ 点に現れる. この 2 対のマヨラナクラマース対は歪み (b) $2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy}$ の下ではギャップレスのままだが, 歪み (c) $u_{xx} - u_{yy}$ に対してはギャップを開く. それぞれのエネルギースペクトルは (d) のように高対称線に沿って描かれている. パラメーターの設定は次の通りである: $m_0 = 1.0$, $\mu = -1.25$, $\alpha = 0.64$, $v_1 = 1.0$, $v_2 = -0.2$, $\Delta_0 = 0.025$, $\alpha_E = 0.02$. (b) に対しては $2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy} = 1$, (c) に対しては $u_{xx} - u_{yy} = 1$.

ば表面において歪みが印加された状況での分光法測定による2対のマヨラナクラマース対の検出法を提案する。すなわち、印加された歪みの対称性と歪みによるマヨラナクラマース対由来のゼロバイアスピークの変化（ゼロエネルギーにギャップが開くため）の関係から、マヨラナクラマース対の存在が示唆できる。加えて電気応答の観測は、マイスナー効果の影響を受けないため、磁気応答の観測に比べて実験し易い利点がある。完全な電気または磁気応答の測定によって、2対のマヨラナクラマース対をもつトポロジカル結晶超伝導体の超伝導対称性は決定されるはずである。本研究では、電氣的な摂動として歪みしか考えなかったが、我々の研究はその他のいかなる電氣的な摂動に対しても用いることのできる理論であることを強調しておこう。

本研究では、電氣的な摂動である歪みと2対のマヨラナクラマース対の結合として、波数の0次（ゼロエネルギーモード）の寄与しか考えなかった。また結合定数も有限である（ $\alpha_E \neq 0$ ）として計算を行った。これらの仮定は対称性からくる要請を満たし、このような結合は必然的に存在する。しかしながら、本研究のような有効モデルを用いた議論は現象の理解を容易にする一方で、マヨラナクラマース対と歪みとの結合の微視的機構（結合定数の定量的な評価）は出来ない。これを明らかにするには、より高エネルギーのモデル、すなわち、バルクの理論から出発する必要がある。これは今後の展望として解決されるべき重要な課題である。

最後に、次章と直接関係する興味深い結合について述べておく。これまで考えてきた摂動は全て静的な歪みであった。しかしながら、空間的に非一様な動的歪み（例えば超音波や表面弾性波）と2対のマヨラナクラマース対との結合も存在しうる。その結合は例えば $H_{\text{sound}}(t) = -\int d^2x \sum_{i=1}^2 \alpha_{\Gamma_i} \psi(\mathbf{x}, t)^T \mathcal{O}_{\Gamma_i} \psi(\mathbf{x}, t) u_{\Gamma_i}(\mathbf{x}, t)$ のように書くことができる。この結合によって、熱あるいはスピン輸送が生じると期待できる。特にスピン流と歪みの対称性（既約表現）は同じため、動的格子歪みを用いたスピン流の駆動が可能である。この現象を次章で明らかにする。

第3章 マヨラナ準粒子の動的格子歪みに対するスピン流応答

3.1 導入

マヨラナ粒子は3次元空間を相対論的に運動する電荷中性の粒子である。一方で、トポロジカル超伝導体上では、2種類のマヨラナ（準）粒子がギャップレスなアンドレーエフ束縛状態として現れる [7, 9, 11, 54–57]。1つ目は空間に0次元的に局在したマヨラナ準粒子であり、ナノワイヤの両端 [8, 15, 16, 86–89] やトポロジカル超伝導体における渦糸の中心 [90–93] に現れる。このようなマヨラナ準粒子は非可換統計性に従い、フォールトトレラントな量子計算への応用から広く研究されている [12, 13]。

ここで、1つの疑問が湧き上がる。すなわち、空間に0次元的に局在したマヨラナ準粒子に対して、空間的に広がった1次元または2次元のマヨラナ準粒子特有の物理現象は何かということである。代表的な例として、トポロジカル超伝導体表面における半整数熱量子ホール効果が挙げられる [94–96]。半整数という性質はマヨラナ準粒子が熱輸送していることに起因した特徴である。半整数熱量子ホール効果は、マヨラナ準粒子の“駆動力”として熱勾配を用いた空間2次元に広がったマヨラナ準粒子特有の現象である。ところで超伝導体では、電荷保存則が破れているため、その性質を調べるのに電場を用いることが出来ない。その一方で、超伝導対称性の同定や超伝導ギャップの温度依存性を調べるのに [97]、超音波減衰に代表されるように弾性波を用いた研究は積極的に行われてきた [98, 99]。そのため我々も、トポロジカル超伝導体表面においてマヨラナ準粒子を駆動するのに、動的格子歪みを用いることを考えた。

マヨラナ準粒子が時間反転対称性をもつとき、それらは単独では現れず、クラマース対（マヨラナクラマース対）を組んで現れる。時間反転対称性により、単一のマヨラナクラマース対は格子歪みを伴う弾性波のような電気的な外場に対して安定に存在する。しかしながら、“2対”のマヨラナクラマース対は通常のフェルミオンとは異なる豊かな電気多極子自由度をもつことを我々は明らかにし [51, 53, 100]、それらが静的な歪みに対して応答することも具体的に示した [100]。2対のマヨラナクラマース対は時間反転対称性に加え、必ず結晶対称性にも保護されているため、我々は特にこのようなトポロジカル超伝導体をトポロジカル結晶超伝導体と呼んでいる。

本研究では、3次元トポロジカル超伝導体表面における、空間的に非一様な格子歪みによって誘起される2対のマヨラナクラマース対の輸送現象について明らかにする。我々は先行研究から、(001)面に2つのマヨラナクラマース対とそれらが形成する電気四極子が存在するとされる [70, 100]、アンチペロブスカイト超伝導 Sr_3SnO の表面を考える [69]。出発点となるのは、(001)面の点群（文様群）対称性を反映した 4×4 ディラックハミルトニアンである。このとき、表面において図 3.1.1 のように、動的歪みによって誘起されるマヨラナスピン流を具体的に明らかにする。結果として、2対のマヨラナクラマース対の分散にギャップが存在しないときは、スピン流は不純物緩和に依存しない内因性の効果で引き起こされることを発見した。また、表面に接合された磁化の存在によって分散にギャップが開いているときは、マヨラナスピン流には2種類の振動数依存領域が存在し、

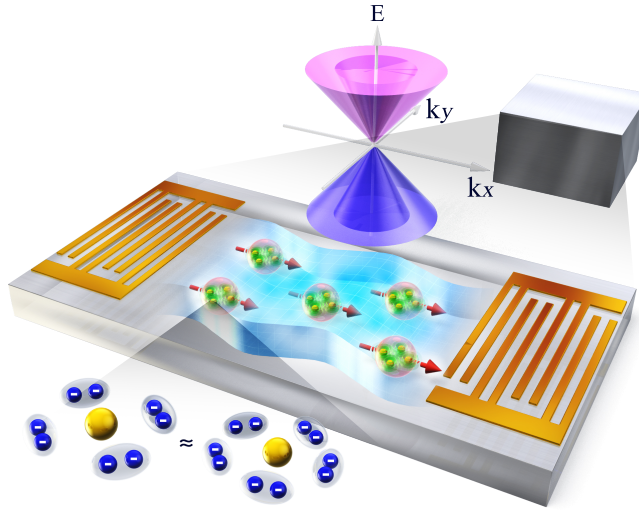


図 3.1.1: 3次元トポロジカル超伝導体表面において、動的格子歪みによるマヨラナスピ流が流れている様子を表した図。表面には4つのマヨラナ準粒子が存在し、それらは2対のマヨラナクラマース対を作っている。これら2対のマヨラナクラマース対が動的格子歪みと結合する電気四極子を形成し、その多極子によるスピ流が歪みによって生成される。

それぞれマヨラナ準粒子のバンド構造を反映した特徴をもつ。そのため、マヨラナスピ流はバルクに流れているスピ流や表面を偶発的に流れるスピ流（接合した物質からのスピ流）とは明確に区別することが出来る。マヨラナスピ流はバルク励起を伴わない、熱勾配以外の外場によって引き起こされる2次元のマヨラナ準粒子特有の新しい現象である。それゆえ我々の研究は、マヨラナ準粒子の新しい検出法を提案するだけでなく、マヨラナ準粒子由来の輸送研究を進展させる契機となりうる。

本題に入る前に、トポロジカル超伝導体表面のマヨラナクラマース対がもつ電磁氣的性質についておさらいしておこう。まず、マヨラナ準粒子が単独で存在するときには、それは粒子正孔対称性（電荷中性条件）によって保護されており、いかなる外場に対しても極めて安定に存在する。もし、トポロジカル超伝導体が時間反転対称性をもつ場合は、2つのマヨラナ準粒子は1つのクラマース対を組む。このマヨラナクラマース対は時間反転対称性によって保護されているため、一般に磁氣的な外場のみ応答し、電氣的な外場に対しては依然安定に存在する。しかしながら、結晶対称性も考慮すると、2対のマヨラナクラマース対が安定に存在する場合があります、それらは結晶対称性を破る電氣的な外場に対して応答する。空間的に一様な外場と N 個のマヨラナクラマース対との結合は

$$\hat{H}_{\text{surf,ex}} = -\hat{O}F, \quad \hat{O} = \frac{1}{2} \int d^2x \sum_{ss'} \hat{\psi}_s(\mathbf{x})(A_F)_{ss'}\hat{\psi}_{s'}(\mathbf{x}), \quad (3.1.1)$$

で与えられる [100]。ここで、 $\hat{\psi}_s(\mathbf{x})$ ($s = 1, \dots, 2N$) はマヨラナ場の演算子で $\hat{\psi}_s^\dagger(\mathbf{x}) = \hat{\psi}_s(\mathbf{x})$ を満たしている（ここでは簡単のため荷電共役変換を単位行列とした）。 A_F は外場 F と共役な物理量で $\{\hat{\psi}_s(\mathbf{x}), \hat{\psi}_{s'}(\mathbf{x}')\} = \delta_{ss'}\delta^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ であることから反対称のエルミート行列で与えられる。 A_F が 2×2 行列である、すなわち、1対のマヨラナクラマース対のみが存在するときは、 $A_F = \sigma_y$ なる行列のみが存在し、これは時間反転 $\Theta_{\text{surf}} = (-i\sigma_y K)$ に対して $\Theta_{\text{surf}}A_F\Theta_{\text{surf}}^{-1} = -A_F$ を満たしている。ここで K は複素共役演算子である。このため、1対のマヨラナクラマース対は磁氣的な

外場とのみ結合できる．一方で， A_F が 4×4 行列，すなわち，2 対のマヨラナクラーマース対が存在するときは， $\Theta_{\text{surf}} A_F \Theta_{\text{surf}}^{-1} = A_F$ を満たす A_F が存在し，(3.1.1) 式より 2 対のマヨラナクラーマース対は電気的な外場と結合できる．この 2 対のマヨラナクラーマース対から形成される電気多極子は超伝導対称性と表面に存在する結晶対称性（文様群）によって様々な対称性をもちうる．我々の先行研究では [100]，それぞれの文様群に対して空間的に一様な歪みと結合する電気多極子を明らかにした．

3.2 アンチペロブスカイト表面の有効モデルの構成

これより，前章でも現れた先行研究 [53, 100] のマヨラナクラーマース対に対する一般理論を用いることで，アンチペロブスカイト超伝導 Sr_3SnO の (001) 面に現れる 2 対のマヨラナクラーマース対に対する有効ハミルトニアンを導出する．アンチペロブスカイトは空間群 $Pm\bar{3}m$ (No. 221) の対称性をもち [101, 102]，対応する点群対称性は O_h である．すなわち，(001) 面は文様群 $p4m$ に属し，点群 C_{4v} の対称性をもつ．(001) 面上では，ペアポテンシャルが A_{1u} 表現の対称性をもつとき， $\bar{\Gamma}$ 点において，4 回回転対称性のみに保護された 2 対のマヨラナクラーマース対が存在することが明らかにされている [70]．

2 対のマヨラナクラーマース対は BdG 方程式のゼロエネルギー状態 ($H_{\text{BdG}}(k_x = 0, k_y = 0, z)\psi = 0$) を基に構築される．ここで $\bar{\Gamma}$ 点上の半無限系 ($z \leq 0$) を考えており，2 対のマヨラナクラーマース対は $\bar{\Gamma}$ 点における小群の 2 重かつ 4 次元の時間反転不変な表現として与えられる．今，4 回回転対称性に保護されたトポロジカル不変量のみが有限の場合を考えているので [70, 100]， Sr_3SnO の (001) 面に現れる 2 対のマヨラナクラーマース対の表現は $\bar{\Gamma}_6 \oplus \bar{\Gamma}_7$ である [80].¹

3.2.1 対称操作

$p4m$ の小群における生成元の表現は $\bar{\Gamma}_6 \oplus \bar{\Gamma}_7$ を考えるなら，

$$D_{\{C_{4z}|\mathbf{0}\}} = \begin{pmatrix} e^{i3\pi/4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i3\pi/4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\pi/4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix} = \frac{-1}{\sqrt{2}}(s_0\tau_3 - is_3\tau_3), \quad (3.2.1)$$

$$D_{\{\sigma(xz)|\mathbf{0}\}} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\pi/4} & 0 & 0 \\ e^{-i3\pi/4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i3\pi/4} \\ 0 & 0 & e^{i\pi/4} & 0 \end{pmatrix} = \frac{i}{\sqrt{2}}(s_2\tau_3 - s_1\tau_3). \quad (3.2.2)$$

で与えられる [80]．カイラル変換の表現行列 Γ は $\Gamma D_g = \chi_g D_g \Gamma$ を満たす [53]．ここで χ_g はペアポテンシャルの g に対する既約表現を表す．今我々はバルクにおいて，点群 O_h における A_{1u} 表現のペアポテンシャルを考えている．そのため，(001) 面においては，点群 C_{4v} の A_2 表現に属して

¹空間群 $P4mm$ の既約表現は文様群 $p4m$ の既約表現と整合したデータベースを参照している．

表 3.2.1: バルクの超伝導対称性が A_{1u} 表現のときの表面 $p4m$ における行列, 運動量, 歪み, スピン流の既約分解. 行列は変換 g に対して $\eta \rightarrow D_g^\dagger \eta D_g$ のように変換される. (η_i, η_j) は C_{4z} による変換では $(\eta_i, \eta_j) \rightarrow (-\eta_j, \eta_i)$, $\sigma(xz)$ による変換では $(\eta_i, \eta_j) \rightarrow (-\eta_i, \eta_j)$ のように変換される. Electric/magnetic と PHS はそれぞれ時間反転と荷電共役変換に対するパリティを表す. $u_{ij}(\mathbf{x}) = \partial_i u_j(\mathbf{x})$ であり, \mathbf{u} は格子変位場を表す. j_i^α は i 軸に沿ったスピン $\sigma^\alpha/2$ 流を示す.

IR	electric w/ PHS	electric w/o PHS	magnetic w/ PHS	magnetic w/o PHS	momentum	Strain	Spin current
A_1		$s_0\tau_0, s_0\tau_3$			$k_x^2 + k_y^2$	$u_{xx} + u_{yy}$	$j_y^x - j_x^y$
A_2			$s_3\tau_0, s_3\tau_3$			$u_{xy} - u_{yx}$	$j_x^x + j_y^y$
B_1	$s_3\tau_1$			$s_3\tau_2$	$k_x^2 - k_y^2$	$u_{xx} - u_{yy}$	$j_y^x + j_x^y$
B_2	$s_0\tau_2$			$s_0\tau_1$	$k_x k_y$	$u_{xy} + u_{yx}$	$j_x^x - j_y^y$
E		(η_7, η_8)	(η_5, η_6)	$(\eta_1, \eta_2), (\eta_3, \eta_4)$	(k_x, k_y)	(u_{xz}, u_{yz})	$(j_y^z, -j_x^z)$

いる. すなわち, $\chi_{C_{4z}} = 1$ と $\chi_{\sigma(xz)} = -1$ である. これらの条件を満たすカイラル変換は

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = s_3\tau_3. \quad (3.2.3)$$

である. ここで, もう1つ別の表現として $\Gamma = s_3\tau_0$ が存在することも気付く. しかしながら, この表現は今考えているトポロジカル不変量に対する条件 (4 回回転対称性に保護されたトポロジカル不変量のみが有限) を満たさないため除かれる (付録 B.0.3 も参照). 時間反転演算子 Θ は $\Theta = s_2\tau_3 K$ で与えられる. 粒子正孔演算子は $C = i\Gamma\Theta$ で与えられるので,

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} K = s_1\tau_0 K. \quad (3.2.4)$$

となる. 以上の表現行列を用いれば, 行列 $s_\mu\tau_\nu$ を点群 C_{4v} に対して既約分解することができる. その結果を表 3.2.1 にまとめた.

3.2.2 ハミルトニアン

ハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ の g に対する変換は

$$D_g H(\mathbf{k}) D_g^\dagger = H(g\mathbf{k}), \quad (3.2.5)$$

として与えられる. ここで運動量 \mathbf{k} は g の操作の下で $g\mathbf{k}$ と変換される. すなわち, $C_4\mathbf{k} = (-k_y, k_x)$, $\sigma(xz)\mathbf{k} = (k_x, -k_y)$ である. ハミルトニアンは全対称表現であるため, 以下のハミルトニアンが得られる.

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger H(\mathbf{k}) \hat{\psi}_{\mathbf{k}}, \quad (3.2.6)$$

$$H(\mathbf{k}) = v_1(\eta_1 k_y - \eta_2 k_x) + v_2(\eta_3 k_y - \eta_4 k_x) - M_z \sigma_z,$$

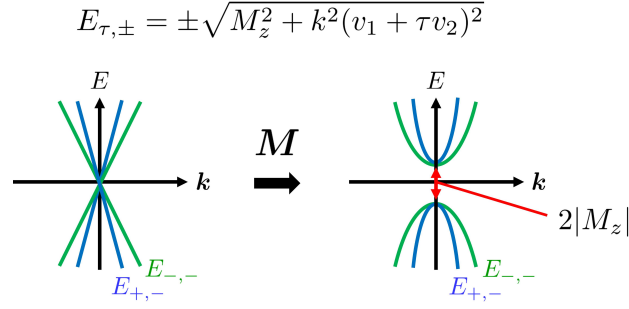


図 3.2.1: (3.2.9) 式のエネルギー分散. 左が $M_z = 0$, 右が $M_z \neq 0$ の時に対応する. 磁化によってマヨラナクラマース対の分散にギャップが開く.

ここで, $\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger = (\hat{\psi}_{1\mathbf{k}}^\dagger, \hat{\psi}_{2\mathbf{k}}^\dagger, \hat{\psi}_{3\mathbf{k}}^\dagger, \hat{\psi}_{4\mathbf{k}}^\dagger)$, $\hat{\psi}_{\mathbf{k}} = {}^t(\hat{\psi}_{1\mathbf{k}}, \dots, \hat{\psi}_{4\mathbf{k}})$ はマヨラナ準粒子の生成・消滅演算子であり, (3.2.4) 式から $\hat{\psi}_{1\mathbf{k}}^\dagger = \hat{\psi}_{2-\mathbf{k}}$, $\hat{\psi}_{3\mathbf{k}}^\dagger = \hat{\psi}_{4-\mathbf{k}}$ を満たす. またハミルトニアンは粒子正孔対称性 $CH(\mathbf{k})C^{-1} = -H(-\mathbf{k})$ をもつ. これらの演算子の交換関係は

$$\{\hat{\psi}_{i\mathbf{k}}, \hat{\psi}_{j\mathbf{k}'}^\dagger\} = \delta_{ij}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad \{\hat{\psi}_{i\mathbf{k}}, \hat{\psi}_{j\mathbf{k}'}\} = (s_1\tau_0)_{ij}\delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}. \quad (3.2.7)$$

である. (3.2.6) 式の最後の項は, 後ほど説明するように, マヨラナ準粒子がもつスピンと磁化との結合を表す項である. 以上のようにして, 表面 $p4m$ の対称性と時間反転・粒子正孔対称性を全て満たす 2 対のマヨラナクラマース対に対する有効モデルが得られる.

ここでハミルトニアンの構造に着目する. ハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ は τ_3 と交換するため, $\tau_3 = \pm 1$ の固有値に対して $H = H_+ \oplus H_-$ のように 2 つの固有空間に分割することができる. この部分ハミルトニアンは特に

$$H_{\tau=\pm}(\mathbf{k}) = v_\tau(s_+k_y + s_-k_x) + M_z s_3, \quad v_\tau = v_1 + \tau v_2, \quad s_\pm = \frac{s_1 \pm s_2}{\sqrt{2}}. \quad (3.2.8)$$

と書くことが出来る. その固有値 $\pm E_\tau(\mathbf{k})$ は

$$E_\tau(\mathbf{k}) = \sqrt{v_\tau^2 k^2 + M_z^2}. \quad (3.2.9)$$

で与えられる (図 3.2.1). 正のエネルギー固有値に対応する固有ベクトルは

$$|\mathbf{k}\tau\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i(\pi/4 - \phi_{\mathbf{k}})} \sqrt{1 + \frac{M_z}{E_\tau(\mathbf{k})}} \\ \sqrt{1 - \frac{M_z}{E_\tau(\mathbf{k})}} \end{pmatrix}, \quad (3.2.10)$$

である. ここで $\phi_{\mathbf{k}}$ は \mathbf{k} の位相を表す. 粒子正孔対称性により, 負の固有値 $-E_\tau(\mathbf{k})$ に対する固有ベクトルは $s_1 |-\mathbf{k}\tau\rangle^*$ で与えられる. ハミルトニアン演算子は, これらのエネルギー固有ベクトルを用いて

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\tau} \hat{\psi}_{\mathbf{k}\tau}^\dagger H_\tau(\mathbf{k}) \hat{\psi}_{\mathbf{k}\tau} = \sum_{\mathbf{k}\tau} E_\tau(\mathbf{k}) \gamma_{\mathbf{k}\tau}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\tau}, \quad (3.2.11)$$

と書ける．ここで， $\gamma_{\mathbf{k}\tau} = \langle \mathbf{k}\tau | \hat{\psi}_{\mathbf{k}\tau} \rangle$ はボゴリューボフ準粒子である.. フェルミ分布は

$$\langle \gamma_{\mathbf{k}\tau}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}'\tau'} \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\tau\tau'} f(E_\tau(\mathbf{k})) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\tau\tau'} \frac{1}{e^{\beta E_\tau(\mathbf{k})} + 1}. \quad (3.2.12)$$

で与えられる．

3.2.3 スピン

スピン演算子 σ^x, σ^y は粒子正孔をもつ E 表現に属する行列であり，一方， σ^z は粒子正孔をもつ A_2 表現に属する行列である．それゆえマヨラナ準粒子のもつスピンは

$$\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2} (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z) = \frac{1}{2} (\eta_5, \eta_6, -s_3 \tau_0), \quad (3.2.13)$$

で表され， $\{\sigma^i, \sigma^j\} = 2\delta^{ij}$ と $[\sigma^i, \sigma^j] = 2i\epsilon^{ijk} \sigma^k$ を満たす．

行列 η_i は以下で定義される．

$$\begin{aligned} \eta_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (s_1 \tau_0 + s_2 \tau_0), & \eta_2 &= \frac{-1}{\sqrt{2}} (s_1 \tau_0 - s_2 \tau_0), & \eta_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (s_1 \tau_3 + s_2 \tau_3), & \eta_4 &= \frac{-1}{\sqrt{2}} (s_1 \tau_3 - s_2 \tau_3), \\ \eta_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (s_1 \tau_2 - s_2 \tau_2), & \eta_6 &= \frac{-1}{\sqrt{2}} (s_1 \tau_2 + s_2 \tau_2), & \eta_7 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (s_1 \tau_1 - s_2 \tau_1), & \eta_8 &= \frac{-1}{\sqrt{2}} (s_1 \tau_1 + s_2 \tau_1). \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

3.3 動的格子歪みによって誘起されるスピン流

マヨラナ準粒子に対する不純物平均した温度グリーン関数は

$$G_{\mathbf{k}}^{\text{R/A}}(\epsilon) = [\epsilon - H(\mathbf{k}) - \Sigma^{\text{R/A}}(\epsilon)]^{-1}, \quad (3.3.1)$$

である．ここで自己エネルギーは $\Sigma^{\text{R/A}}(\epsilon) \equiv \mp i\gamma(\epsilon)$ であると仮定した²．ここで粒子正孔対称性から，マヨラナ準粒子に対するフェルミエネルギーは厳密に0であることに注意する．自己エネルギーとグリーン関数に対する粒子正孔対称性はそれぞれ，

$$C \Sigma^{\text{R/A}}(\epsilon) C^{-1} = -\Sigma^{\text{R/A}}(-\epsilon), \quad (3.3.2)$$

$$C G_{\mathbf{k}}^{\text{R/A}}(\epsilon) C^{-1} = -G_{-\mathbf{k}}^{\text{R/A}}(-\epsilon) \quad (3.3.3)$$

で与えられる．それゆえ， $\Sigma^{\text{R/A}}(0) = \mp i\gamma$ と定義される． γ は ϵ の最低次として $\gamma(0) = \gamma$ と定義した．また $\Sigma^{\text{R/A}}(0)$ の実部は粒子正孔対称性より，存在しない．同様に時間反転対称性とカイラル対称性もそれぞれ，

$$\Theta \Sigma^{\text{R/A}}(\epsilon) \Theta^{-1} = \Sigma^{\text{A/R}}(\epsilon), \quad \Theta G_{\mathbf{k}}^{\text{R/A}}(\epsilon) \Theta^{-1} = G_{-\mathbf{k}}^{\text{A/R}}(\epsilon), \quad (3.3.4)$$

$$\Gamma \Sigma^{\text{R/A}}(\epsilon) \Gamma^{-1} = -\Sigma^{\text{A/R}}(-\epsilon), \quad \Gamma G_{\mathbf{k}}^{\text{R/A}}(\epsilon) \Gamma^{-1} = -G_{\mathbf{k}}^{\text{A/R}}(-\epsilon) \quad (3.3.5)$$

²今の場合，不純物の効果を手で取り入れているため，結果に直接は関係しないが，ここでは磁性不純物を暗に考えていることに注意する．なぜなら，マヨラナ準粒子は電荷をもたず，不純物ポテンシャルの影響を受けないためである．より正確には，マヨラナ準粒子は全対称表現に属する電気多極子をもたないため（電荷中性条件），同じ全対称表現に属する（不純物との）電氣的な相互作用もちえないということである．

で与えられる。粒子正孔対称性とは異なり、時間反転やカイラル変換では遅延グリーン関数と先進グリーン関数が入れ替わる。以下では不純物緩和がゼロでない値をとり、 $\omega \ll \tau^{-1} = 2\gamma$ を仮定する。 ω と τ はそれぞれ外場の振動数とマヨラナ準粒子の緩和時間を表す。

3.3.1 スピン流

スピン流演算子は (3.2.13) 式から

$$\hat{j}_i^\alpha(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger \frac{\{\sigma^\alpha/2, v_i\}}{2} \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}, \quad v_i = \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_i}, \quad (3.3.6)$$

で定義する。いくつか具体的に書くと

$$\hat{j}_x^x = -\hat{j}_y^y = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger (v_1 s_0 \tau_2) \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}, \quad (3.3.7)$$

$$\hat{j}_x^y = \hat{j}_y^x = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger (-v_2 s_3 \tau_1) \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}, \quad (3.3.8)$$

$$\hat{j}_x^z = \hat{j}_y^z = 0. \quad (3.3.9)$$

である。本研究において着目するのは次の2つであり、それぞれ B_1 表現と B_2 表現に属する。

$$\hat{B}^{(1)}(\mathbf{q}) \equiv \hat{j}_y^x(\mathbf{q}) + \hat{j}_x^y(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger [-v_2 s_3 \tau_1] \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger [b^{(1)}] \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}, \quad (3.3.10)$$

$$\hat{B}^{(2)}(\mathbf{q}) \equiv \hat{j}_x^x(\mathbf{q}) - \hat{j}_y^y(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger [v_1 s_0 \tau_2] \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger [b^{(2)}] \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}. \quad (3.3.11)$$

我々のモデルは、バルクのペアポテンシャルが点群 O_h の A_{1u} 表現に属しており、表面は点群 C_{4v} の対称性をもつモデルである。このとき、2対のマヨラナクラマース対は表 3.2.1 に示すように、粒子正孔対称性をもった特定の電気・磁気多極子をもつ。例えば磁気多極子は (3.2.13) 式でも示したように行列 σ で表され、一方で、電気多極子は B_1 表現に属する $s_3 \tau_1$ と B_2 表現に属する $s_0 \tau_2$ によって表される。これら2つの行列が次節で示すように動的歪みと結合する。

3.3.2 動的歪みに対するスピン流応答

動的歪みは対称化されていない歪みテンソル $u_{ij}(\mathbf{r}, t) = \partial_i u_j(\mathbf{r}, t)$ で与えられ、同じ既約表現に属するマヨラナ電気四極子と結合する。表 3.2.1 から、時間反転と粒子正孔対称性の両方をもつ演算子は B_1 表現と B_2 表現に属する2つの演算子のみである。これらの演算子が以下のように印加された動的歪みと結合する。

$$\hat{H}_{\text{ext}}(t) = - \int d^2 \mathbf{r} \left\{ \hat{O}^{(1)}(\mathbf{r}) [u_{xx}(\mathbf{r}, t) - u_{yy}(\mathbf{r}, t)] + \hat{O}^{(2)}(\mathbf{r}) [u_{xy}(\mathbf{r}, t) + u_{yx}(\mathbf{r}, t)] \right\}, \quad (3.3.12)$$

$$\hat{O}^{(1)}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) (\rho_1 s_3 \tau_1) \hat{\psi}(\mathbf{r}), \quad \hat{O}^{(2)}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) (\rho_2 s_0 \tau_2) \hat{\psi}(\mathbf{r}), \quad (3.3.13)$$

ここで、場の演算子のフーリエ変換は $\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{k}}$ で定義され、 $\hat{O}^{(i)}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) (o^{(i)}) \hat{\psi}(\mathbf{r})$ である。より高次の空間微分の項 (=より高次の波数) まで考えれば、他の歪みモードも現れるが、今の低エネルギー領域では無視する。

歪みに対するスピン流の応答関数は次で定義される.

$$K_{ij}(\mathbf{q}, \omega) \equiv i \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\delta)t} \langle [\hat{B}^{(i)}(\mathbf{q}, t), \hat{O}^{(j)}(-\mathbf{q}, 0)] \rangle, \quad \hat{O}^{(j)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger o^{(j)} \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}, \quad (3.3.14)$$

ここで, ハイゼンベルク表示 $\hat{A}(t) = e^{iHt} \hat{A} e^{-iHt}$ を用い, $\delta \rightarrow +0$ であるとする. また $\langle \dots \rangle = \text{tr}[e^{-H/T} \dots] / \text{tr}[e^{-H/T}]$ である. このときスピン流は

$$\langle \hat{j}_y^x(\mathbf{q}, \omega) + \hat{j}_x^y(\mathbf{q}, \omega) \rangle = K_{11}(\mathbf{q}, \omega) [u_{xx}(\mathbf{q}, \omega) - u_{yy}(\mathbf{q}, \omega)] + K_{12}(\mathbf{q}, \omega) [u_{xy}(\mathbf{q}, \omega) + u_{yx}(\mathbf{q}, \omega)], \quad (3.3.15)$$

$$\langle \hat{j}_x^x(\mathbf{q}, \omega) - \hat{j}_y^y(\mathbf{q}, \omega) \rangle = K_{21}(\mathbf{q}, \omega) [u_{xx}(\mathbf{q}, \omega) - u_{yy}(\mathbf{q}, \omega)] + K_{22}(\mathbf{q}, \omega) [u_{xy}(\mathbf{q}, \omega) + u_{yx}(\mathbf{q}, \omega)]. \quad (3.3.16)$$

で与えられる. 松原表示の応答関数は

$$K_{ij}(\mathbf{q}, i\omega_l) = \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_l \tau} \langle T_\tau (\hat{B}^{(i)}(\mathbf{q}, \tau)) \hat{O}^{(j)}(-\mathbf{q}, 0) \rangle, \quad (3.3.17)$$

であり, $\omega_l = 2l\pi T$ はボゾンに対する松原振動数である. ここからウィックの定理より, 応答関数をよく知られた形に直す訳だが, マヨラナ準粒子の場合は生成演算子と消滅演算子が等価であるため, 注意が必要である.

$$\begin{aligned} K_{ij}(\mathbf{q}, i\omega_l) &= \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_l \tau} \langle T_\tau (\hat{B}^{(i)}(\mathbf{q}, \tau)) \hat{O}^{(j)}(-\mathbf{q}, 0) \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_l \tau} \langle T_\tau \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \alpha}^\dagger(\tau) b_{\alpha\beta}^{(i)} \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \beta}(\tau) \hat{\psi}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \gamma}^\dagger(0) o_{\gamma\eta}^{(j)} \hat{\psi}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \eta}(0) \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_l \tau} \left[-b_{\alpha\beta}^{(i)} o_{\gamma\eta}^{(j)} \langle T_\tau \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \alpha}^\dagger(\tau) \hat{\psi}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \gamma}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \beta}(\tau) \hat{\psi}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \eta}(0) \rangle \right. \\ &\quad \left. + b_{\alpha\beta}^{(i)} o_{\gamma\eta}^{(j)} \langle T_\tau \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \alpha}^\dagger(\tau) \hat{\psi}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \eta}(0) \rangle \langle T_\tau \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \beta}(\tau) \hat{\psi}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \gamma}^\dagger(0) \rangle \right]. \end{aligned} \quad (3.3.18)$$

最初の項は

$$\begin{aligned} &\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} b_{\alpha\beta}^{(i)} o_{\gamma\eta}^{(j)} \langle T_\tau \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \alpha}^\dagger(\tau) \hat{\psi}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \gamma}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \beta}(\tau) \hat{\psi}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \eta}(0) \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (s_1 \tau_0)_{\alpha'\alpha} b_{\alpha\beta}^{(i)} (s_1 \tau_0)_{\beta\beta'} o_{\gamma\eta}^{(j)} \langle T_\tau \hat{\psi}_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \alpha'}(\tau) \hat{\psi}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \gamma}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau \hat{\psi}_{-\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \beta'}(\tau) \hat{\psi}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \eta}(0) \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} b_{\beta\alpha}^{(i)} o_{\gamma\eta}^{(j)} [G_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}(\tau)]_{\alpha, \gamma} [G_{-\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}(-\tau)]_{\eta, \beta} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[b^{(i)} G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}(\tau) o^{(j)} G_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}(-\tau) \right], \end{aligned}$$

となる. ここで, 温度グリーン関数の定義 $[G_{\mathbf{k}}(\tau)]_{\alpha\beta} = -\langle T_\tau \hat{\psi}_{\mathbf{k}, \alpha}(\tau) \hat{\psi}_{\mathbf{k}, \beta}^\dagger(0) \rangle$ と粒子正孔対称性 $\hat{\psi}_{\mathbf{k}\alpha} = (s_1 \tau_0)_{\alpha\alpha'} \hat{\psi}_{-\mathbf{k}\alpha'}^\dagger$, $\hat{\psi}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger = (s_1 \tau_0)_{\alpha\alpha'} \hat{\psi}_{-\mathbf{k}\alpha'}$, $(s_1 \tau_0) b^{(i)} (s_1 \tau_0) = -(b^{(i)})^* = -(b^{(i)})^T$ を用いた.

(3.3.18) 式の第2項も上式と同じ形になる。したがって、

$$K_{ij}(\mathbf{q}, i\omega_l) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_l \tau} \text{tr} \left[b^{(i)} G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}(\tau) o^{(j)} G_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}(-\tau) \right] \quad (3.3.19)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} T \sum_n \text{tr} \left[b^{(i)} G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}(i\epsilon_n + i\omega_l) o^{(j)} G_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}(i\epsilon_n) \right]. \quad (3.3.20)$$

が得られる。ここで $G(\tau) = T \sum_n e^{-i\epsilon_n \tau} G(i\epsilon_n)$, $\epsilon_n = 2(n+1)\pi T$ である。

今 $\omega \ll \tau^{-1} = 2\gamma$ より、応答関数を ω に関して次のように展開することができる: $K_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = K_{ij}^{(0)}(\mathbf{q}) + \omega K_{ij}^{(1)}(\mathbf{q}) + \dots$. 0次の項 $K^{(0)}$ は平衡成分の寄与であり、本研究では考えない。1次の項 $K^{(1)}$ は非平衡成分の主要な項であり、フェルミ海項 K_{ij}^{sea} とフェルミ表面項 $K_{ij}^{\text{sf}, \text{CC}'}$ に分けることができる [103]:

$$K_{ij}^{(1)}(\mathbf{q}) \equiv K_{ij}^{\text{sf}, \text{RA}}(\mathbf{q}) - \frac{1}{2} \left(K_{ij}^{\text{sf}, \text{RR}}(\mathbf{q}) + K_{ij}^{\text{sf}, \text{AA}}(\mathbf{q}) \right) + K_{ij}^{\text{sea}}(\mathbf{q}), \quad (3.3.21)$$

の各項はそれぞれ

$$K_{ij}^{\text{sea}}(\mathbf{q}) = \frac{i}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\epsilon \lim_{\epsilon' \rightarrow \epsilon} (\partial_{\epsilon'} - \partial_{\epsilon}) \times \left\{ \text{tr} \left[\left(b^{(i)} \right) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon') \left(o^{(j)} \right) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) \right] - \langle \text{R} \leftrightarrow \text{A} \rangle \right\}, \quad (3.3.22)$$

$$K_{ij}^{\text{sf}, \text{RA}}(\mathbf{q}) = \frac{i}{4\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[\left(b^{(i)} \right) G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\text{R}}(0) \left(o^{(j)} \right) G_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\text{A}}(0) \right], \quad (3.3.23)$$

$$K_{ij}^{\text{sf}, \text{CC}}(\mathbf{q}) = \frac{i}{4\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[\left(b^{(i)} \right) G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\text{C}}(0) \left(o^{(j)} \right) G_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{\text{C}}(0) \right], \quad (3.3.24)$$

で定義され、C = R or A である。このときスピン流は

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_y^x(\mathbf{q}, \omega) + \hat{j}_x^y(\mathbf{q}, \omega) \rangle &= (K_{11}^{(0)} + \omega K_{11}^{(1)} + \dots) [u_{xx}(\mathbf{q}, \omega) - u_{yy}(\mathbf{q}, \omega)] \\ &\quad + (K_{12}^{(0)} + \omega K_{12}^{(1)} + \dots) [u_{xy}(\mathbf{q}, \omega) + u_{yx}(\mathbf{q}, \omega)], \end{aligned} \quad (3.3.25)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_x^x(\mathbf{q}, \omega) - \hat{j}_y^y(\mathbf{q}, \omega) \rangle &= (K_{21}^{(0)} + \omega K_{21}^{(1)} + \dots) [u_{xx}(\mathbf{q}, \omega) - u_{yy}(\mathbf{q}, \omega)] \\ &\quad + (K_{22}^{(0)} + \omega K_{22}^{(1)} + \dots) [u_{xy}(\mathbf{q}, \omega) + u_{yx}(\mathbf{q}, \omega)]. \end{aligned} \quad (3.3.26)$$

で与えられる。

3.4 応答関数の具体的な計算

3.4.1 $M_z = 0$ のとき

ここで我々は歪みの波数 q がマヨラナ準粒子の平均自由行程 l に比べて小さいと仮定する。この条件は $q \ll l^{-1}$ と表され、 \mathbf{q} 依存性は無視する。 $b^{(i)}$ と $o^{(j)}$ に対して $i = j$ のとき、それらは全く同じ行列の表現をもつ。すなわち、

$$\begin{aligned} K_{ii}^{\text{sea}} &= \frac{i}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\epsilon \lim_{\epsilon' \rightarrow \epsilon} (\partial_{\epsilon'} - \partial_{\epsilon}) \times \left\{ \text{tr} \left[\left(b^{(i)} \right) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon') \left(o^{(i)} \right) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) \right] - \langle \text{R} \leftrightarrow \text{A} \rangle \right\} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.4.1)$$

もし $i \neq j$ なら, $b^{(i)}$ と $o^{(j)}$ は互いに鏡映対称性 $\sigma(xz)$ に対して異なる符号の指標をもち, 結果として

$$\begin{aligned}
K_{ij}^{\text{sea}} &= \frac{i}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\epsilon \lim_{\epsilon' \rightarrow \epsilon} (\partial_{\epsilon} - \partial_{\epsilon'}) \times \left\{ \text{tr} \left[(b^{(i)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon') (o^{(j)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) \right] - \langle \text{R} \leftrightarrow \text{A} \rangle \right\} \\
&= \frac{i}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\epsilon \lim_{\epsilon' \rightarrow \epsilon} (\partial_{\epsilon} - \partial_{\epsilon'}) \times \left\{ \text{tr} \left[- (b^{(i)}) G_{k_x, -k_y}^{\text{R}}(\epsilon') (o^{(j)}) G_{k_x, -k_y}^{\text{R}}(\epsilon) \right] + \langle \text{R} \leftrightarrow \text{A} \rangle \right\} \\
&= \frac{i}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\epsilon \lim_{\epsilon' \rightarrow \epsilon} (\partial_{\epsilon} - \partial_{\epsilon'}) \times \left\{ \text{tr} \left[- (b^{(i)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon') (o^{(j)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) \right] + \langle \text{R} \leftrightarrow \text{A} \rangle \right\} \\
&= -K_{ij}^{\text{sea}}, \tag{3.4.2}
\end{aligned}$$

となる. それゆえ $K_{ij}^{\text{sea}} = 0$ であり, $K_{12} = K_{21} = 0$ である. また表面項についても

$$K_{ij}^{\text{sf,RA}} = \frac{i}{4\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[(b^{(i)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(0) (o^{(j)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(0) \right], \tag{3.4.3}$$

$$K_{ij}^{\text{sf,CC}} = \frac{i}{4\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[(b^{(i)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{C}}(0) (o^{(j)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{C}}(0) \right] \tag{3.4.4}$$

から, $K_{11}^{\text{sf,RA}} - (K_{11}^{\text{sf,RR}} + K_{11}^{\text{sf,AA}})/2$ を計算して

$$\frac{i}{4\pi} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 (2\pi) \frac{\rho_1}{v_1} \ln \left[\frac{(v_1 - v_2)^2}{(v_1 + v_2)^2} \right], \tag{3.4.5}$$

を得る. ここで, この結果には $K_{11}^{\text{sf,RR}}$ と $K_{11}^{\text{sf,AA}}$ の寄与も含まれている (通常これらの項は不純物緩和の高次として無視される). 一方, $K_{22}^{\text{sf,RA}} - (K_{22}^{\text{sf,RR}} + K_{22}^{\text{sf,AA}})/2$ についても同様に

$$\frac{i}{4\pi} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 (2\pi) \frac{-\rho_2}{v_2} \ln \left[\frac{(v_1 - v_2)^2}{(v_1 + v_2)^2} \right]. \tag{3.4.6}$$

が得られる. (3.4.5) 式と (3.4.6) 式を見比べてみると, $K_{22}^{(1)} = \frac{v_1 \rho_2}{-v_2 \rho_1} K_{11}^{(1)}$ なる関係式があることに気付く. この式が鏡映対称性とカイラル対称性から導けることを示す.

$$\begin{aligned}
K_{22}^{\text{sf,RA}} &= \frac{i}{4\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[(v_1 s_0 \tau_2) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(0) (\rho_2 s_0 \tau_2) G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(0) \right] \\
&= \frac{i}{4\pi} \frac{1}{2} \left(\sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[(v_1 (i s_3 \tau_1 \Gamma)) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(0) (\rho_2 (-i \Gamma s_3 \tau_1)) G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(0) \right] + \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[(v_1 (-i \Gamma s_3 \tau_1)) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(0) (\rho_2 (i s_3 \tau_1 \Gamma)) G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(0) \right] \right) \\
&= \frac{i}{4\pi} \frac{1}{2} \left(\sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[(v_1 s_3 \tau_1) \Gamma G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(0) \Gamma^{-1} (\rho_2 s_3 \tau_1) G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(0) \right] + \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[(v_1 s_3 \tau_1) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(0) (\rho_2 s_3 \tau_1) \Gamma G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(0) \Gamma^{-1} \right] \right) \\
&= \frac{i}{4\pi} \frac{1}{2} \left(\sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[(v_1 s_3 \tau_1) (-G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(0)) (\rho_2 s_3 \tau_1) G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(0) \right] + \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[(v_1 s_3 \tau_1) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(0) (\rho_2 s_3 \tau_1) (-G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(0)) \right] \right) \\
&= \frac{v_1 \rho_2}{-v_2 \rho_1} \left[- (K_{11}^{\text{sf,RR}} + K_{11}^{\text{sf,AA}})/2 \right], \tag{3.4.7}
\end{aligned}$$

(3.2.3) 式で定義されるカイラル対称性 $\Gamma = s_3 \tau_3$ からグリーン関数は $\Gamma G_{\mathbf{k}}^{\text{R/A}}(0) \Gamma^{-1} = -G_{\mathbf{k}}^{\text{A/R}}(0)$ を満たすことを用いた. また, $s_0 \tau_2 = -i \Gamma s_3 \tau_1 = i s_3 \tau_1 \Gamma$ であることも用いた (今のモデルでは鏡

映操作 $\sigma(xz)$ とカイラル変換 Γ は反交換するため、 Γ を作用させると $\sigma(xz)$ に対するパリティが変化する)。同様に、

$$K_{11}^{\text{sf,RA}} = \frac{1}{2} \frac{v_2 \rho_1}{-v_1 \rho_2} \left[-(K_{22}^{\text{sf,RR}} + K_{22}^{\text{sf,AA}}) \right]. \quad (3.4.8)$$

も得られる。以上より、応答関数 $K_{ii}^{(1)}$ [Eq. (3.3.21)] ($K_{ii}^{\text{sea}} = 0$) に対する関係式

$$\begin{aligned} K_{22}^{(1)} &= K_{22}^{\text{sf,RA}} - (K_{22}^{\text{sf,RR}} + K_{22}^{\text{sf,AA}})/2 \\ &= \frac{v_1 \rho_2}{-v_2 \rho_1} \left[-(K_{11}^{\text{sf,RR}} + K_{11}^{\text{sf,AA}})/2 \right] + \frac{v_1 \rho_2}{-v_2 \rho_1} K_{11}^{\text{sf,RA}} = \frac{v_1 \rho_2}{-v_2 \rho_1} K_{11}^{(1)}. \end{aligned} \quad (3.4.9)$$

が導かれた。

3.4.2 $M_z \neq 0$ のとき

まず、 $M_z = 0$ のときと同様に

$$K_{ij}^{\text{sea}} = \frac{i}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\epsilon \lim_{\epsilon' \rightarrow \epsilon} (\partial_\epsilon - \partial_{\epsilon'}) \times \left\{ \text{tr} \left[(b^{(i)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon') (o^{(j)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) \right] - \langle \text{R} \leftrightarrow \text{A} \rangle \right\} = 0 \quad (3.4.10)$$

である。 $i = j$ に対しては (3.4.1) 式と (3.4.2) 式と同じ理由からゼロとなる。一方 $i \neq j$ のとき、磁化 M_z は鏡映対称性 $\sigma(xz)$ を破るため先ほどと同じ議論は使えない。しかしながら、系は磁気鏡映対称性 $\Theta\sigma(xz)$ は保っている。したがって

$$\begin{aligned} K_{ij}^{\text{sea}} &= \frac{i}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\epsilon \lim_{\epsilon' \rightarrow \epsilon} (\partial_\epsilon - \partial_{\epsilon'}) \times \left\{ \text{tr} \left[(b^{(i)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon') (o^{(j)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) \right] - \langle \text{R} \leftrightarrow \text{A} \rangle \right\} \\ &= \frac{-i}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\epsilon \lim_{\epsilon' \rightarrow \epsilon} (\partial_\epsilon - \partial_{\epsilon'}) \times \left\{ \text{tr} \left[- (b^{(i)}) G_{-k_x, k_y}^{\text{A}}(\epsilon') (o^{(j)}) G_{-k_x, k_y}^{\text{A}}(\epsilon) \right] + \langle \text{A} \leftrightarrow \text{R} \rangle \right\} \\ &= \frac{i}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\epsilon \lim_{\epsilon' \rightarrow \epsilon} (\partial_\epsilon - \partial_{\epsilon'}) \times \left\{ \text{tr} \left[- (b^{(i)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon') (o^{(j)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) \right] + \langle \text{R} \leftrightarrow \text{A} \rangle \right\} \\ &= -K_{ij}^{\text{sea}}, \end{aligned} \quad (3.4.11)$$

が得られる。ここで、 $\Theta b^{(i)} \Theta^{-1} = b^{(i)}$ 、 $\Theta o^{(j)} \Theta^{-1} = o^{(j)}$ であることを用いた。結果として $M_z \neq 0$ の時も $K_{ij}^{\text{sea}} = 0$ であり、 $K_{12}^{\text{sea}} = K_{21}^{\text{sea}} = 0$ となる。また、

$$K_{ij}^{\text{sf,RA}} = \frac{i}{4\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[(b^{(i)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(0) (o^{(j)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(0) \right], \quad (3.4.12)$$

$$K_{ij}^{\text{sf,CC}} = \frac{i}{4\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[(b^{(i)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{C}}(0) (o^{(j)}) G_{\mathbf{k}}^{\text{C}}(0) \right], \quad (3.4.13)$$

より、 $K_{11}^{\text{sf,RA}} - (K_{11}^{\text{sf,RR}} + K_{11}^{\text{sf,AA}})/2$ は

$$\frac{i}{4\pi} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 (2\pi) \frac{\gamma^2}{M_z^2 + \gamma^2} \frac{\rho_1}{v_1} \ln \left[\frac{(v_1 - v_2)^2}{(v_1 + v_2)^2} \right], \quad (3.4.14)$$

と与えられ, $K_{22}^{\text{sf,RA}} - (K_{22}^{\text{sf,RR}} + K_{22}^{\text{sf,AA}})/2$ は

$$\frac{i}{4\pi} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 (2\pi) \frac{\gamma^2}{M_z^2 + \gamma^2} \frac{-\rho_2}{v_2} \ln \left[\frac{(v_1 - v_2)^2}{(v_1 + v_2)^2} \right]. \quad (3.4.15)$$

で与えられる. ここで $M_z \neq 0$ のとき, $K_{12}(\omega)$ ($K_{21}(\omega)$) も有限の値をとりうる. なぜなら, 印加された磁化によって対称性が C_{4v} から C_4 へと低下することにより, スピン流 $j_y^x + j_x^y$ と歪み $u_{xy} + u_{yx}$ が点群 C_4 の同じ既約表現に属するようになるためである. 以下でその計算を示す.

ここから行う計算は応答関数を ω について展開せず, $K_1(\omega) \equiv K_{11}(\omega)$ と $K_2(\omega) \equiv K_{12}(\omega)$ をレーマン表示を用いて計算する:

$$K_1(\omega) = \frac{1}{4} \sum_{n \in \text{occ}, m \in \text{unocc}} \left\{ \frac{\langle n | -v_2 s_3 \tau_1 | m \rangle \langle m | \rho_1 s_3 \tau_1 | n \rangle}{E_n - E_m + \omega + i\delta} + \left[\frac{\langle n | -v_2 s_3 \tau_1 | m \rangle \langle m | \rho_1 s_3 \tau_1 | n \rangle}{E_n - E_m - \omega + i\delta} \right]^* \right\}, \quad (3.4.16)$$

$$K_2(\omega) = \frac{1}{4} \sum_{n \in \text{occ}, m \in \text{unocc}} \left\{ \frac{\langle n | -v_2 s_3 \tau_1 | m \rangle \langle m | \rho_2 s_0 \tau_2 | n \rangle}{E_n - E_m + \omega + i\delta} + \left[\frac{\langle n | -v_2 s_3 \tau_1 | m \rangle \langle m | \rho_2 s_0 \tau_2 | n \rangle}{E_n - E_m - \omega + i\delta} \right]^* \right\}, \quad (3.4.17)$$

ハミルトニアン (3.2.6) は先ほどを記したように τ の固有値で 2 つに分割することが出来る:

$$H = H_+ \oplus H_-$$

$$H_\tau = \mathbf{d}_\tau(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{s} = \begin{pmatrix} M_z & \frac{1+i}{\sqrt{2}}(k_x - ik_y)(v_1 + \tau v_2) \\ \text{h.c.} & -M_z \end{pmatrix}, \quad (3.4.18)$$

$$d_{\tau,x} = \frac{k_x}{\sqrt{2}}(v_1 + \tau v_2) + \frac{k_y}{\sqrt{2}}(v_1 + \tau v_2), \quad d_{\tau,y} = -\frac{k_x}{\sqrt{2}}(v_1 + \tau v_2) + \frac{k_y}{\sqrt{2}}(v_1 + \tau v_2), \quad d_{\tau,z} = M_z, \quad (3.4.19)$$

それぞれの固有値は $E_{\tau,\pm} = \pm \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + \tau v_2)^2}$ で与えられ, 固有ベクトルは

$$|\tau+\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta_\tau/2) \\ e^{i\phi_\tau} \sin(\theta_\tau/2) \end{pmatrix}, \quad |\tau-\rangle = \begin{pmatrix} \sin(\theta_\tau/2) \\ -e^{i\phi_\tau} \cos(\theta_\tau/2) \end{pmatrix}, \quad (3.4.20)$$

$$\cos(\theta_\tau) = \frac{d_{\tau,z}}{E_{\tau,+}}, \quad \sin(\theta_\tau) \cos(\phi_\tau) = \frac{d_{\tau,x}}{E_{\tau,+}}, \quad \sin(\theta_\tau) \sin(\phi_\tau) = \frac{d_{\tau,y}}{E_{\tau,+}}. \quad (3.4.21)$$

となる.

(i) $K_1(\omega)$ の計算

まず (3.4.16) 式の $K_1(\omega)$ を求める. 第 2 項目は第 1 項目の計算から直ちに求められるため, 第 1 項目を計算していく. 以降では, $\frac{1}{4}$ と $+i\delta$ は省略する:

$$\begin{aligned}
& \sum_{n \in \text{occ}, m \in \text{unocc}} \frac{\langle n | -v_2 s_3 \tau_1 | m \rangle \langle m | \rho_1 s_3 \tau_1 | n \rangle}{E_n - E_m + \omega} \\
&= -v_2 \rho_1 \left[\frac{(\tau_1)_{11} \langle + - | s_3 | + + \rangle \langle + + | s_3 | + - \rangle (\tau_1)_{11}}{E_{+,-} - E_{+,+} + \omega} + \frac{(\tau_1)_{12} \langle + - | s_3 | - + \rangle \langle - + | s_3 | + - \rangle (\tau_1)_{21}}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega} \right. \\
&\quad \left. + \frac{(\tau_1)_{21} \langle - - | s_3 | + + \rangle \langle + + | s_3 | - - \rangle (\tau_1)_{12}}{E_{-,-} - E_{+,+} + \omega} + \frac{(\tau_1)_{22} \langle - - | s_3 | - + \rangle \langle - + | s_3 | - - \rangle (\tau_1)_{22}}{E_{-,-} - E_{-,+} + \omega} \right] \\
&= -v_2 \rho_1 \left[\frac{(\tau_1)_{12} \langle + - | s_3 | - + \rangle \langle - + | s_3 | + - \rangle (\tau_1)_{21}}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega} + \frac{(\tau_1)_{21} \langle - - | s_3 | + + \rangle \langle + + | s_3 | - - \rangle (\tau_1)_{12}}{E_{-,-} - E_{+,+} + \omega} \right] \\
&= -v_2 \rho_1 \left[\frac{\langle + - | s_3 | - + \rangle \langle - + | s_3 | + - \rangle}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega} + \frac{\langle - - | s_3 | + + \rangle \langle + + | s_3 | - - \rangle}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega} \right], \tag{3.4.22}
\end{aligned}$$

ここで $E_{-,-} = -E_{-,+}$, $E_{+,+} = -E_{+,-}$ であることを用いた. (3.4.19) 式- (3.4.21) 式を用いることで,

$$\begin{aligned}
& \sum_{n \in \text{occ}, m \in \text{unocc}} \frac{\langle n | -v_2 s_3 \tau_1 | m \rangle \langle m | \rho_1 s_3 \tau_1 | n \rangle}{E_n - E_m + \omega} \\
&= -\frac{v_2 \rho_1}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega} \left[2\sin^2(\theta_+/2)\cos^2(\theta_-/2) + 2\sin^2(\theta_-/2)\cos^2(\theta_+/2) + \cos(\phi_+ - \phi_-)\sin(\theta_+)\sin(\theta_-) \right]. \tag{3.4.23}
\end{aligned}$$

を得る. したがって, 応答関数は

$$\begin{aligned}
K_1(\omega) &= -\frac{v_2 \rho_1}{4} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega + i\delta} \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{E_{-,+}E_{+,+}} \right] \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{+,-} - E_{-,+} - \omega - i\delta} \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{E_{-,+}E_{+,+}} \right] \right\} \tag{3.4.24}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{v_2 \rho_1}{4} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{+,+} + E_{-,+} - \omega - i\delta} \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{E_{-,+}E_{+,+}} \right] \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{+,+} + E_{-,+} + \omega + i\delta} \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{E_{-,+}E_{+,+}} \right] \right\} \tag{3.4.25}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{v_2 \rho_1}{4} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} i\pi\delta(E_{+,+}(\mathbf{k}) + E_{-,+}(\mathbf{k}) - \omega) \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{E_{-,+}E_{+,+}} \right] \right. \\
&\quad \left. + \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}, \tau} \frac{1}{E_{+,+} + E_{-,+} - \tau\omega} \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{E_{-,+}E_{+,+}} \right] \right\}, \tag{3.4.26}
\end{aligned}$$

となる．ここで $\omega > 0$ であるとした．まず上式の第 1 項 (A_1) を計算する． $x(k) \equiv E_{+,+}(k) + E_{-,+}(k) = \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} + \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}$ を定義すると

$$(A_1) = \frac{iv_2\rho_1}{8} \int_{2|M_z|}^{x(k_c)} dx \delta(x - \omega) \left[\frac{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}}{(v_1 + v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2} + (v_1 - v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2}} \right] \\ \times \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}} \right], \quad k = \sqrt{\frac{(v_1^2 + v_2^2)x^2 + \sqrt{16M_z^2 v_1^2 v_2^2 x^2 + (v_1^2 - v_2^2)^2 x^4}}{8v_1^2 v_2^2}}. \quad (3.4.27)$$

となり，結果として

$$(A_1) = \frac{iv_2\rho_1}{8} \Theta(\omega - 2|M_z|) \Theta(x(k_c) - \omega) \left[\frac{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}}{(v_1 + v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2} + (v_1 - v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2}} \right] \\ \times \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}} \right], \quad k = \sqrt{\frac{(v_1^2 + v_2^2)\omega^2 + \sqrt{16M_z^2 v_1^2 v_2^2 \omega^2 + (v_1^2 - v_2^2)^2 \omega^4}}{8v_1^2 v_2^2}}. \quad (3.4.28)$$

が得られる．上式は $2|M_z| \ll \omega (\ll x(k_c))$ の範囲において， $(A_1) \approx \lim_{M_z \rightarrow 0} (A_1) = \frac{i\rho_1}{16v_1} \omega$ for $v_1 > v_2 > 0$ となる．次に第 2 項 (A_2) を計算する．

$$(A_2) = \frac{v_2\rho_1}{4} \left\{ \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{+,+} + E_{-,+} - \omega} \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{E_{-,+} E_{+,+}} \right] + \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{+,+} + E_{-,+} + \omega} \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{E_{-,+} E_{+,+}} \right] \right\}. \quad (3.4.29)$$

$\omega \ll 2|M_z|$ の範囲では，上式は ω について展開することができ， $M_z > 0, v_1 > v_2 > 0$ の下で

$$(A_2) \approx \frac{v_2\rho_1}{8\pi} \int_0^{k_c} dk \frac{2k \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}} \right]}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} + \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}} + \frac{2k \left[1 + \frac{k^2(v_1^2 - v_2^2) - M_z^2}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}} \right] \omega^2}{(\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} + \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2})^3} \\ \approx \frac{v_2\rho_1}{8\pi} \left[\frac{2k_c}{v_1} - \frac{2M_z}{v_1^2 - v_2^2} + \frac{M_z \ln \left| \frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2} \right|}{2v_1 v_2} \right. \\ \left. + \frac{\omega^2}{16v_1^3 v_2^3} \left(-2v_2 \frac{M_z^2}{k_c^3} + \frac{v_1^2 v_2 - 5v_2^3}{k_c} + \frac{2v_1 v_2 (3v_2^2 - v_1^2) - ((v_1^2 + v_2^2)^2 - 4v_2^4) \ln \left| \frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2} \right|}{2M_z} \right) \right] \quad (3.4.30)$$

となる． $2|M_z| \ll \omega \ll x(k_c)$ の範囲では

$$(A_2) \approx \lim_{M_z \rightarrow 0} (A_2) = \frac{v_2\rho_1}{8\pi} \frac{2k_c v_1 - \frac{\omega}{2} \ln \left| \frac{1 + \frac{2k_c v_1}{\omega}}{1 - \frac{2k_c v_1}{\omega}} \right|}{v_1^2}. \quad (3.4.31)$$

が得られる．最後に $\omega \gg x(k_c)$ の範囲では $(A_2) \propto \frac{1}{\omega^2}$ となる．

(ii) $K_2(\omega)$ の計算

次に (3.4.17) 式の $K_2(\omega)$ を求める。先ほど同じように第 1 項目を計算していく。

$$\begin{aligned}
& \sum_{n \in \text{occ}, m \in \text{unocc}} \frac{\langle n | -v_2 s_3 \tau_1 | m \rangle \langle m | \rho_2 s_0 \tau_2 | n \rangle}{E_n - E_m + \omega} \\
&= -v_2 \rho_2 \left[\frac{(\tau_1)_{11} \langle + - | s_3 | + + \rangle \langle + + | s_0 | + - \rangle (\tau_2)_{11}}{E_{+,-} - E_{+,+} + \omega} + \frac{(\tau_1)_{12} \langle + - | s_3 | - + \rangle \langle - + | s_0 | + - \rangle (\tau_2)_{21}}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega} \right. \\
&\quad \left. + \frac{(\tau_1)_{21} \langle - - | s_3 | + + \rangle \langle + + | s_0 | - - \rangle (\tau_2)_{12}}{E_{-,-} - E_{+,+} + \omega} + \frac{(\tau_1)_{22} \langle - - | s_3 | - + \rangle \langle - + | s_0 | - - \rangle (\tau_2)_{22}}{E_{-,-} - E_{-,+} + \omega} \right] \\
&= -v_2 \rho_2 \left[\frac{(\tau_1)_{12} \langle + - | s_3 | - + \rangle \langle - + | s_0 | + - \rangle (\tau_2)_{21}}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega} + \frac{(\tau_1)_{21} \langle - - | s_3 | + + \rangle \langle + + | s_0 | - - \rangle (\tau_2)_{12}}{E_{-,-} - E_{+,+} + \omega} \right] \\
&= -iv_2 \rho_2 \left[\frac{\langle + - | s_3 | - + \rangle \langle - + | s_0 | + - \rangle}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega} - \frac{\langle - - | s_3 | + + \rangle \langle + + | s_0 | - - \rangle}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega} \right], \tag{3.4.32}
\end{aligned}$$

ここで $E_{-,-} = -E_{-,+}$, $E_{+,+} = -E_{+,-}$ であることを用いた。(3.4.19) 式–(3.4.21) 式を用いることで,

$$\begin{aligned}
& \sum_{n \in \text{occ}, m \in \text{unocc}} \frac{\langle n | -v_2 s_3 \tau_1 | m \rangle \langle m | \rho_2 s_0 \tau_2 | n \rangle}{E_n - E_m + \omega} \\
&= -\frac{iv_2 \rho_2}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega} \left[2 \left(\sin^2(\theta_+/2) \cos^2(\theta_-/2) - \sin^2(\theta_-/2) \cos^2(\theta_+/2) \right) - i \sin(\phi_+ - \phi_-) \sin(\theta_+) \sin(\theta_-) \right]. \tag{3.4.33}
\end{aligned}$$

を得る。ここで、第 2 項目は 0 となることから、応答関数は

$$\begin{aligned}
K_2(\omega) &= -\frac{iv_2 \rho_2}{4} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega + i\delta} \left[\frac{M_z}{E_{-,+}} - \frac{M_z}{E_{+,+}} \right] - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{+,-} - E_{-,+} - \omega - i\delta} \left[\frac{M_z}{E_{-,+}} - \frac{M_z}{E_{+,+}} \right] \right\} \\
&= -\frac{iv_2 \rho_2}{4} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \frac{-1}{E_{+,+} + E_{-,+} - \omega - i\delta} \left[\frac{M_z}{E_{-,+}} - \frac{M_z}{E_{+,+}} \right] + \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{+,+} + E_{-,+} + \omega + i\delta} \left[\frac{M_z}{E_{-,+}} - \frac{M_z}{E_{+,+}} \right] \right\} \\
&= -\frac{iv_2 \rho_2}{4} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} -i\pi \delta(E_{+,+}(\mathbf{k}) + E_{-,+}(\mathbf{k}) - \omega) \left[\frac{M_z}{E_{-,+}} - \frac{M_z}{E_{+,+}} \right] \right. \\
&\quad \left. + \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}, \tau} \frac{\tau}{E_{+,+} + E_{-,+} + \tau\omega} \left[\frac{M_z}{E_{-,+}} - \frac{M_z}{E_{+,+}} \right] \right\}, \tag{3.4.34}
\end{aligned}$$

となる。ここでも $\omega > 0$ であるとした。まず上式の第 1 項 (B_1) を計算する。(A₁) の時と同様にして

$$\begin{aligned}
(B_1) &= -\frac{v_2 \rho_2 M_z}{8} \int_{2|M_z|}^{x(k_c)} dx \delta(x - \omega) \left[\frac{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}}{(v_1 + v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2} + (v_1 - v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2}} \right] \\
&\quad \times \left[\frac{1}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}} - \frac{1}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2}} \right], \quad k = \sqrt{\frac{(v_1^2 + v_2^2)x^2 + \sqrt{16M_z^2 v_1^2 v_2^2 x^2 + (v_1^2 - v_2^2)^2 x^4}}{8v_1^2 v_2^2}}. \tag{3.4.35}
\end{aligned}$$

となり、結果として

$$(B_1) = -\frac{v_2 \rho_2 M_z}{8} \Theta(\omega - 2|M_z|) \Theta(x(k_c) - \omega) \left[\frac{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}}{(v_1 + v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2} + (v_1 - v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2}} \right] \\ \times \left[\frac{1}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}} - \frac{1}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2}} \right], \quad k = \sqrt{\frac{(v_1^2 + v_2^2)\omega^2 + \sqrt{16M_z^2 v_1^2 v_2^2 \omega^2 + (v_1^2 - v_2^2)^2 \omega^4}}{8v_1^2 v_2^2}}. \quad (3.4.36)$$

が得られる。上式は $2|M_z| \ll \omega (\ll x(k_c))$ の範囲において、 $(B_1) \approx M_z \lim_{M_z \rightarrow 0} (B_1)/M_z = -\frac{v_2 \rho_2 M_z}{8} \frac{v_2}{v_1^3 - v_1 v_2^2}$ for $v_1 > v_2 > 0$ となる (この範囲において、 ω について定数となる理由については付録 C に記した)。また第 2 項 (B_2) について

$$(B_2) = -\frac{iv_2 \rho_2}{4} \left\{ \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{-1}{E_{+,+} + E_{-,+} - \omega} \left[\frac{M_z}{E_{-,+}} - \frac{M_z}{E_{+,+}} \right] + \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{+,+} + E_{-,+} + \omega} \left[\frac{M_z}{E_{-,+}} - \frac{M_z}{E_{+,+}} \right] \right\} \quad (3.4.37)$$

であるので、 $\omega \ll 2|M_z|$ の範囲では ω について展開して

$$(B_2) \approx \frac{iv_2 \rho_2}{4\pi} \int_0^{k_c} dk \frac{k \left[\frac{M_z}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}} - \frac{M_z}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2}} \right]}{(\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} + \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2})^2} \omega \\ \approx \frac{iv_2 \rho_2}{4\pi} \frac{-2v_1 v_2 + v^2 \ln \left| \frac{v_1 + v_2}{v_1 - v_2} \right|}{8v_1^2 v_2^2} \omega. \quad (3.4.38)$$

となる。一方で、 $2|M_z| \ll \omega \ll x(k_c)$ の範囲では

$$(B_2) \approx M_z \lim_{M_z \rightarrow 0} (B_2)/M_z = -\frac{iv_2 \rho_2 M_z}{8\pi} \frac{v_2 \ln \left| \frac{1 + \frac{2k_c v_1}{\omega}}{1 - \frac{2k_c v_1}{\omega}} \right|}{v_1^3 - v_1 v_2^2}. \quad (3.4.39)$$

が得られる。最後に $\omega \gg x(k_c)$ では、 $(B_2) \propto \frac{iM_z}{\omega}$ となる。

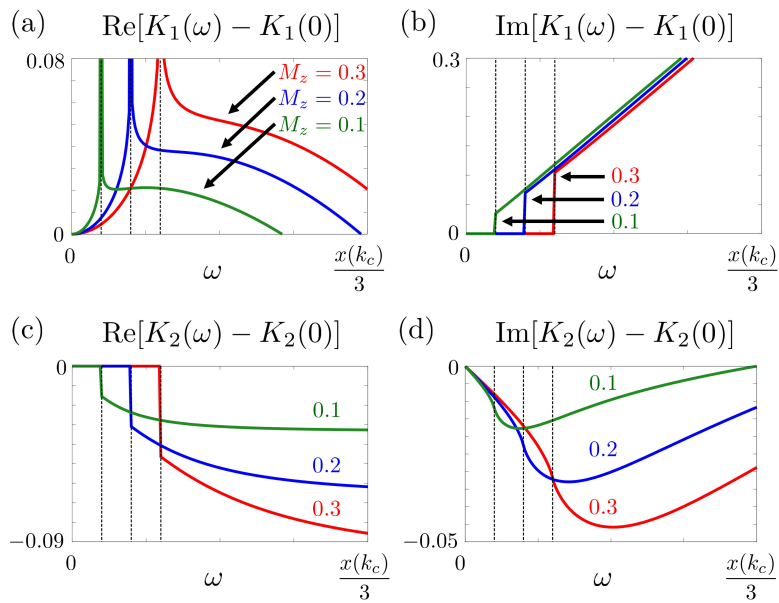


図 3.4.1: (3.4.16) 式と (3.4.17) 式の数値計算 (計算に用いた式は近似する前の (3.4.28), (3.4.29), (3.4.36), (3.4.37) 式). (a) と (b) はそれぞれ $K_1(\omega) - K_1(0)$ の実部と虚部を表す. 一方で (c) と (d) はそれぞれ $K_2(\omega) - K_2(0)$ の実部と虚部を表す. 赤, 青, 緑の線はそれぞれ $|M_z| = 0.3$, $|M_z| = 0.2$, $|M_z| = 0.1$ の場合を表す. (a), (b), (c), (d) 中に記された 3 つの縦軸に平行な黒点線はエネルギーギャップの大きさ $2|M_z|$ に相当する点を表し, 左から 0.2, 0.4, 0.6 の値をとる. 計算に用いたパラメーターは $\rho_1 = 1.0, \rho_2 = 1.0, v_1 = 0.3, v_2 = 0.2, k_c = 10$ である.

これまでの結果をまとめると以下の通りとなる.

$$K_1(\omega) - K_1(0) = \begin{cases} A \frac{\omega^2}{M_z} & (\omega \ll 2|M_z|), \\ B \left(-\frac{\omega}{2} \ln \left| \frac{1 + \frac{2k_c v_1}{\omega}}{1 - \frac{2k_c v_1}{\omega}} \right| + \frac{2M_z v_1^2}{v_1^2 - v_2^2} - \frac{M_z v_1 \ln \left| \frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2} \right|}{2v_2} \right) + i \frac{B \pi v_1}{2v_2} \omega & (2|M_z| \ll \omega \ll x(k_c)), \end{cases} \quad (3.4.40)$$

$$K_2(\omega) - K_2(0) = \begin{cases} iC\omega & (\omega \ll 2|M_z|), \\ D\pi M_z + iDM_z \ln \left| \frac{1 + \frac{2k_c v_1}{\omega}}{1 - \frac{2k_c v_1}{\omega}} \right| & (2|M_z| \ll \omega \ll x(k_c)), \end{cases} \quad (3.4.41)$$

$$A = \frac{2v_1 v_2 (3v_2^2 - v_1^2) - ((v_1^2 + v_2^2)^2 - 4v_2^4) \ln \left| \frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2} \right|}{32v_1^3 v_2^3}, \quad B = \frac{v_2 \rho_1}{8\pi v_1^2},$$

$$C = \frac{v_2 \rho_2}{4\pi} \frac{-2v_1 v_2 + v_2^2 \ln \left| \frac{v_1 + v_2}{v_1 - v_2} \right|}{8v_1^2 v_2^2}, \quad D = -\frac{v_2 \rho_2}{8\pi} \frac{v_2}{v_1^3 - v_1 v_2^2}, \quad (3.4.42)$$

ここで $x(k_c) = \sqrt{M_z^2 + k_c^2(v_1 + v_2)^2} + \sqrt{M_z^2 + k_c^2(v_1 - v_2)^2}$ であり, k_c はカットオフである. (3.4.40) 式と (3.4.41) 式より, $K_1(\omega)$ と $K_2(\omega)$ は 2 つの異なる振る舞いをする振動数領域をもつ. (3.4.16) 式と (3.4.17) 式の数値計算結果は図 3.4.1 に示した (計算に用いた式は近似する前の (3.4.28), (3.4.29), (3.4.36), (3.4.37) 式). 各々の領域における振る舞いをよく再現していることが分かる. $K_1(\omega) - K_1(0)$ と $K_2(\omega) - K_2(0)$ の両方ともマヨラナ準粒子のバンド構造を反映した結果になっている. 特に図 3.4.1 中の (a), (b), (c) においては $\omega = 2|M_z|$ の点, すなわち, ちょうど振動数がエネルギーギャップと同じ大きさの時に, 値を大きく変化させている. 一方で (d) は (3.4.17) 式の主値積分に対応する結果の図であるが, $\omega = 2|M_z|$ の点においても特徴的なピーク構造は見られない. この結果は $K_2(\omega) - K_2(0)$ が磁化によってマヨラナ準粒子の分散にギャップが開いているときに有限となりうる量であり, さらにマヨラナ準粒子のフェルミエネルギーが厳密に 0 であることに由来していると考えられる. すなわち, $K_2(\omega) - K_2(0)$ の主値積分はフェルミ海からの寄与が支配的になっている.

3.5 結論

本研究では, 時間反転不変なアンチペロブスカイト超伝導 Sr_3SnO の (001) 面において, 動的格子歪みによるマヨラナスピン流が生じることを明らかにした. 分散がギャップレスな場合のスピン流は, 2 対のマヨラナクラマース対が線形分散をもち, そのフェルミエネルギーが厳密にゼロであることから, 不純物緩和依存性をもたないことを示した. また, 磁化によってギャップが開いた状況では, スピン流はマヨラナ準粒子のバンド構造を反映した特徴的な振動数依存性をもつ. 我々が強調したいことは, 2 対のマヨラナクラマース対が形成する電気多極子が動的歪みに対するスピン流応答を特徴づけるということである. 本研究で我々は, バルクのペアポテンシャルが点群 O_h の A_{1u} 表現に属しており, 表面は点群 C_{4v} の対称性をもつモデルを考えたので, 電気多極子の対称性は B_1 表現と B_2 表現に属するものであった. 我々の研究から, 別の結晶対称性と超伝導対称性をもつモデルに対しては, 動的歪みによって別のある特定の対称性をもったスピン流が生成されると期待できる.

AC スピン流の検出法としては、強磁性金属へのスピン流注入 [104,105] や 磁歪の整流効果 [106] によるスピン波共鳴が実験的に観測されている。また動的歪み $u_{xx}(\mathbf{r}, t)$ や $u_{xy}(\mathbf{r}, t)$ は x 方向に進行するレイリー波やラヴ波によって、それぞれ実現することができる。さらに、本研究で扱った物質 (Sr_3SnO) は空間反転対称性を有する。そのため、バルクにおいては空間反転に対するパリティの違いから、これらの歪みから直接スピン流が生成されることは（少なくとも空間反転対称性を破る何か特別な機構を考えない限りは）ない。より具体的に実験との比較を行うためには、定量的にスピン流の大きさを見積もることも必要となる。すなわち、本研究で現れた ρ_1, ρ_2, v_1, v_2 等のパラメータの値が決定される必要があるが、これらの値はバルクの物理量を表面へ射影することで得ることができる（つまり、バルクの有効ハミルトニアンを記述する各パラメータを用いて与えることができる）。原理的にこのような計算は可能であるが、この点は今後の課題である。

第4章 まとめ

本論文では、結晶対称性に保護されたマヨラナ準粒子の電氣的な（時間反転対称な）外場に対する応答を理論的に解析した。まず初めに行ったことは、表面のマヨラナ準粒子が形成する電気多極子の対称性を解明することを目的とした研究である。その結果、トポロジカル結晶超伝導体表面における2対のマヨラナクラマース対が形成する電気多極子と歪みとの結合理論を確立した。特に、2対のマヨラナクラマース対と結合する歪みテンソルと結晶対称性・バルクの超伝導対称性との関係を系統的に示した。この関係は、トポロジカル結晶超伝導体表面で印加された歪みの効果を、予測することを容易とする。また本研究では、電氣的な摂動として歪みしか考えなかったが、我々の研究はその他のいかなる電氣的な摂動に対しても用いることのできる理論である。加えて本研究で考えた摂動は全て静的な歪みであった。しかしながら、空間的に非一様な動的歪み（例えば超音波や表面弾性波）と2対のマヨラナクラマース対との結合も存在する。その結合は例えば $H_{\text{sound}}(t) = -\int d^2x \sum_{i=1}^2 \alpha_{\Gamma_i} \psi(\mathbf{x}, t)^T \mathcal{O}_{\Gamma_i} \psi(\mathbf{x}, t) u_{\Gamma_i}(\mathbf{x}, t)$ のように書くことができる。この結合によって、熱あるいはスピン輸送が生じると期待できる。特にスピン流と歪みの対称性（既約表現）は同じため、動的格子歪みを用いたスピン流の駆動が可能である。

そこで自然な発展として次に行った研究は、動的な外場に対するマヨラナ準粒子の応答（輸送現象）の研究である。具体的には、時間反転不変なアンチペロブスカイト超伝導 Sr_3SnO の(001)面において、動的格子歪みによるマヨラナスピン流が生じることを明らかにした。分散がギャップレスな場合のスピン流は、2対のマヨラナクラマース対が線形分散をもち、そのフェルミエネルギーが厳密にゼロであることから、不純物緩和依存性をもたないことを示した。また、磁化によってギャップが開いた状況では、スピン流はマヨラナ準粒子のバンド構造を反映した特徴的な振動数依存性をもつ。我々が強調したいことは、2対のマヨラナクラマース対が形成する電気多極子が動的歪みに対するスピン流応答を特徴づけるということである。本研究で我々は、バルクのペアポテンシャルが点群 O_h の A_{1u} 表現に属しており、表面は点群 C_{4v} の対称性をもつモデルを考えたので、電気多極子の対称性は B_1 表現と B_2 表現に属するものであった。我々の研究から、別の結晶対称性と超伝導対称性をもつモデルに対しては、動的歪みによって別のある特定の対称性をもったスピン流が生成されると期待できる。

我々の研究結果は対称性の議論によって導いた系の詳細（パラメーター等）に依らない普遍的な現象であり、電氣的な手法によるマヨラナ準粒子の観測や操作・輸送のための理論提案や新しい物理現象の予言を可能とする。

付録 A マヨラナ準粒子の有効モデル

この章では 3 次元トポロジカル超伝導体表面におけるマヨラナ準粒子の有効モデルを導出する。目的としては、(i) 表面の有効ハミルトニアン、(ii) マヨラナ準粒子の生成・消滅演算子の性質を説明する。

まず考えるのは 3 次元のハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2} \int d^3x \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \mathcal{H}(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) \quad (\text{A.0.1})$$

である。今、本文と同じようにカイラル対称性が存在する DIII クラスのトポロジカル超伝導体を考えることにしよう。また、マヨラナ準粒子は (xy) 表面に存在する、すなわち、ハミルトニアン $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ に $e^{i(xk_x+yk_y)}e^{-\lambda z}|\chi\rangle$ ($\lambda > 0$) に比例したマヨラナ固有状態が存在すると仮定する ($|\chi\rangle$ は $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ と同じ次元をもつ固有ケット)。 $H_{\mathbf{k}=(k_x,k_y)} \equiv e^{-i(xk_x+yk_y)}\mathcal{H}(\mathbf{x})e^{i(xk_x+yk_y)}$ と定義したとき、ゼロエネルギー状態が $\Gamma = (0, 0)$ 点に存在したとすると

$$H_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}e^{-\lambda z}|\tau\rangle = 0 \quad (\text{A.0.2})$$

を満たす $\lambda (> 0)$ が存在すればマヨラナ準粒子を表す固有状態が得られたことになる¹。ここで登場した $|\tau\rangle$ はカイラル対称性の固有状態であり、 $\tau = \pm 1$ はカイラリティを表す。 $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ の行列部分がどれほど複雑でもカイラル対称性から必ず $\{\mathcal{H}, \Gamma\} = 0$ を満たす Γ が存在する。すなわちゼロエネルギー固有状態に対しては $[\mathcal{H}, \Gamma] = 0$ であり、 \mathcal{H} と Γ の同時固有状態として $|\chi\rangle$ の代わりに $|\tau\rangle$ を用いることが出来る。ここで波数が $\mathbf{k} = 0$ の点を考えていることに注意する。すなわち、 $\mathbf{k} = 0$ での固有状態を求め、その固有状態を用いて $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ の期待値を求めれば、それが $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ を変数としてもつ、表面のハミルトニアンとなる (まさしく $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動である)。

さて、今マヨラナ準粒子が 2 つ存在 ($|u_1(z)\rangle, |u_2(z)\rangle$) したとすると、規格化条件 $\langle u_i(0) | u_i(0) \rangle = 1$ と時間反転対称性 $\Theta|u_1(z)\rangle = |u_2(z)\rangle, \Theta|u_2(z)\rangle = -|u_1(z)\rangle$ より、その解を $|u_1(z)\rangle = A_1(e^{-\lambda_1 z} - e^{-\lambda_2 z})|\tau_1\rangle, |u_2(z)\rangle = A_1^*(e^{-\lambda_1 z} - e^{-\lambda_2 z})|\tau_2\rangle$ とおく。このとき、(A.0.1) 式における電子場の演算子 $\Psi(\mathbf{x})$ をこれらの固有状態に対して展開すれば、

$$H = \frac{1}{2} \int d^2x \int dz \left[\sum_{a=1,2} \sum_{\mathbf{k}=(k_x,k_y)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \langle u_a(z) | \psi_{a,\mathbf{k}}^\dagger + \dots \rangle \right] \mathcal{H}(\mathbf{x}) \left[\sum_{b=1,2} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \psi_{b,\mathbf{k}'} | u_b(z) \rangle + \dots \right] \quad (\text{A.0.3})$$

となる。ここで \dots はバルクの状態を表し、 $\psi_{a,\mathbf{k}}^\dagger, \psi_{b,\mathbf{k}'}$ がまさしくマヨラナ準粒子の生成・消滅演算子である。表面の低エネルギー励起のみに着目するため、バルクの状態を無視して上式をそのま

¹少しややこしいので、もう少し手順を説明する。ハミルトニアン $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ に $e^{i(xk_x+yk_y)}e^{-\lambda z}|\chi\rangle$ に比例した固有状態が存在するという事は、 $\mathcal{H}(\mathbf{x}) \left[e^{i(xk_x+yk_y)}e^{-\lambda z}|\chi\rangle \right] = e^{i(xk_x+yk_y)} \left[\mathcal{H}(k_x, k_y, z) e^{-\lambda z}|\chi\rangle \right] = E \left[e^{i(xk_x+yk_y)}e^{-\lambda z}|\chi\rangle \right]$ と書くことが出来る (ここで固有状態は、 Γ 点に存在するマヨラナゼロモードであると仮定したので、 E は $k_x = k_y = 0$ で 0 となる)。第 1 項目と第 2 項目から、 $H_{\mathbf{k}=(k_x,k_y)} = e^{-i(xk_x+yk_y)}\mathcal{H}(\mathbf{x})e^{i(xk_x+yk_y)}$ が得られ、第 2 項目と第 3 項目から、 $H_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}e^{-\lambda z}|\chi\rangle = 0$ が得られる。

ま計算していく：

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2} \int d^2x \int dz \sum_{a,b=1,2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \psi_{a,\mathbf{k}}^\dagger \langle u_a(z) | e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} \mathcal{H}_{\mathbf{k}'} | u_b(z) \rangle \psi_{b,\mathbf{k}'} \\
&= \frac{1}{2} \int dz \sum_{a,b=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{a,\mathbf{k}}^\dagger \langle u_a(z) | \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_b(z) \rangle \psi_{b,\mathbf{k}}
\end{aligned} \tag{A.0.4}$$

今簡単のため A_1 が実数だとすると z についての規格化条件より, $\int dz \langle u_a(z) | \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_b(z) \rangle = \langle \tau_a | \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | \tau_b \rangle$ となる. 以上より,

$$H = \frac{1}{2} \sum_{a,b=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{a,\mathbf{k}}^\dagger \langle \tau_a | \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | \tau_b \rangle \psi_{b,\mathbf{k}} \tag{A.0.5}$$

であり, マヨラナ準粒子の固有状態のラベルに対して行列表示すると

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}, \quad \psi_{\mathbf{k}} = (\psi_{1\mathbf{k}}, \psi_{2\mathbf{k}})^T \tag{A.0.6}$$

となる. この式を逆フーリエ変換すれば

$$H = \frac{1}{2} \int d^2x \psi^\dagger(\mathbf{x}) \mathcal{H}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \tag{A.0.7}$$

も得られる. ここで今から $\psi_{a,\mathbf{k}} = \psi_{a,-\mathbf{k}}^\dagger$ または $\psi_a(\mathbf{x}) = \psi_a^\dagger(\mathbf{x})$ となることを証明する. バルクの南部空間の自由度に対して成立するマヨラナ条件

$$\Psi(\mathbf{x}) = C \Psi(\mathbf{x}) \tag{A.0.8}$$

を考える (C は粒子正孔演算子). 今 $\Psi(\mathbf{x})$ をゼロモードに対して展開すれば, 上記の条件は

$$\sum_{a=1,2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \psi_{a,\mathbf{k}} | u_a(z) \rangle = C \sum_{a=1,2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \psi_{a,\mathbf{k}} | u_a(z) \rangle \tag{A.0.9}$$

と書き換えることができる. ここで, カイラル対称性の議論と同様にしてゼロエネルギー固有状態は粒子正孔対称性の固有状態でもある. すなわち, $C[e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} | u_a(z) \rangle]_{\mathbf{k}=0} = [e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} | u_a(z) \rangle]_{\mathbf{k}=0}$ (粒子正孔対称性是对角的であると仮定した. さらにこれより A_1 が実数であることも分かる). すると

$$\begin{aligned}
C \sum_{a=1,2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \psi_{a,\mathbf{k}} | u_a(z) \rangle &= \sum_{a=1,2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \psi_{a,\mathbf{k}}^\dagger C | u_a(z) \rangle \\
&= \sum_{a=1,2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \psi_{a,\mathbf{k}}^\dagger | u_a(z) \rangle
\end{aligned} \tag{A.0.10}$$

となり, (A.0.9) 式の左辺と見比べれば

$$\psi_{a,\mathbf{k}} = \psi_{a,-\mathbf{k}}^\dagger \tag{A.0.11}$$

が成り立つ. $\psi_a(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \psi_{a,\mathbf{k}}$ なので, 当然

$$\psi_a(\mathbf{x}) = \psi_a^\dagger(\mathbf{x}) \tag{A.0.12}$$

も成立する.

付 録 B マヨラナ多極子の分類例

この章では 3 次元トポロジカル超伝導体表面におけるマヨラナ多極子の分類をいくつか具体的に
 行う。以下、記法は Bilbao Crystallographic server のものを採用する。

B.0.1 $p4$

生成元は $\{4_{001}^+|0\}$ である。対ポテンシャルは A 表現とする。2 対のマヨラナクラマース対の表
 現は $\bar{\Gamma}_5 \oplus \bar{\Gamma}_7 \oplus \bar{\Gamma}_6 \oplus \bar{\Gamma}_8$ を考える。この空間での対称操作の表現行列は

$$\begin{aligned} D(4_{001}^+) &= \text{diag} \left(e^{i3\pi/4}, e^{-i3\pi/4}, e^{-i\pi/4}, e^{i\pi/4} \right), \text{tr} D(4_{001}^+) = 0, \\ D(2_{001}) &= \text{diag} (-i, i, -i, i) = -is_z, \\ D(2_{001})^2 &= -1, \text{tr} D(2_{001})^2 = -4, \end{aligned} \quad (\text{B.0.1})$$

である。これから示すのは、対称性が低い場合、カイラル変換の表現は一意に決まらず、それぞ
 れの表現によって異なるトポロジカル不変量（巻き付き数）とマヨラナ多極子が存在することである。

Case I: C_2 の巻き付き数が 4

対ポテンシャルは A 表現であるから、 $[\Gamma, D(4_{001}^+)] = 0$ を満たすカイラル変換は $\Gamma = s_z$ ととれ
 ば良い。また、

$$\begin{aligned} \Gamma D(4_{001}^+) &= \text{diag} \left(e^{i3\pi/4}, -e^{-i3\pi/4}, e^{-i\pi/4}, -e^{i\pi/4} \right), \\ \text{tr} [\Gamma D(4_{001}^+)] &= 0, \\ [\Gamma D(4_{001}^+)]^2 &= D(2_{001}), \\ \Gamma D(2_{001}) &= -i, [\Gamma D(2_{001})]^2 = -1, \end{aligned} \quad (\text{B.0.2})$$

である。これは $|W[2_{001}]| = |\text{tr} [\Gamma D(2_{001})]| = 4$ ，すなわち、 C_2 で定義される巻き付き数が 4 であ
 ることを意味する。もちろん (2.3.20) 式より、 C_4 で定義される巻き付き数も 4 である。以上より
 指標は、(2.4.6) 式を用いて

$$\begin{aligned} \chi^\pm(4_{001}^+) &= \frac{0-0}{4} \pm \frac{0-0}{4} = 0, \\ \chi^\pm(2_{001}) &= \frac{0-(-4)}{4} \pm \frac{-16-(-4)}{4} = -2, 4, \end{aligned} \quad (\text{B.0.3})$$

となる。既約分解すると

$$\text{電氣的：} E \quad (\text{B.0.4})$$

$$\text{磁氣的：} 2A + 2B \quad (\text{B.0.5})$$

Case II: C_2 の巻き付き数が零

一方，カイラル変換を $\Gamma = s_z \sigma_z = \text{diag}(1, -1, -1, 1)$ ととってもよい。このときは，

$$\begin{aligned} \Gamma D(4_{001}^+) &= \text{diag}\left(e^{i3\pi/4}, -e^{-i3\pi/4}, -e^{-i\pi/4}, e^{i\pi/4}\right), \\ \text{tr}[\Gamma D(4_{001}^+)] &= i2\sqrt{2}, \\ \Gamma D(2_{001}) &= -i\sigma_z, [\Gamma D(2_{001})]^2 = -1, \end{aligned} \quad (\text{B.0.6})$$

これは $W[2_{001}] = 0$ を意味する。このときも $W[4_{001}^+]$ は 4 である。以上より指標は，

$$\begin{aligned} \chi^\pm(4_{001}^+) &= \frac{0-0}{4} \pm \frac{0-0}{4} = -2, 2, \\ \chi^\pm(2_{001}) &= \frac{0-(-4)}{4} \pm \frac{-16-(-4)}{4} = 2, 0, \end{aligned} \quad (\text{B.0.7})$$

となる。既約分解すると

$$\text{電氣的：} 2B \quad (\text{B.0.8})$$

$$\text{磁氣的：} 2A + E \quad (\text{B.0.9})$$

Case III: $\Gamma = s_0 \sigma_z$

この場合は Γ が時間反転に対して偶になってしまうので，正しくない（荷電共役変換 \mathcal{C} は $\mathcal{C}^2 = -1$ になってしまう）。実際このときは，

$$\begin{aligned} \Gamma D(4_{001}^+) &= \text{diag}\left(e^{i3\pi/4}, e^{-i3\pi/4}, -e^{-i\pi/4}, -e^{i\pi/4}\right), \\ \text{tr}[\Gamma D(4_{001}^+)] &= 0, \\ \Gamma D(2_{001}) &= -is_z \sigma_z, \\ \text{tr}[\Gamma D(2_{001})] &= 0, \\ [\Gamma D(2_{001})]^2 &= -1, \end{aligned} \quad (\text{B.0.10})$$

となるので，指標は

$$\begin{aligned} \chi^\pm(4_{001}^+) &= \frac{0-0}{4} \pm \frac{0-0}{4} = 0, \\ \chi^\pm(2_{001}) &= \frac{0-(-4)}{4} \pm \frac{0-(-4)}{4} = 2, 0, \end{aligned} \quad (\text{B.0.11})$$

となる。既約分解すると

$$\text{電氣的：} A + B \quad (\text{B.0.12})$$

$$\text{磁氣的：} A + B + E \quad (\text{B.0.13})$$

であり、電気多極子が全対称表現に属している。これはマヨラナ多極子が電気単極子をもたないことと矛盾するため、結局 $\Gamma = s_0\sigma_z$ の場合は存在しない。

B.0.2 $p31m$

この場合は、トポロジカル不変量として巻き付き数だけでなく \mathbb{Z}_2 不変量も存在するため、議論が複雑となる。生成元は $\{3^+|0\}$, $\{m_{110}|0\}$ である。まず、2 対のマヨラナクラマース対が属する表現が $\bar{\Gamma}_4 \oplus \bar{\Gamma}_5 \oplus \bar{\Gamma}_6$ の場合を考える。この空間での対称操作の表現行列は

$$D(3^+) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\pi/3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\pi/3} \end{pmatrix} = -s_0 \oplus \left(\frac{1}{2}s_0 - \frac{\sqrt{3}}{2}is_z \right),$$

$$D(m_{110}) = \begin{pmatrix} -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = -is_z \oplus -is_y \quad (\text{B.0.14})$$

である。

Case I: 対ポテンシャルが A_1 表現のとき

時間反転と反可換し、かつ $[\Gamma, D(3^+)] = [\Gamma, D(m_{1\bar{1}0})] = 0$ を満たすカイラル変換は存在しない。

Case II: 対ポテンシャルが A_2 表現のとき

時間反転と反可換し、かつ $[\Gamma, D(3^+)] = \{\Gamma, D(m_{1\bar{1}0})\} = 0$ を満たすカイラル変換は $\Gamma_1 = s_x \oplus s_z$ または $\Gamma_2 = s_y \oplus s_z$ である。すなわち、 Γ_1 に対しては

$$\Gamma D(3^+) = -s_x \oplus \left(\frac{1}{2}s_z - \frac{\sqrt{3}}{2}is_0 \right),$$

$$\Gamma D(m_{1\bar{1}0}) = -s_y \oplus -s_x, \quad (\text{B.0.15})$$

これは $W[3^+] \neq 0$, $W[m_{1\bar{1}0}] = 0$ を意味する。さらに、 $|\text{tr}(\Gamma D(3^+))| = |(\sqrt{3}/2)W[3^+]|$ より、 $|W[3^+]| = 2$ 。これは $N[3^+] = \nu^2[3^+] = 1$ の場合に相当する。これより、指標は

$$\chi^\pm(3^+) = \frac{1 - (1)}{4} \pm \frac{-3 - (1)}{4} = -1, 1,$$

$$\chi^\pm(m_{1\bar{1}0}) = -\frac{0 - (-4)}{4} \mp \frac{0 - (4)}{4} = 0, -2, \quad (\text{B.0.16})$$

となる。既約分解すると

$$\text{電氣的： } E \quad (\text{B.0.17})$$

$$\text{磁氣的： } 2A_2 + E \quad (\text{B.0.18})$$

また、 Γ_2 に対しては

$$\Gamma D(3^+) = -s_y \oplus \left(\frac{1}{2}s_z - \frac{\sqrt{3}}{2}is_0 \right),$$

$$\Gamma D(m_{1\bar{1}0}) = s_x \oplus -s_x, \quad (\text{B.0.19})$$

これは $W[3^+] \neq 0$, $W[m_{1\bar{1}0}] = 0$ を意味する. さらに, $|\text{tr}(\Gamma D(3^+))| = |(\sqrt{3}/2)W[3^+]|$ より, $|W[3^+]| = 2$. これは $N[3^+] = \nu^2[3^+] = 1$ の場合に相当する. これより, 指標は

$$\begin{aligned}\chi^\pm(3^+) &= \frac{1-(1)}{4} \pm \frac{-3-(1)}{4} = -1, 1, \\ \chi^\pm(m_{1\bar{1}0}) &= -\frac{0-(-4)}{4} \mp \frac{0-(4)}{4} = 0, -2,\end{aligned}\tag{B.0.20}$$

となる. 既約分解すると

$$\text{電氣的: } E \tag{B.0.21}$$

$$\text{磁氣的: } 2A_2 + E \tag{B.0.22}$$

となり, どちらの表現でも同じ結果が得られる. Γ_1 と Γ_2 は互いにユニタリー変換で結びついているため, それぞれの結果が同じとなるのは自然である.

次に 2 対のマヨラナクラマース対が属する表現が $2\bar{\Gamma}_6$ のときを考える. この空間での対称操作の表現行列は

$$\begin{aligned}D(3^+) &= \begin{pmatrix} e^{-i\pi/3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\pi/3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\pi/3} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}s_0\sigma_0 - i\frac{\sqrt{3}}{2}s_z\sigma_0, \\ D(m_{1\bar{1}0}) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = -is_y\sigma_0\end{aligned}\tag{B.0.23}$$

である.

Case I: 対ポテンシャルが A_1 表現のとき

時間反転と反可換し, かつ $[\Gamma, D(3^+)] = [\Gamma, D(m_{1\bar{1}0})] = 0$ を満たすカイラル変換は存在しない.

Case II: 対ポテンシャルが A_2 表現のとき

時間反転と反可換し, かつ $[\Gamma, D(3^+)] = \{\Gamma, D(m_{1\bar{1}0})\} = 0$ を満たすカイラル変換は存在し $\Gamma = s_z$ である. すなわち,

$$\begin{aligned}\Gamma D(3^+) &= \frac{1}{2}s_z\sigma_0 - i\frac{\sqrt{3}}{2}s_0\sigma_0, \\ \Gamma D(m_{1\bar{1}0}) &= -s_x,\end{aligned}\tag{B.0.24}$$

これは $W[m_{1\bar{1}0}] = 0$ を意味する．さらに, $|\text{tr}(\Gamma D(3^+))| = |(\sqrt{3}/2)W[3^+]|$ より, $|W[3^+]| = 4$.
これは $N[3^+] = 2$ の場合に相当する．これより, 指標は

$$\begin{aligned}\chi^\pm(3^+) &= \frac{4 - (-2)}{4} \pm \frac{-12 - (-2)}{4} = -1, 4, \\ \chi^\pm(m_{1\bar{1}0}) &= -\frac{0 - (-4)}{4} \mp \frac{0 - (4)}{4} = 0, -2,\end{aligned}\tag{B.0.25}$$

となる．既約分解すると

$$\text{電氣的} : E \tag{B.0.26}$$

$$\text{磁氣的} : A_1 + 3A_2 \tag{B.0.27}$$

最後に 2 対のマヨラナクラマース対が属する表現が $2(\bar{\Gamma}_4 \oplus \bar{\Gamma}_5)$ の場合を考える．この空間での対称操作の表現行列は

$$\begin{aligned}D(3^+) &= \text{diag}(-1, -1, -1, -1) = -s_0\sigma_0, \\ D(m_{1\bar{1}0}) &= \text{diag}(-i, i, -i, i) = -is_z\sigma_0\end{aligned}\tag{B.0.28}$$

である．

Case I: 対ポテンシャルが A_1 表現のとき

時間反転と反可換し, かつ $[\Gamma, D(3^+)] = [\Gamma, D(m_{1\bar{1}0})] = 0$ を満たすカイラル変換は存在し $\Gamma = s_z$ である．すなわち,

$$\begin{aligned}\Gamma D(3^+) &= -s_z, \\ \Gamma D(m_{1\bar{1}0}) &= -i,\end{aligned}\tag{B.0.29}$$

これは $W[3^+] = 0$, $W[m_{1\bar{1}0}] = 4$ を意味する．これより, 指標は

$$\begin{aligned}\chi^\pm(3^+) &= \frac{16 - 4}{4} \pm \frac{0 - (4)}{4} = 2, 4, \\ \chi^\pm(m_{1\bar{1}0}) &= \frac{0 - (-4)}{4} \pm \frac{-16 - (-4)}{4} = -2, 4,\end{aligned}\tag{B.0.30}$$

となる．既約分解すると

$$\text{電氣的} : 2A_2 \tag{B.0.31}$$

$$\text{磁氣的} : 4A_1 \tag{B.0.32}$$

Case II: 対ポテンシャルが A_2 表現のとき

時間反転と反可換し, かつ $[\Gamma, D(3^+)] = \{\Gamma, D(m_{1\bar{1}0})\} = 0$ を満たすカイラル変換は存在し $\Gamma = s_x$ or s_y である．すなわち,

$$\begin{aligned}\Gamma D(3^+) &= -s_x \text{ or } -s_y, \\ \Gamma D(m_{1\bar{1}0}) &= s_y \text{ or } -s_x,\end{aligned}\tag{B.0.33}$$

これは $W[3^+] = W[m_{1\bar{1}0}] = 0$ を意味する。これはトポロジカル不変量にマヨラナ準粒子が保護されていることと矛盾する（仮に $\nu^2[g] = 1$ でも 1 対のマヨラナクラマース対しか存在できないことに注意）。つまり、MKP の表現が $2(\bar{\Gamma}_4 \oplus \bar{\Gamma}_5)$ で対ポテンシャルが A_2 表現の場合は存在しない。

B.0.3 $p4m$

生成元は $\{4^+|0\}$, $\{m_{01}|0\}$ である (添え字は一部省略した). 他の元は $2 = 4^{+2}$, $4^- = 4^{+3}$, $m_{10} = m_{01}2$, $m_{11} = m_{01}4^+$, $m_{1\bar{1}} = m_{01}4^{+3}$. 対ポテンシャルは A_2 表現とする. 物理的な表現は $\bar{\Gamma}_6$ と $\bar{\Gamma}_7$ の2つである. それぞれの表現における対称操作の既約表現は以下の通りである.

$$\begin{aligned} D_{\bar{\Gamma}_6}(4^+) &= \text{diag}\left(e^{i3\pi/4}, e^{-i3\pi/4}\right), \\ D_{\bar{\Gamma}_7}(4^+) &= \text{diag}\left(e^{-i\pi/4}, e^{i\pi/4}\right), \\ D_{\bar{\Gamma}_6}(m_{01}) &= \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\pi/4} \\ e^{-i3\pi/4} & 0 \end{pmatrix}, \\ D_{\bar{\Gamma}_7}(m_{01}) &= \begin{pmatrix} 0 & e^{i3\pi/4} \\ e^{i\pi/4} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.0.34})$$

一方, 時間反転は

$$\mathcal{T}_{\bar{\Gamma}_6} = e^{i\psi_6} s_y \mathcal{K}, \quad \mathcal{T}_{\bar{\Gamma}_7} = e^{i\psi_7} s_y \mathcal{K} \quad (\text{B.0.35})$$

で与えられる (反ユニタリーなので, 位相は任意). 今の対ポテンシャルの表現では, 荷電共役 \mathcal{C} は 4^+ と可換であり, m_{01} とは反交換する. かつ $\mathcal{C}^2 = 1$ を満たすものは

$$\mathcal{C}_{\bar{\Gamma}_6} = e^{i\phi_6} s_x \mathcal{K}, \quad \mathcal{C}_{\bar{\Gamma}_7} = e^{i\phi_7} s_x \mathcal{K} \quad (\text{B.0.36})$$

である. 反ユニタリーなので, これも位相は任意である. このとき, カイラル変換は

$$\Gamma_i = e^{i\alpha_i} \mathcal{C}_i \mathcal{T}_i = \pm s_z \quad (\text{B.0.37})$$

の2通りある. 位相は $\Gamma_i^2 = 1$ となるように決まるが, 符号は決まらない. 以下では, 2対のマヨラナクラマース対の表現が $\bar{\Gamma}_6 \oplus \bar{\Gamma}_7$ の場合を考える.

Case I: $\Gamma = s_z \oplus s_z = s_z \sigma_0$ のとき

この場合は

$$\Gamma[D_{\bar{\Gamma}_6}(2) \oplus D_{\bar{\Gamma}_7}(2)] = -i, \quad (\text{B.0.38})$$

これは $W[2] = 4$ を意味する. これまでと同様の計算により, 得られた指標を既約分解すると

$$\text{電氣的: } E \quad (\text{B.0.39})$$

$$\text{磁氣的: } 2A_2 + B_1 + B_2 \quad (\text{B.0.40})$$

Case I: $\Gamma = s_z \oplus -s_z = s_z \sigma_z$ のとき

この場合は

$$\Gamma[D_{\bar{\Gamma}_6}(2) \oplus D_{\bar{\Gamma}_7}(2)] = -is_0 \sigma_z \quad (\text{B.0.41})$$

これは $W[2] = 0$ を意味する. 得られた指標を既約分解すると

$$\text{電氣的} : B_1 + B_2 \quad (\text{B.0.42})$$

$$\text{磁氣的} : 2A_2 + E \quad (\text{B.0.43})$$

B.0.4 $p6m$

この場合は対称操作の数が一番多く、2対のマヨラナクラマース対を保護するトポロジカル不変量の場合分けも多い。生成元は $\{6^+|0\}$, $\{m_{1\bar{1}0}|0\}$ である。

2対のマヨラナクラマース対の表現が $\bar{\Gamma}_8 \oplus \bar{\Gamma}_9$ の場合を考える。この空間での対称操作の表現行列は

$$\begin{aligned}
D(6^+) &= \begin{pmatrix} e^{i5\pi/6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i5\pi/6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\pi/6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi/6} \end{pmatrix} = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}s_0 + \frac{1}{2}is_z\right) \oplus \left(\frac{\sqrt{3}}{2}s_0 + \frac{1}{2}is_z\right), \\
D(3^+) &= \begin{pmatrix} e^{-i\pi/3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\pi/3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi/3} \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{2}s_0 - \frac{\sqrt{3}}{2}is_z\right) \oplus \left(\frac{1}{2}s_0 + \frac{\sqrt{3}}{2}is_z\right), \\
D(2_{001}) &= \begin{pmatrix} -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{pmatrix} = -is_z \oplus -is_z, \\
D(m_{110}) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = -is_y \oplus -is_y
\end{aligned} \tag{B.0.44}$$

である。

Case I: 対ポテンシャルが A_1 表現のとき

時間反転と反可換し、かつ $[\Gamma, D(6^+)] = [\Gamma, D(3^+)] = [\Gamma, D(m_{110})] = 0$ を満たすカイラル変換は存在しない。

Case II: 対ポテンシャルが A_2 表現のとき

時間反転と反可換し、かつ $[\Gamma, D(6^+)] = [\Gamma, D(3^+)] = \{\Gamma, D(m_{110})\} = 0$ を満たすカイラル変換は $\Gamma_1 = s_z \oplus s_z$ または $\Gamma_2 = s_z \oplus -s_z$ である。すなわち、 Γ_1 に対して

$$\begin{aligned}
\Gamma D(6^+) &= \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}s_z + \frac{1}{2}is_0\right) \oplus \left(\frac{\sqrt{3}}{2}s_z + \frac{1}{2}is_0\right), \\
\Gamma D(3^+) &= \left(\frac{1}{2}s_z - \frac{\sqrt{3}}{2}is_0\right) \oplus \left(\frac{1}{2}s_z + \frac{\sqrt{3}}{2}is_0\right), \\
\Gamma D(2_{001}) &= -i \oplus -i, \\
\Gamma D(m_{110}) &= -s_x \oplus -s_x,
\end{aligned} \tag{B.0.45}$$

これは $W[6^+] \neq 0, W[3^+] = 0, W[2_{001}] \neq 0, W[m_{110}] = 0$ を意味する. これより, 指標は

$$\begin{aligned}\chi^\pm(6^+) &= \frac{0-2}{4} \pm \frac{-4-2}{4} = -2, 1, \\ \chi^\pm(m_{110}) &= -\frac{0-(-4)}{4} \mp \frac{0-(4)}{4} = 0, -2,\end{aligned}\tag{B.0.46}$$

となる. 既約分解すると

$$\text{電氣的} : B_1 + B_2 \tag{B.0.47}$$

$$\text{磁氣的} : 2A_2 + E_2 \tag{B.0.48}$$

また, Γ_2 に対して

$$\begin{aligned}\Gamma D(6^+) &= \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}s_z + \frac{1}{2}is_0\right) \oplus \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}s_z - \frac{1}{2}is_0\right), \\ \Gamma D(3^+) &= \left(\frac{1}{2}s_z - \frac{\sqrt{3}}{2}is_0\right) \oplus \left(-\frac{1}{2}s_z - \frac{\sqrt{3}}{2}is_0\right), \\ \Gamma D(2_{001}) &= -i \oplus i, \\ \Gamma D(m_{110}) &= -s_x \oplus s_x,\end{aligned}\tag{B.0.49}$$

これは $W[6^+] \neq 0, W[3^+] \neq 0, W[2_{001}] = 0, W[m_{110}] = 0$ を意味する. これより, 指標は

$$\begin{aligned}\chi^\pm(6^+) &= \frac{0-2}{4} \pm \frac{0-2}{4} = -1, 0, \\ \chi^\pm(m_{110}) &= -\frac{0-(-4)}{4} \mp \frac{0-(4)}{4} = 0, -2,\end{aligned}\tag{B.0.50}$$

となる. 既約分解すると

$$\text{電氣的} : E_2 \tag{B.0.51}$$

$$\text{磁氣的} : 2A_2 + B_1 + B_2 \tag{B.0.52}$$

B.0.5 pg

生成元は $\{m_{01}|\frac{1}{2}0\}$ である。今の議論ではブリュリアルゾーンの端 (B 点) を考えていることに注意。対ポテンシャルは A' 表現を考える。2対のマヨラナクラマース対が属する表現は $2\bar{B}_3 \oplus 2\bar{B}_4$ とする。このとき

$$\begin{aligned} D\left(\left\{m_{01}\left|\frac{1}{2}0\right.\right\}\right) &= \text{diag}(1, 1, -1, -1) = s_0\sigma_3, \\ D\left(\left\{m_{01}\left|\frac{1}{2}0\right.\right\}\right)^2 &= s_0\sigma_0, \end{aligned} \tag{B.0.53}$$

カイラル変換は $\{T, \Gamma\} = 0$, $[\Gamma, D] = 0$ より, $\Gamma = s_i\sigma_0$ or $s_i\sigma_3$ である。これより,

$$\begin{aligned} \Gamma D\left(\left\{m_{01}\left|\frac{1}{2}0\right.\right\}\right) &= s_i\sigma_3 \text{ or } s_i\sigma_0, \quad \text{tr}\left[\Gamma D\left(\left\{m_{01}\left|\frac{1}{2}0\right.\right\}\right)\right] = 0, \\ \left[\Gamma D\left(\left\{m_{01}\left|\frac{1}{2}0\right.\right\}\right)\right]^2 &= s_0\sigma_0, \end{aligned} \tag{B.0.54}$$

である。この場合には、指標はカイラル変換の表現に依存しない。これは2対のマヨラナクラマース対が巻き付き数 W には保護されておらず、 \mathbb{Z}_2 不変量でのみ保護されているためである。実際、指標を求めると

$$\chi^\pm\left(\left\{m_{01}\left|\frac{1}{2}0\right.\right\}\right) = \frac{0-4}{4} \pm \frac{0-4}{4} = -2, 0, \tag{B.0.55}$$

となる。既約分解すると

$$\text{電氣的} : 2A'' \tag{B.0.56}$$

$$\text{磁氣的} : 2A' + 2A'' \tag{B.0.57}$$

B.0.6 pmg

生成元は $\{2|00\}$, $\{m_{10}|\frac{1}{2}0\}$ である。対ポテンシャルは A_1 表現とする。ここでも、ブリュリアルゾーンの端 (X 点) を考えていることに注意。2対のマヨラナクラーマス対が属する表現が $2(\bar{X}_2 \oplus \bar{X}_5)$ の場合を考える。この空間での対称操作の表現行列は

$$\begin{aligned} D(2) &= \text{diag}(-i, i, -i, i) = -is_z, \\ D(m_{10}) &= \text{diag}(-i, i, -i, i) = -is_z \end{aligned} \quad (\text{B.0.58})$$

である。

Case I: C_2 と σ の巻き付き数が 4

対ポテンシャルは A_1 表現であるから、 $[\Gamma, D(2)] = 0$ を満たすカイラル変換は $\Gamma = s_z$ ととれば良い。すなわち、

$$\Gamma D(2) = \Gamma D(m_{10}) = -i, \quad (\text{B.0.59})$$

これは $|W[2]| = |W[m_{10}]| = 4$ を意味する。これより、指標は

$$\begin{aligned} \chi^\pm(2) &= \frac{0 - (-4)}{4} \pm \frac{-16 - (-4)}{4} = -2, 4, \\ \chi^\pm(m_{10}) &= \frac{0 - (-4)}{4} \pm \frac{-16 - (-4)}{4} = -2, 4, \end{aligned} \quad (\text{B.0.60})$$

となる。既約分解すると

$$\text{電氣的} : 2B_1 \quad (\text{B.0.61})$$

$$\text{磁氣的} : 4A_1 \quad (\text{B.0.62})$$

このとき、電氣的な演算子の既約表現が B_1 表現のみであるため、2つの MKP はグライド対称性では保護されていない (B_1 表現の電氣的な摂動で、グライド対称性は破れない)。

Case I: C_2 と σ の巻き付き数が零

一方、カイラル変換を $\Gamma = s_z \sigma_z = \text{diag}(1, -1, -1, 1)$ ととってもよい。このときは、

$$\Gamma D(2) = \Gamma D(m_{10}) = -i\sigma_z, \quad (\text{B.0.63})$$

これは $W[2] = W[m_{10}] = 0$ を意味する。このとき、指標は

$$\begin{aligned} \chi^\pm(2) &= \frac{0 - (-4)}{4} \pm \frac{0 - (-4)}{4} = 2, 0, \\ \chi^\pm(m_{10}) &= \frac{0 - (-4)}{4} \pm \frac{0 - (-4)}{4} = 2, 0, \\ \chi^\pm(G_{01}) &= \frac{16 - (4)}{4} \pm \frac{0 - (4)}{4} = 2, 4, \end{aligned} \quad (\text{B.0.64})$$

となる。 G_{01} は $G_{01}^2 = 1$ を満たすグライド操作を表す。既約分解すると

$$\text{電氣的：} 2A_1 \quad (\text{B.0.65})$$

$$\text{磁氣的：} 2A_1 + 2B_1 \quad (\text{B.0.66})$$

C_2 と σ の巻き付き数が零である場合、2対のマヨラナクラマース対を保護するのはグライド対称性である。しかしながら、電氣的な演算子の既約表現が A_1 のみであることは、この事実と矛盾する (A_1 表現の電氣的な摂動で、グライド対称性は破れないため)。あるいはマヨラナ多極子が電気単極子をもたないことと矛盾している、と言ってもよい。従ってこのケースは存在しない。

2対のマヨラナクラマース対が属する表現が $\bar{X}_2 \oplus \bar{X}_5 \oplus \bar{X}_3 \oplus \bar{X}_4$ の場合を考える。この空間での対称操作の表現行列は

$$\begin{aligned} D(2) &= \text{diag}(-i, i, -i, i) = -is_z\sigma_z, \\ D(m_{10}) &= \text{diag}(-i, i, -i, i) = -is_z \end{aligned} \quad (\text{B.0.67})$$

である。

Case I: σ の巻き付き数が 4

対ポテンシャルは A_1 表現であるから、 $[\Gamma, D(2)] = 0$ を満たすカイラル変換は $\Gamma = s_z$ ととれば良い。すなわち、

$$\begin{aligned} \Gamma D(2) &= -i\sigma_z, \\ \Gamma D(m_{10}) &= -i \end{aligned} \quad (\text{B.0.68})$$

これは $W[2] = 0, W[m_{10}] = 4$ を意味する。これより、指標は

$$\begin{aligned} \chi^\pm(2) &= \frac{0 - (-4)}{4} \pm \frac{0 - (-4)}{4} = 2, 0, \\ \chi^\pm(m_{10}) &= \frac{0 - (-4)}{4} \pm \frac{-16 - (-4)}{4} = -2, 4, \end{aligned} \quad (\text{B.0.69})$$

となる。既約分解すると

$$\text{電氣的：} 2A_2 \quad (\text{B.0.70})$$

$$\text{磁氣的：} 2A_1 + 2B_2 \quad (\text{B.0.71})$$

このとき、電氣的な演算子の既約表現が A_2 表現のみであるため、2つのマヨラナクラマース対はグライド対称性にも保護されている (A_2 表現の電氣的な摂動で、グライド対称性は破れる)。

Case I: C_2 の巻き付き数が 4

一方、カイラル変換を $\Gamma = s_z\sigma_z = \text{diag}(1, -1, -1, 1)$ ととってもよい。このときは、

$$\begin{aligned} \Gamma D(2) &= -i, \\ \Gamma D(m_{10}) &= -i\sigma_z \end{aligned} \quad (\text{B.0.72})$$

これは $W[2] = 4, W[m_{10}] = 0$ を意味する。このとき、指標は

$$\begin{aligned}\chi^\pm(2) &= \frac{0 - (-4)}{4} \pm \frac{0 - (-4)}{4} = -2, 4, \\ \chi^\pm(m_{10}) &= \frac{0 - (-4)}{4} \pm \frac{0 - (-4)}{4} = 2, 0,\end{aligned}\tag{B.0.73}$$

となる。既約分解すると

$$\text{電氣的} : 2B_2 \tag{B.0.74}$$

$$\text{磁氣的} : 2A_1 + 2A_2 \tag{B.0.75}$$

このときも電氣的な演算子の既約表現が B_2 表現のみであるため、2つのマヨラナクラマース対はグライド対称性にも保護されている。

付録C $\omega \rightarrow \infty$ で $\text{Re}[K_2]$ が定数になる理由

$\omega \rightarrow \infty$ で $\text{Re}[K_2]$ が ω に依存しなくなる理由は、(3.4.36) 式で分母分子で ω についての次数が同じためである。さらに、そうなる理由について考察すると3点あるように思われる。

(i) 計算している物理量が、ホール伝導度に相当する量であるため。

今面直磁場によって対称性が破れることで、スピン流応答が有限に残る。それを表しているのは、積分前の

$$\left[\frac{M_z}{E_{-,+}} - \frac{M_z}{E_{+,+}} \right]$$

の部分である。すなわち、分母にのみ波数 k ($\sim \omega$) に依存した項が現れている。これが、 $\sum_k \frac{1}{E_{+,-} - E_{-,+} + \omega + i\delta}$ から出てくる ω と打ち消し合うことで、最後の結果が ω の0次となる。

(iii) 考えている系の分散が k の一次であるため。

今マヨラナ準粒子の分散は

$$E_{\tau,\pm} = \pm \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + \tau v_2)^2}$$

で与えられる。もし、分散が k について2次の項を含む場合 ($E_{\tau,+} = mk^2 + \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + \tau v_2)^2}$), $x \equiv E_{+,+}(k) + E_{-,+}(k)$ なる変数変換で

$$x = 2mk^2 + \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} + \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2},$$

$$\frac{dx}{dk} = 4mk + \frac{k(v_1 + v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2} + k(v_1 - v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2}}{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}}$$

となり、積分前の式は

$$\text{Re}[K_2(\omega)] = -\frac{\pi v_2 \rho_2 M_z}{2\pi} \int_{2|M_z|}^{\infty} dx \delta(x - \omega)$$

$$\times \left[\frac{\sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}}{(v_1 + v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2} + (v_1 - v_2)^2 \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} + 4m \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}} \right]$$

$$\times \left[\frac{1}{E_{-,+}(k)} - \frac{1}{E_{+,+}(k)} \right], \quad \lim_{x \rightarrow \infty} k(x) \sim \sqrt{x} \quad (\text{C.0.1})$$

と変更される。最初の括弧内の分母 $4m \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 + v_2)^2} \sqrt{M_z^2 + k^2(v_1 - v_2)^2}$ の存在によって、 $\omega \rightarrow \infty$ では $\text{Re}[K_2(\omega)] \sim 0$ となる。

(ii) 考えている物理量が、 k の0次の項であるため。

スピン流・歪み演算子ともに k の1次である場合、単純に考えれば、積分核がもつ k の次数は k^2 分だけ増える。すなわち、 ω の次数もその分増えると考えられるため、 ω について定数となることはない。

付録D バルクと表面におけるスピン流演算子の関係

今から、バルクで定義されているスピン流演算子が表面に射影された際、これがどのような時に波数 k に依存するのかを議論する。

出発点は常伝導ハミルトニアン $h(\mathbf{k})$ である。系にはスピン自由度 J_α のみがあるとし、 k について2次の項までしかない場合を考える。ここで、 J_α は半整数スピンを表す行列である。今考えている系は時間反転対称性を有すると仮定する。このとき、 k の2次の項のスピン部分は単位行列 J_0 である。一方で、 k の1次の項のスピン部分は単位行列以外の行列 (J_α , $\alpha \neq 0$) である。すなわち、

$$h(\mathbf{k}) = f_0 k^2 J_0 + \sum_{i=x,y} \sum_{\alpha=x,y,z} g_{i\alpha} k_i J_\alpha \quad (\text{D.0.1})$$

ここで、実数 $f_0, g_{i\alpha}$ が有限になるかどうかは、系がもつ結晶対称性を満足するようにして決定される。スピン流演算子を速度演算子とスピン演算子の反交換から定義すると

$$j_i^\alpha = f_0 k_i J_\alpha + g_{i\alpha} \quad (i = x, y), (\alpha = x, y, z) \quad (\text{D.0.2})$$

で与えられる。ここで、後ほど(001)面に射影する場合を考えたいため、面内方向のスピン流のみを考えた。次に超伝導状態を考える。ここでは、クラスDIIIのトポロジカル超伝導を考えることにする。南部自由度を τ_i ($i = x, y, z$) で表すと、時間反転対称性がある場合、BdGハミルトニアンは τ_z に比例する項と τ_x に比例する項の和で書くことが出来る ($H(\mathbf{k}) = h(\mathbf{k})\tau_z + \Delta(\mathbf{k})\tau_x$, $\Delta(\mathbf{k})$ はペアポテンシャル)。このとき、時間反転演算子 Θ と粒子正孔演算子 C はそれぞれ $\Theta \equiv -iJ_y K$, $C \equiv -iJ_y \tau_y K$ で定義される。超伝導状態においてスピン流演算子を定義すると、スピン流の時間反転対称性より、

$$j_i^{\alpha, \text{BdG}} = [f_0 k_i J_\alpha + g_{i\alpha}] \tau_z \quad (i = x, y), (\alpha = x, y, z) \quad (\text{D.0.3})$$

となる。この式は粒子正孔対称性 $C j_{k_i}^{\alpha, \text{BdG}} C^{-1} = -j_{-k_i}^{\alpha, \text{BdG}}$ を満たしていることが分かる。もちろんこの演算子を表面に射影した場合も、粒子正孔対称性を有しているはずである。ここで、BdGハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ のゼロエネルギー状態を用いた表面((001)面)への射影を $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論から考える。まず、(001)面に n 回回転対称性が存在する場合 ($n \geq 2$)、 $H(0, 0, k_z)$ は J に対して対角的になっている。すなわち、 Γ 点周りの $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動で考えるBdGハミルトニアンとその固有状態は J_z の固有値 j_z で分割できる。すなわち、ゼロエネルギー状態が存在するならば、それらは同時に J_z の固有状態でもあり、固有値 j_z でラベル付けできる。また、付録Aでも述べたように、ゼロエネルギー状態はカイラル対称性 $\tau_y = \Theta C$ の固有状態でもある。したがって、 $J_z \tau_0$ と $J_0 \tau_y$ は交換するので、ゼロエネルギー状態をこれらの固有状態の直積として

$$|u_\tau^{j_z}\rangle = |\phi^{j_z}\rangle \otimes |\psi_\tau\rangle, \quad (\text{D.0.4})$$

のように表すことができる。 $\tau = \pm 1$ はゼロエネルギー状態のカイラリティを表す。ここで、時間反転によって J_z の固有値とカイラリティの符号は反転する（カイラル演算子と時間反転演算子は反交換するため）ことに注意する。以上より、1次摂動の範囲で表面におけるスピンの演算子 $j_i^{\alpha, \text{surface}}$ の表式は、行列要素

$$\langle u_\tau^{j_z} | j_i^{\alpha, \text{BdG}} | u_{\tau'}^{j_z'} \rangle \quad (\text{D.0.5})$$

を計算すれば求めることができる。

まずゼロエネルギー状態が2つ（すなわち、マヨラナ準粒子が2つ）しか存在しない場合を考える。このとき、これらのゼロエネルギー状態はクラマース対を組む。すなわち、ゼロエネルギー状態 $|u_\tau^{j_z}\rangle$ に対して、もう1つの状態はその時間反転 $\Theta |u_\tau^{j_z}\rangle \propto |u_{-\tau}^{-j_z}\rangle$ で与えられる。したがって、各々の行列を計算すると、対角要素に関しては

$$\begin{aligned} \langle u_\tau^{j_z} | j_i^{\alpha, \text{BdG}} | u_\tau^{j_z} \rangle &= \langle \psi_\tau | \otimes \langle \phi^{j_z} | [f_0 k_i J_\alpha + g_{i\alpha}] \tau_z | \phi^{j_z} \rangle \otimes | \psi_\tau \rangle \\ &\propto \langle \psi_\tau | \otimes \langle \phi^{j_z} | [f_0 k_i J_\alpha + g_{i\alpha}] | \phi^{j_z} \rangle \otimes | \psi_{-\tau} \rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{D.0.6})$$

となる。ここで、 τ_z はカイラル演算子 τ_y と反交換するため、 $\tau_z | \psi_\tau \rangle \propto | \psi_{-\tau} \rangle$ となることを用いた。次に非対角要素を考えると

$$\begin{aligned} \langle u_\tau^{j_z} | j_i^{\alpha, \text{BdG}} | u_{-\tau}^{-j_z} \rangle &= \langle \psi_\tau | \otimes \langle \phi^{j_z} | [f_0 k_i J_\alpha + g_{i\alpha}] \tau_z | \phi^{-j_z} \rangle \otimes | \psi_{-\tau} \rangle \\ &\propto \langle \psi_\tau | \otimes \langle \phi^{j_z} | [f_0 k_i J_\alpha + g_{i\alpha}] | \phi^{-j_z} \rangle \otimes | \psi_\tau \rangle \\ &\propto \langle \phi^{j_z} | [f_0 k_i J_\alpha + 0] | \phi^{-j_z} \rangle \\ &\propto k_i \end{aligned} \quad (\text{D.0.7})$$

ここで、カッコの中の第2項目は J について単位行列であるので0となる。すなわち、以上の議論から、マヨラナ準粒子が2つしかない時（マヨラナクラマース対が1対のみの時）は、 k の0次のスピンの流は現れないことが分かる。

次に、マヨラナクラマース対が2対存在するときを考える。この場合、同様の議論からクラマース対間の対角要素や非対角要素からは k の0次の項は現れない。しかしながら、非クラマース対間の行列要素を考えると

$$\begin{aligned} \langle u_\tau^{j_z} | j_i^{\alpha, \text{BdG}} | u_{-\tau}^{j_z} \rangle &= \langle \psi_\tau | \otimes \langle \phi^{j_z} | [f_0 k_i J_\alpha + g_{i\alpha}] \tau_z | \phi^{j_z} \rangle \otimes | \psi_{-\tau} \rangle \\ &\propto \langle \psi_\tau | \otimes \langle \phi^{j_z} | [f_0 k_i J_\alpha + g_{i\alpha}] | \phi^{j_z} \rangle \otimes | \psi_\tau \rangle \\ &\propto \langle \phi^{j_z} | [0 + g_{i\alpha}] | \phi^{j_z} \rangle \\ &\propto k^0 \end{aligned} \quad (\text{D.0.8})$$

のように k の0次の項が有限に残りえる。したがって、2対のマヨラナクラマース対が存在するときは、 k の0次のスピンの流が表面に現れても良い。これは歪みに対しても同様である。確かに本文中の表式（例えば表 3.2.1）をみると、非クラマース対間の行列要素に k の0次の成分をもつような（そしてクラマース対間の要素には0次の成分をもたない）行列になっている。

参考文献

- [1] E. Majorana: *Il Nuovo Cimento* **14** (1937) 171.
- [2] B. Kayser and A. S. Goldhaber: *Phys. Rev. D* **28** (1983) 2341.
- [3] M. Nowakowski, E. A. Paschos, and J. M. Rodríguez: *Eur. J. Phys.* **26** (2005) 545.
- [4] B. Kayser: *Phys. Rev. D* **26** (1982) 1662.
- [5] F. Boudjema, C. Hamzaoui, V. Rahal, and H. C. Ren: *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 852.
- [6] M. Nowakowski: *Phys. Rev. D* **64** (2001) 116001.
- [7] X.-L. Qi and S.-C. Zhang: *Rev. Mod. Phys.* **83** (2011) 1057.
- [8] J. Alicea: *Rep. Prog. Phys.* **75** (2012) 076501.
- [9] Y. Tanaka, M. Sato, and N. Nagaosa: *J. Phys. Soc. Jpn.* **83** (2012) 011013.
- [10] M. Sato and S. Fujimoto: *J. Phys. Soc. Jpn.* **85** (2016) 072001.
- [11] M. Sato and Y. Ando: *Rep. Prog. Phys.* **80** (2017) 076501.
- [12] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. D. Sarma: *Rev. Mod. Phys.* **80** (2008) 1083.
- [13] D. Aasen, M. Hell, R. V. Mishmash, A. Higginbotham, J. Danon, M. Leijnsea, T. S. Jespersen, J. A. Folk, C. M. Marcus, K. Flensberg, and J. Alicea: *Phys. Rev. X* **6** (2016) 031016.
- [14] C. W. J. Beenakker: *SciPost Phys. Lect. Notes* (2020) 15.
- [15] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. D. Sarma: *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 077001.
- [16] Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen: *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 177002.
- [17] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven: *Science* **336** (2012) 1003.
- [18] A. Das, Y. Ronen, Y. Most, Y. Ore, M. Heiblum, and H. Shtrikman: *Nat. Phys.* **8** (2012) 887.
- [19] M. T. Deng, C. L. Yu, G. Y. Huang, M. Larsson, P. Caroff, and H. Q. Xu: *Nano Letters* **12** (2012) 6414.
- [20] H. Zhang, C. Liu, S. Gazibegovic, and *et al.*: *Nature* **556** (2018) 74.

- [21] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, J. Li, H. Chen, S. Jeon, J. Seo, A. H. MacDonald, B. A. Bernevig, and A. Yazdani: *Science* **346** (2014) 602.
- [22] J.-P. Xu, M.-X. Wang, Z. L. Liu, J.-F. Ge, X. Yang, C. Liu, Z. A. Xu, D. Guan, C. L. Gao, D. Qian, Y. Liu, Q.-H. Wang, F.-C. Zhang, Q.-K. Xue, and J.-F. Jia: *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015) 017001.
- [23] H.-H. Suna, K.-W. Zhang, L.-H. Hu, C. Li, G.-Y. Wang, H.-Y. Ma, Z.-A. Xu, C.-L. Gao, D.-D. Guan, Y.-Y. Li, C. Liu, D. Qian, Y. Zhou, L. Fu, S.-C. Li, F.-C. Zhang, and J.-F. Jia: *Phys. Rev. Lett.* **116** (2016) 257003.
- [24] Q. L. He, L. Pan, A. L. Stern, E. C. Burks, X. Che, G. Yin, J. Wang, B. Lian, Q. Zhou, E. S. Choi, K. Murata, X. Kou, Z. Chen, T. Nie, Q. Shao, Y. Fan, S.-C. Zhang, K. Liu, J. Xia, and K. L. Wang: *Science* **357** (2017) 294.
- [25] S. Sasaki, M. Kriener, K. Segawa, K. Yada, Y. Tanaka, M. Sato, and Y. Ando: *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 217001.
- [26] D. Wang, L. Kong, P. Fan, H. Chen, S. Zhu, W. Liu, L. Cao, Y. Sun, S. Du, J. Schneeloch, R. Zhong, G. Gu, L. Fu, H. Ding, and H.-J. Gao: *Science* **362** (2018) 333.
- [27] Y.-F. Lv, W.-L. Wang, Y.-M. Zhang, H. Ding, W. Li, L. Wang, K. He, C.-L. Song, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue: *Sci. Bull.* **62** (2017) 852.
- [28] W. Liu, L. Cao, S. Zhu, and *et al.*: *Nat. Commun.* **11** (2020) 5688.
- [29] S. Frolov: *Nature* **592** (2021) 350.
- [30] S. Frolov and V. Mourik: *arXiv:2203.17060* (2022).
- [31] C.-K. Chiu, H. Yao, and S. Ryu: *Phys. Rev. B* **88** (2013) 075142.
- [32] T. Morimoto and A. Furusaki: *Phys. Rev. B* **88** (2013) 125129.
- [33] K. Shiozaki and M. Sato: *Phys. Rev. B* **90** (2014) 165114.
- [34] K. Shiozaki, M. Sato, and K. Gomi: *Phys. Rev. B* **93** (2016) 195413.
- [35] W. A. Benalcazar, J. C. Y. Teo, and T. L. Hughes: *Phys. Rev. B* **89** (2014) 224503.
- [36] C. Fang, B. A. Bernevig, and M. J. Gilbert: *arXiv:1701.01944* (2017).
- [37] S. Ono and H. Watanabe: *Phys. Rev. B* **98** (2018) 115150.
- [38] A. Skurativska, T. Neupert, and M. H. Fischer: *Phys. Rev. Research* **2** (2020) 013064.
- [39] S. Ono, Y. Yanase, and H. Watanabe: *Phys. Rev. Research* **1** (2019) 013012.
- [40] S. Ono, H. C. Po, and H. Watanabe: *Sci. Adv.* **6** (2020) eaaz8367.
- [41] M. Geier, P. W. Brouwer, and L. Trifunovic: *Phys. Rev. B* **101** (2020) 245128.
- [42] M. Sato and S. Fujimoto: *Phys. Rev. B* **79** (2009) 094504.

- [43] S. B. Chung and S.-C. Zhang: Phys. Rev. Lett. **103** (2009) 235301.
- [44] Y. Nagato, S. Higashitani, and K. Nagai: J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 123603.
- [45] R. Shindou, A. Furusaki, and N. Nagaosa: Phys. Rev. B **82** (2010) 180505.
- [46] T. Mizushima, M. Sato, and K. Machida: Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 165301.
- [47] Y. Tsutsumi, M. Ishikawa, T. Kawakami, T. Mizushima, M. Sato, M. Ichioka, and K. Machida: J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 113707.
- [48] T. Mizushima, Y. Tsutsumi, T. Kawakami, M. Sato, M. Ichioka, and K. Machida: J. Phys. Soc. Jpn. **85** (2016) 022001.
- [49] Y. Xiong, A. Yamakage, S. Kobayashi, M. Sato, and Y. Tanaka: Crystals **7** (2017) 58.
- [50] S. Kobayashi, A. Yamakage, Y. Tanaka, and M. Sato: Phys. Rev. Lett. **123** (2019) 097002.
- [51] Y. Yamazaki, S. Kobayashi, and A. Yamakage: J. Phys. Soc. Jpn. **89** (2020) 043703.
- [52] Y. Yamazaki, S. Kobayashi, and A. Yamakage: Phys. Rev. B **103** (2021) 094508.
- [53] S. Kobayashi, Y. Yamazaki, A. Yamakage, and M. Sato: Phys. Rev. B **103** (2021) 224504.
- [54] C.-R. Hu: Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 1526.
- [55] S. Kashiwaya and Y. Tanaka: Rep. Prog. Phys. **63** (2000) 1641.
- [56] M. Z. Hasan and C. L. Kane: Rev. Mod. Phys. **82** (2010) 3045.
- [57] A. Haim and Y. Oreg: Phys. Rep. **825** (2019) 1.
- [58] Y. S. Hor, A. J. Williams, J. G. Checkelsky, P. Roushan, J. Seo, Q. Xu, H. Zandbergen, A. Yazdani, N. P. Ong, and R. J. Cava: Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 057001.
- [59] L. Fu and E. Berg: Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 097001.
- [60] S. Sasaki, Z. Ren, A. A. Taskin, K. Segawa, L. Fu, and Y. Ando: Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 217004.
- [61] T. Hashimoto, K. Yada, M. Sato, and Y. Tanaka: Phys. Rev. B **92** (2015) 174527.
- [62] L. Fu: Phys. Rev. B **90** (2014) 100509.
- [63] K. Matano, M. Kriener, K. Segawa, Y. Ando, and G. qing. Zheng: Nature Physics **12** (2016) 852.
- [64] S. Yonezawa, K. Tajiri, S. Nakata, Y. Nagai, Z. Wang, K. Segawa, Y. Ando, and Y. Maeno: Nature Physics **13** (2017) 123.
- [65] L. Aggarwal, A. Gaurav, G. S. Thakur, Z. Haque, A. K. Ganguli, and G. Sheet: Nature Materials **15** (2016) 32.

- [66] H. Wang, H. Wang, H. Liu, H. Lu, W. Yang, S. Jia, X.-J. Liu, X. C. Xie, J. Wei, and J. Wang: *Nature Materials* **15** (2016) 38.
- [67] S. Kobayashi and M. Sato: *Phys. Rev. Lett.* **115** (2015) 187001.
- [68] T. Hashimoto, S. Kobayashi, Y. Tanaka, and M. Sato: *Phys. Rev. B* **94** (2016) 014510.
- [69] M. Oudah, A. Ikeda, J. N. Hausmann, S. Yonezawa, T. Fukumoto, S. Kobayashi, M. Sato, and Y. Maeno: *Nat. Commun.* **7** (2016) 13617.
- [70] T. Kawakami, T. Okamura, S. Kobayashi, and M. Sato: *Phys. Rev. X* **8** (2018) 041026.
- [71] Y. Ueno, A. Yamakage, Y. Tanaka, and M. Sato: *Phys. Rev. Lett.* **111** (2013) 087002.
- [72] J. C. Teo and T. L. Hughes: *Phys. Rev. Lett.* **111** (2013) 047006.
- [73] F. Zhang, C. L. Kane, and E. J. Mele: *Phys. Rev. Lett.* **111** (2013) 056403.
- [74] E. Cornfeld and A. Chapman: *Phys. Rev. B* **99** (2019) 075105.
- [75] A. Daido, T. Yoshida, and Y. Yanase: *Phys. Rev. Lett.* **122** (2019) 227001.
- [76] X. Wen and A. Zee: *Nucl. Phys. B* **316** (1989) 641.
- [77] M. Sato, Y. Tanaka, K. Yada, and T. Yokoyama: *Phys. Rev. B* **83** (2011) 224511.
- [78] M. I. Aroyo, D. Orobengoa, G. de la Flor, E. S. Tasci, J. M. Perez-Mato, and H. Wondratschek: *Acta Cryst. A* **70** (2014) 126.
- [79] E. Tasci, G. de la Flor, D. Orobengoa, C. Capillas, J. Perez-Mato, and M. Aroyo: *EPJ Web of Conferences* **22** (2012) 00009.
- [80] L. Elcoro, B. Bradlyn, Z. Wang, M. G. Vergniory, J. Cano, C. Felser, B. A. Bernevig, D. Orobengoa, G. de la Flor, and M. I. Aroyo: *J Appl. Cryst.* **50** (2017) 1457.
- [81] T. Kariyado and M. Ogata: *J. Phys. Soc. Jpn.* **80** (2011) 083704.
- [82] T. Kariyado and M. Ogata: *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** (2012) 064701.
- [83] T. H. Hsieh, J. Liu, and L. Fu: *Phys. Rev. B* **90** (2014) 081112.
- [84] M. I. Aroyo, A. Kirov, C. Capillas, J. M. Perez-Mato, and H. Wondratschek: *Acta Cryst.* **A62** (2006) 115.
- [85] M. Matsuo, J. Ieda, K. Harii, E. Saitoh, and S. Maekawa: *Phys. Rev. B* **87** (2013) 180402.
- [86] M. Sato, Y. Takahashi, and S. Fujimoto: *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009) 020401.
- [87] A. Y. Kitaev: *Phys. Usp.* **44** (2001) 131.
- [88] A. Cook and M. Franz: *Phys. Rev. B* **84** (2011) 201105.
- [89] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven: *Science* **336** (2014) 1003.

- [90] G. E. Volovik: JETP Lett. **70** (1999) 609.
- [91] N. Read and D. Green: Phys. Rev. B **61** (2000) 10267.
- [92] S. D. Sarma, C. Nayak, and S. Tewari: Phys. Rev. B **73** (2006) 220502.
- [93] L. Fu and C. Kane: Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 096407.
- [94] H. Sumiyoshi and S. Fujimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 023602.
- [95] K. Nomura, S. Ryu, A. Furusaki, and N. Nagaosa: Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 026802.
- [96] Y. Shimizu, A. Yamakage, and K. Nomura: Phys. Rev. B **91** (2015) 195139.
- [97] B. Lüthi: *Ultrasonics in Superconductors* (Springer, Berlin, 2005).
- [98] T. Tsuneto: Phys. Rev. **121** (1961) 402.
- [99] L. P. Kadanoff and I. I. Falko: Phys. Rev. **136** (1964) A1170.
- [100] Y. Yamazaki, S. Kobayashi, and A. Yamakage: J. Phys. Soc. Jpn. **90** (2021) 073701.
- [101] A. Widera and H. Schäfer: Mater. Res. Bull. **15** (1980) 1805.
- [102] J. Nuss, C. Mühle, K. Hayama, V. Abdolazimi, and H. Takagi: Acta Crystallogr. B **71** (2015) 300.
- [103] T. Funato and M. Matsuo: Journal of Magnetism and Magnetic Materials **540** (2021) 168436.
- [104] D. Kobayashi, T. Yoshikawa, M. Matsuo, R. Iguchi, S. Maekawa, E. Saitoh, and Y. Nozaki: Phys. Rev. Lett. **119** (2017) 077202.
- [105] S. Tateno, G. Okano, M. Matsuo, and Y. Nozaki: Phys. Rev. B **102** (2020) 104406.
- [106] T. Kawada, T. Funato, H. Kohno, and M. Hayashi: Sci. Adv. **7** (2021) eabd9697.

謝辞

指導教官である山影相先生（名古屋大学理学研究科講師）には、修士課程の時も含め5年もの間指導して頂きました。私自身まだまだ研究者として未熟の至りではありますが、これから先研究者として生きていく道を迷わず進めるのは先生のおかげです。心から感謝致します。同研究室の河野浩先生（名古屋大学理学研究科教授）には、博士課程における研究室での活動において、多くの場面でご相談に乗って頂き、研究に専念することが出来ました。またセミナー等における研究発表時には、鋭いご指摘やご助言を頂きました。深く感謝致します。St 研の先輩方である山口皓史さん、中根丈太郎さん、船戸匠さん、今井悠介さんには、在学中に日頃から雑談や研究の議論にお付き合い頂き、そのおかげで高いモチベーションを維持することができました。研究生生活においてとても大きな励みとなりました。感謝致します。St 研の学生として大学院生活を過ごした時間は、私にとって大きな財産です。

修士課程の頃より、共同研究者である理化学研究所 (CEMS) 小林伸吾研究員には非常に多くの議論をして頂きました。具体的な研究内容だけでなく、論文の執筆や学会での発表、さらに研究活動に関連する申請書類等について、多くの有益なご助言を頂き、大変勉強になりました。深く感謝致します。田仲由喜夫先生（名古屋大学工学研究科教授）には、研究室での発表の機会を頂くだけでなく、セミナーに招いて頂くなど、多くの貴重な経験を得ることが出来ました。また、本研究の主題であるマヨラナ準粒子に関して、自身の研究内容とは異なる視点からのご指摘を数多く頂きました。心より感謝致します。本論文の審査にあたり、審査委員である谷山智康先生（名古屋大学理学研究科教授）、小林義明先生（名古屋大学理学研究科准教授）には有益なご意見を頂きました。深く感謝致します。

本研究は JSPS 科研費 No.22J14452 の助成と JST 次世代研究者挑戦的研究プログラム JP-MJSP2125 の財政支援を受けたものです。厚くお礼申し上げます。

最後に、両親と兄の支えが無ければ、私のこれまではありませんでした。最大限の感謝と敬意を表します。