

Nara Women's University

二次元蜂の巣格子トポロジカル絶縁体からなるリボンの輸送現象に関する理論的研究：
端の形状の違いに起因する効果

メタデータ	言語: Japanese 出版者: 公開日: 2023-03-22 キーワード (Ja): リボンの輸送現象, 二次元蜂の巣格子トポロジカル絶縁体 キーワード (En): 作成者: 辰己, 智子 メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/10935/5408

(別紙1)

論文の内容の要旨

氏名	辰己 智子		
論文題目	(外国語の場合は、日本語で訳文を()を付して記入すること。) 2次元蜂の巢格子トポロジカル絶縁体からなるリボンの輸送現象に関する理論的研究 — 一端の形状の違いに起因する効果 —		
審査委員	区分	職名	氏名
	委員長		印
	委員		印
内容の要旨			
<p>トポロジカル絶縁体は、物質内部ではエネルギーギャップを有する絶縁体であるが、2次元ではその端、3次元ではその表面に伝導状態が現れるという新奇な電子状態を示す。この伝導状態はヘリカルエッジ状態と呼ばれ、上向きスピンの電子と下向きスピンの電子が互いに反対向きに運動しスピン流を運ぶという特徴を持っている。トポロジカル絶縁体は、新たな物理現象・物理概念を生み出す舞台として、また新デバイスへの応用の可能性を秘めた物質として、世界中で注目され研究が進められている。</p> <p>このようなトポロジカル絶縁体の候補物質として、IV族元素であるケイ素、ゲルマニウム、スズが蜂の巣格子状に2次元的に広がった単原子層物質（それぞれ、シリセン、ゲルマネン、スタネンと呼ばれる）があげられる。IV族元素からなる蜂の巣格子単原子層物質としては、炭素からなるグラフェンがよく知られている。グラフェンとこれらの物質との違いは、前者は平坦な構造をとるのに対し、後者はA副格子とB副格子が異なる平面に整列するというバックル構造をとっていることである。さらに、グラフェンでは無視できるスピン軌道相互作用が後者では有意な大きさで存在する。このスピン軌道相互作用によってシリセン、ゲルマネン、スタネンはトポロジカル絶縁体となりうるのである。また、バックル構造のため、試料面に垂直に電場を印加することにより、A副格子とB副格子に異なるポテンシャルを導入することができる。この交替ポテンシャルの制御により、トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体（自明な絶縁体）との間の量子相転移が引き起こされる。</p> <p>本学位論文では、このような性質を有する2次元蜂の巣格子トポロジカル絶縁体がナノメートルサイズの幅を持つリボンとなった系の輸送特性の理論的考察を行っている。大規模な数値シミュレーションと解析的な計算を組み合わせることにより、多くの重要な知見を得ている。2次元蜂の巣格子のリボンには、その端の形状の基本形としてジグザグ端とアームチェア端の2種類が存在する。上で述べたように、2次元トポロジカル絶縁体の電気伝導は端に局在したヘリカルエッジ状態によって担われるため、端の形状の違いが輸送特性に影響を及ぼすことが期待される。このような観点から、ジグザグ型リボンとアームチェア型リボン</p>			

の結果を比較しながら議論が進められている。以下に、本学位論文の構成とその内容について述べる。

第1章では、まず本研究の背景が述べられている。そこでは、現代のナノテクノロジーを支えるナノ物質、ナノサイエンスに関して簡潔にまとめられている。同時に、2次元蜂の巢格子トポロジカル絶縁体の輸送特性を研究するという本研究の目的がその理由とともに述べられている。

第2章では、本研究で対象とする2次元蜂の巢格子トポロジカル絶縁体の性質が簡潔にまとめられている。まず、自明な絶縁体とトポロジカル絶縁体を区別するチャーン数が導入されている。次に、シリセン、ゲルマネン、スタネンの第一原理計算による先行研究の結果および実験による作成方法が紹介されている。さらに、本研究で数値シミュレーションに用いた格子モデルである Kane-Mele 模型が紹介されている。この模型は、最近接格子間の電荷移動に加え、スピン軌道相互作用を表す次近接格子間電荷移動と交替ポテンシャルを含む。この模型と上記物質との対応を明らかにした先行研究の結果が紹介されているとともに、チャーン数の計算に基づくこの模型の相図が議論されている。

第3章では、本研究で用いる Kane-Mele 模型からなるリボンの電子状態が、ジグザグ端を持つ系とアームチェア端を持つ系の比較をしながら詳細に記述されている。両方の試料においてヘリカルエッジ状態は存在するが、同じパラメータの場合にはジグザグ端の方がより端に局在している。また、ヘリカルエッジ状態にある電子の速度は、ジグザグ端の場合はスピン軌道相互作用の強さに比例するが、アームチェア端の場合には最近接格子間電荷移動の大きさに比例する。さらに、異なるバレーチャーン数を持つ自明な絶縁体を接合した系のバンド構造や、接合境界に現れる新たな伝導状態の波動関数の振る舞いが詳細に記述されている。

第4章では、本研究で用いる数値シミュレーションのための定式化が行われている。先行研究では最近接格子間の電荷移動のみを含む模型での定式化が行なわれていた。しかしながら、上で述べたように本研究で用いる Kane-Mele 模型の特徴は次近接格子間の電荷移動が存在することである。したがって、先行研究を次近接格子間の電荷移動を含むように拡張している。この定式化がジグザグ端を有するリボンとアームチェア端を有するリボンの両方で行われている。

第5章では、伝導電子のスピンを反転しない通常の不純物が存在する場合は詳細に議論されている。まず、端にのみ不純物が存在する場合は考察されている。この場合には、2種類のリボンとも、ポテンシャル散乱を強くしてもヘリカルエッジ状態の輸送特性は不純物の影響を受けないことが示されている。次に、不純物が系全体に分布している場合は考察されている。そこでは、不純物散乱によって波動関数の局在（アンダーソン局在）が起こることが示されている。通常の1次元電子系では、無限小の乱れにより局在が起こることが知られているが、本研究で調べたリボンの場合には乱れの大きさに閾値が存在し、閾値よりも大きな乱れの場合に局在が起こることが見いだされている。また、異なるバレーチャーン数を持つ自明な絶縁体を接合した系の接合境界に現れる伝導状態は、境界近傍に存在する不純物によって影響を受けること、また無限小の乱れにより局在することが示されている。

第6章では、伝導電子のスピンを反転する磁性不純物が1個存在する場合は詳細に議論されている。1個の不純物が端近傍に存在する場合には、ポテンシャルを強くすると、透過率は最初減少するがその後増加して1に近づくという非単調な振る舞いが得られている。また、不純物がジグザグ端やアームチェア端にある場合には、透過率はほとんどエネルギーに依存しないが、他の位置にある場合には、エネルギーの関数としても非単調な振る舞いを示すという結果が得られている。不純物の位置におけるヘリカルエッジ状態の電子の存在確率が小さい場合、これらの結果はT行列によって得られた有効ポテンシャルによるヘリカルエッジ状態の散乱というモデルで定量的に説明できることが示されている。さらに、自明な絶縁体からなる接合系では、コンダクタンスのエネルギー依存性は磁性不純物と通常の不純物でほとんど変わらないことが理由とともに記されている。

第7章では、本学位論文で得られた成果のまとめが行われている。

(別紙2)

論文審査の結果の要旨

氏名	辰己 智子		
論文題目	(外国語の場合は、日本語で訳文を()を付して記入すること。) 2次元蜂の巢格子トポロジカル絶縁体からなるリボンの輸送現象に関する理論的研究 — 一端の形状の違いに起因する効果 —		
審査委員	区分	職名	氏名
	委員長		印
	委員		印
要旨			
<p>本学位論文では、2次元蜂の巢格子トポロジカル絶縁体がナノメートルサイズの幅を持つリボンとなっている系の輸送特性についての理論的研究を行っている。大規模な数値シミュレーションと解析的な計算を組み合わせ考察を行い、多くの重要な知見を得ている。</p> <p>本研究で利用した格子模型における輸送特性の数値シミュレーションでは、しばしば再帰グリーン関数を援用した手法が用いられる。従来の研究では、最近接格子間の電荷移動のみを含む模型が取り扱われてきた。一方、2次元蜂の巢格子単原子層物質がトポロジカル絶縁体となりうるのは、次近接電荷移動で表されるスピン軌道相互作用に起因する。したがって、再帰グリーン関数を用いた数値シミュレーションに基づいて2次元蜂の巢格子トポロジカル絶縁体の輸送特性を解析するには、先行研究で行われた定式化を次近接格子間電荷移動を含むよう拡張する必要がある。学位申請者は、ジグザグ端を有するリボンとアームチェア端を有するリボンの両方に対してこの拡張に成功した。その成果は2次元蜂の巢格子模型の輸送現象の理論研究に新たな道を切り開くものとして高く評価される。この定式化に基づいて数値シミュレーションプログラムを作成し、2次元蜂の巢格子トポロジカル絶縁体リボンおよび異なるチャーン数で指定される2つの自明な絶縁体の接合系からなるリボン（以下、異なる自明な絶縁体の接合系と省略）の輸送特性を議論した。</p> <p>スピン反転を含まない通常の不純物が存在する場合の結果は以下のとおりである。</p> <p>(1) 不純物が端に存在する場合 不純物ポテンシャルの強さや端の形状にかかわらず、ヘリカルエッジ状態による伝導は不純物ポテンシャルの影響を受けず、完全透過する。</p> <p>(2) 不純物が系全体に分布している場合 端の形状にかかわらず不純物散乱を強くするとアンダーソン局在が起こる。このとき局在が起こる散乱の強さに有限の臨界値があるが、これは通常の1次元電子系とは異なる性質である。臨界値は2種類のリボンで違いはないが、局在長はジグザグ型リボ</p>			

ンの方が長い。また、幅が狭いほど、交替ポテンシャルが大きいほど局在しやすい。

- (3) 異なる自明な絶縁体の接合系において、1個の不純物とその境界付近に存在する場合接合境界付近の伝導状態にある電子は端の形状にかかわらず不純物によって散乱される。これは上で述べたヘリカルエッジ状態とは異なる性質である。
- (4) 異なる自明な絶縁体の接合系において、不純物が系全体に分布している場合アンダーソン局在が起こり、その散乱の強さの臨界値はほぼゼロとなっている。また、ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンともに交替ポテンシャルが大きいほど局在しやすい。さらに、ジグザグ型リボンでは幅が広いほど、アームチェア型リボンでは幅が狭いほど局在しやすい。

上記の(1)の結果は従来の研究の中で知られていた事実の確認といえるが、ポテンシャルをいくら強くしてもヘリカルエッジ状態は影響を受けないことを初めて示している。(2)のランダムポテンシャルによる局在に関しては、無限小の乱れで局在が起こる通常の1次元電子系とは異なり、ヘリカルエッジ状態の局在には有限の大きさの乱れが必要であることを初めて示すとともに、その乱れの臨界値や局在長の、端の形状、リボンの幅および交替ポテンシャルの効果を詳細に論じている。このように(1)と(2)の成果はトポロジカル絶縁体の端に形成されるヘリカルエッジ状態の伝導特性を明らかにしたのものとして高く評価される。さらに(3)と(4)の異なる自明な絶縁体の接合系の接合境界に形成される伝導状態に関しては、その存在は知られていたが、その状態が担う電気伝導に関しては考察が行われていなかった。それゆえ、本研究の成果は、この状態とトポロジカル絶縁体の端に形成されるヘリカルエッジ状態との違いを明らかにした初めての研究として評価される。

伝導電子のスピンを反転させる不純物が1個存在する場合の結果は以下のとおりである。

- (1) 不純物が端近傍に存在する場合

不純物がどの位置にあっても、ポテンシャルを強くすると、透過率は最初減少するがその後増加して1に近づくという非単調な振る舞いを示す。また、不純物がジグザグ端やアームチェア端にある場合には、透過率はほとんどエネルギーに依存しないが、他の位置にある場合には、エネルギーの関数としても非単調な振る舞いを示す。このような透過率の非自明な振る舞いを、有効ポテンシャルを有する1次元模型を用いて解析した。この手法は、ポテンシャルが比較的弱い場合や不純物が存在する位置でのヘリカルエッジ状態にある電子の存在確率が小さい場合には数値シミュレーションの結果を再現している。

- (2) 異なる自明な絶縁体の接合系において、不純物が接合境界付近に存在する場合境界付近に現れる状態による伝導は端の形状にかかわらず不純物によって抑制され、通常の不純物が存在する場合と類似した結果を示す。

上記(1)に関して、先行研究では、ジグザグ型試料において不純物がB副格子にある場合の結果を得ている。本研究ではA副格子に存在する場合およびアームチェア型の系への議論の拡張を行い、定性的には同様の結果を得た。また、先行研究の解析は強結合の場合に適切なものであり、3つのフィッティングパラメータを利用しているが、本研究で提唱された有効ポテンシャルの方法は、弱結合の場合に正当化される取り扱いである。実際、不純物ポテンシャルが比較的弱い場合や不純物がA副格子(ヘリカルエッジ状態にある電子の存在確率がB副格子に比べ小さい)に存在する場合には、フィッティングパラメータなしにシミュレーション結果を再現している。また、(2)に関しては、異なる自明な絶縁体の接合系の接合境界に現れる伝導状態の性質を明らかにしたものである。これらの成果は、トポロジカル絶縁体における伝導状態への磁性不純物の効果の解明に貢献したのものとして高く評価される。

以上のように、本研究は2次元蜂の巣格子トポロジカル絶縁体からなるリボンの輸送特性に関して詳細に研究したもので、そこで得られた多くの成果はトポロジカル絶縁体の研究に大きな貢献をしたものとして高く評価される。よって、本学位申請論文は、奈良女子大学博士(理学)の学位を授与されるに十分な内容を有していると判断した。