

論文の要旨

氏名 吉村 幸徳

論文題目 Theoretical study on the surface states of topological insulators
(トポロジカル絶縁体の表面状態に関する理論的研究)

近年、トポロジカル絶縁体と呼ばれる物質群が注目を集めている。従来のバンド絶縁体とは異なり、これらの物質群は「トポロジカル指数」という新しい概念によって特徴付けられる。トポロジカル絶縁体は非自明なトポロジカル指数を持つバンド絶縁体であり、バルクでは通常のバンド絶縁体として振る舞うが試料表面に金属的な表面状態を持つ。この金属的な表面状態の存在はトポロジカル指数により保証されており、不純物等により簡単に破壊されることは無い。

トポロジカル指数による量子状態の特徴付けは、量子ホール効果の研究で導入された Thouless, Kohmoto, Nightingale and Nijs によるホール伝導度の公式 (TKNN 公式) に端を発している。量子ホール効果は強磁場中の二次元電子系においてホール伝導度が試料の形状に依らず e^2/h (量子抵抗 $\sim 26k\Omega$ の逆数) の整数倍に量子化される現象であるが、TKNN 公式に依ればバルクでのホール伝導度を特徴付ける整数 ν は量子状態を表す波動関数の大域的構造を反映したトポロジカル指数に等しい。また、この整数 ν は試料に端を作ったときに現れるカイラルなエッジ状態の数にも一致することが知られている。トポロジカル指数は波数空間全域における波動関数の大域的な構造によって決定され、試料の実空間での構造は反映されないが、試料に端を作ったときに現れるエッジ状態の性質も表すことができる。これをバルク・エッジ対応と称する。

磁場中で起こる量子ホール効果に対し、最近注目されている Bi_2Se_3 などの三次元トポロジカル絶縁体は、スピン軌道相互作用により非自明な量子状態にある物質群である。磁場無しで実現できるこの種のトポロジカル絶縁体は時間反転対称性を有し、電子のスピン方向と運動量の向きがロックしたヘリカルな表面状態を持つ。スピンの向きを反転させなければ電子の運動量を逆向きにすることができないという制約があるので、非磁性不純物による 180° の後方散乱が禁止される。このため電気伝導度は不純物による影響をあまり受けないので、トポロジカル絶縁体の表面状態を利用した超低消費電力デバイスの実現が期待されている。本研究においても、そのようなデバイス実現に向けて一つの具体的な提案を行った。

トポロジカル絶縁体の表面状態は理想的にはギャップレスであるが、例えば、その厚さがナノスケールである薄膜状の試料では、表と裏にある表面状態同士が混成することによって生じる有限サイズ効果によってギャップが開く。本研究の重要な柱の一つは、トポロジカル絶縁体の表面状態におけるこのような有限サイズ効果の生じ方を明らかにしたことである。また、トポロジカルな性質は空間次元に強く依存する。このため本研究では、二次元系における詳細なトポロジカル相の分類とその特徴付けのための処方箋を提示し、さらに、薄膜系を考えることにより二次元から三次元へのトポロジカルな性質の次元間クロスオーバーにも焦点を当てた。

トポロジカル絶縁体は表面状態の不純物に対する応答の違いによって、「強い」トポロジカル絶縁体と「弱い」トポロジカル絶縁体に分類される。「強い」/「弱い」の示すところは不純物に対する頑強性であるが、これらの異なるトポロジカル相ではヘリカルな表面状態の現れ方も違う。例えば、強いトポロジカル絶縁体において表面状態は等方的に現れるが、弱いトポロジカル絶縁体は異方的な表面状態を持つ。本研究では、このようなトポロジカル絶縁体に対する異方性の効果にも着目した。また、超格子のような空間的非一様性を持つ系のトポロジカルな性質についても研究を行った。

本博士論文の構成は以下の通りである。

- 1章：一般的導入
- 2章：トポロジカル絶縁体の諸性質について
- 3章：二次元における詳細なトポロジカル相の分類とその特徴付けについて
- 4章：二次元から三次元へのトポロジカルな性質の次元間クロスオーバーについて
- 5章：トポロジカルに保護された完全伝導チャンネルの提案
- 6章：まとめ

以下では、3章から5章までの各章で議論する内容について、もう少し各論的に述べる。

3章：簡単のために二次元のモデルを用いて空間的な異方性や非一様性がトポロジカルな性質へ与える影響を考えた。トポロジカル絶縁体の標準的なモデルとして用いられるWilson-Dirac 模型にある種の変調を加え、異方性あるいは非一様性の効果を導入した。異方性や非一様性の導入により三次元系と同様に異方的な表面状態を持つ弱いトポロジカル絶縁体が二次元でも存在し得ることを示した。しかし、トポロジカル相を分類する指数として、三次元のトポロジカル絶縁体に対しては一つの「強い（トポロジカル）指数」に加えて三つの「弱い（トポロジカル）指数」が与えられているが、二次元系に対しては強い指数一つのみであった。強い指数しか持たない二次元のトポロジカル絶縁体では弱いトポロジカル絶縁体相と通常の絶縁体相を区別できなかったが、本研究ではこれらを区別する処

方箋を提案した。

弱トポロジカル相を特徴付けるため、異方性あるいは非一様性を導入したモデル群を 1) 異方的ホッピングまたは次近接ホッピングを含む場合、2) 超格子構造の 2 種類に分類し、それぞれに適した分類方法を提案した。まず前者に対しては、多様体へのマッピングを用いる方法を提案した。一方、後者に対しては、超格子構造を反映してハミルトニアンの変換行列の次元が大きくなるため上の方法の適用は困難である。そこで、適切な Wilson ループに沿った Berry 位相（これが 0 または π に量子化する）によって、弱い相のトポロジカルな分類が可能であることを示した。

4 章：トポロジカル絶縁体の薄膜を擬二次元系とみなし二次元的な Z_2 指数を計算することによってトポロジカルな分類を行った。モデルとして z 軸方向のみ実空間表示した Wilson-Dirac 模型を使用した。積層数 N とバンドギャップの大きさを表すパラメータ m_0 の関数として Z_2 指数を計算し、相図を明らかにした。今回、 Z_2 指数を計算する方法として Fu-Kane による反転対称性の下で使えるパリティ固有値計算による方法を薄膜系に実装した。次に、積層数を増やすと二次元的な量子スピンホール系のエッジ状態から三次元的な強いあるいは弱いトポロジカル絶縁体の表面状態へのクロスオーバーが起こる事を明らかにするため、薄膜系での電気伝導度を計算した。 Z_2 指数と同様に N と m_0 の関数として伝導度を求め、その結果に基づいて相図の作成を行った。

5 章：三次元の弱いトポロジカル絶縁体の表面にナノスケールの立体構造を微細加工することにより、トポロジカルに保護された一次元的な完全伝導チャンネルを作成できることを示した。弱いトポロジカル絶縁体は通常の絶縁体と断熱的につながっているため、いわゆる強いトポロジカル絶縁体と異なり不純物に対して「弱い」とみなされていた。しかし、今回トポロジカルな性質と有限サイズ効果が絡み合った結果、トポロジカルに保護された完全伝導チャンネルを作成できることが分かった。この性質を利用すれば弱いトポロジカル絶縁体の表面に完全伝導なナノ回路を構成することができるため、より一般的な強いトポロジカル絶縁体よりも優れた機能材料と成り得る。

本研究ではトポロジカル絶縁体やその表面状態に関して、空間的な異方性や非一様性の影響、次元間でのトポロジカルな性質のクロスオーバー、有限サイズ効果および不純物に対する応答に着目し、これらを個別あるいは互いに絡み合わせた場合を網羅的に研究することによってその振る舞いを明らかにした。また、トポロジカルな性質の制御法や表面状態を利用した完全伝導チャンネルの創出といったトポロジカル絶縁体の工学的応用へのアプローチを示すことができた。