

# 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	<a href="http://hdl.handle.net/10935/5408">http://hdl.handle.net/10935/5408</a>

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 —

奈良女子大学大学院人間文化研究科  
博士後期課程複合現象科学専攻  
辰己 智子

2020年3月5日



# 目次

第 1 章	序論	5
1.1	はじめに	5
1.2	本研究の目的	6
1.3	本論文の構成	7
第 2 章	2次元蜂の巢格子トポロジカル絶縁体	9
2.1	チャーン数	9
2.2	シリセン・ゲルマネン・スタネン	10
2.3	Kane-Mele 模型	13
第 3 章	Kane-Mele 模型からなるリボンの電子状態	19
3.1	本研究で用いる模型	19
3.2	バンド構造と波動関数	19
3.3	異なるバレーチャーン数を持つ相の接合系	23
第 4 章	数値シミュレーションのための定式化	33
4.1	ランダウアー公式	33
4.2	再帰グリーン関数によるコンダクタンスの定式化	33
4.3	チャネルの定義	39
4.4	散乱問題	42
4.5	再帰グリーン関数	45
第 5 章	結果 1 通常の不純物による散乱	49
5.1	数個の不純物が端に存在する場合	49
5.2	系全体にランダムに不純物が分布している場合	51
5.3	接合系の相境界に 1 個の不純物がある場合	54
5.4	接合系全体にランダムに不純物が分布している場合	58

---

第 6 章	結果 2 磁性不純物による散乱	65
6.1	先行研究 . . . . .	66
6.2	端近傍に 1 個の不純物が存在する場合のシミュレーション結果 . . . . .	67
6.3	1 次元模型における解析 . . . . .	70
6.4	有効ポテンシャルを用いた解析 . . . . .	73
6.5	接合系の境界付近に 1 個の不純物が存在する場合のシミュレーション結果	75
第 7 章	まとめ	79
付録 A	式 (2.16) の Berry 曲率とチャーン数の計算	83
付録 B	チャネル $n$ の速度 $v_n$ の導出	85
付録 C	1 次元連続体模型に磁性不純物が存在するときの透過率の導出	87
付録 D	1 次元格子模型に磁性不純物が存在するときの透過率の導出	89
付録 E	T-matrix を用いた有効ポテンシャル $V_{\text{eff}}$ の導出	93
参考文献		95

# 第 1 章

## 序論

### 1.1 はじめに

ナノテクノロジーは様々な産業に対して革新をもたらす基盤技術として期待されており、世界各国で推進されている。このナノテクノロジーを支えているのが長さスケールがナノメートルオーダーの”ナノ物質”とそれらが示す非自明な現象を対象とする基礎科学の”ナノサイエンス”である。現在ナノ物質の中でも特に蜂の巣格子状に原子が配列している 2 次元単原子層物質が注目を集めている。もっとも代表的な蜂の巣格子 2 次元単原子層物質はグラフェンである。グラフェンは IV 族に属する炭素原子が共有結合によって蜂の巣格子状に結合し 2 次元的に広がった単原子層物質であり、グラフェンがファンデルワールス力によって 3 次元的に積層した結晶はグラファイトと呼ばれている。これまでグラフェンを実際に作製することは困難とされてきたが、2004 年に Novoselov らがグラファイトからグラフェンを取り出すことに成功した [1] ことをきっかけに実験・理論の両面から研究が盛んに行なわれている。グラフェン中の電子はフェルミエネルギー近傍では質量のない粒子（ディラック粒子）として振る舞うことが知られている。そのため、グラフェンは通常の金属や半導体とは異なる新奇電子物性を生み出す物質であり、基礎科学的に重要な位置を占めている。

また、トポロジカル絶縁体と呼ばれる新しい物質は、物質内部はバンド構造にギャップを持った通常の絶縁体であるが、2 次元ではその端、3 次元ではその表面に金属的な伝導状態が出現する物質の総称である。トポロジカル絶縁体の歴史は整数量子ホール効果の発見にまでさかのぼる。整数量子ホール効果は、低温・強磁場中の 2 次元電子系においてホール伝導度が  $\sigma_{xy} = \nu e^2/h$  に量子化される現象である [2-5]。ここで  $\nu$  は整数、 $e$  は素電荷であり、 $h$  はプランク定数である。1982 年、Thouless, Kohmoto, Nightingale, Nijss (TKNN) はこの整数量子ホール効果がトポロジーの考え方に結び付けられることを示した [6, 7]。その後この理論によって半金属や超伝導体をも議論することが可能になってい

る。トポロジカル絶縁体であるか通常の絶縁体であるかはチャーン数と呼ばれるトポロジカル不変量で区別される。すなわち、通常の絶縁体ではチャーン数がゼロであるが、トポロジカル絶縁体ではチャーン数がゼロでない整数となる。さらに対称性の議論によってトポロジカル絶縁体の分類も行なわれている [8,9]。これらのトポロジカル不変量や対称性による分類の研究によってトポロジカル絶縁体の候補物質の理論的予想もなされている。CdTe/HgTe/CdTe 量子井戸構造 [10] などは実験的にも確認されており、次章で紹介するシリセン等の 2 次元単原子層物質もトポロジカル絶縁体の有力な候補物質として挙げられている。トポロジカル絶縁体の端や表面に出現する伝導状態は上向きスピンと下向きスピンの互いに反対方向に流れるヘリカルエッジ状態となっている。トポロジカル絶縁体はこのヘリカルエッジ状態により非トポロジカル物質では出現しない新奇な現象の発見などの可能性を秘めているだけでなく、省エネルギーなデバイスの素材としても期待されており、基礎科学的にも応用科学的にも理論と実験の両面で大きな注目を集めている。

## 1.2 本研究の目的

2005 年に C. L. Kane と E. J. Mele は「スピン軌道相互作用の大きいグラフェン」を仮定することにより 2 次元トポロジカル絶縁体を理論的に予言した [13,14]。この模型は Kane-Mele 模型と呼ばれ、最も有名な 2 次元トポロジカル絶縁体の模型として知られている。炭素同様 IV 族に属するケイ素が蜂の巣格子状に整列したシリセンなどはまさに「スピン軌道相互作用が大きいグラフェン」にあたるものである。そのため Kane-Mele 模型はシリセンなどの 2 次元単原子層トポロジカル絶縁体を記述する模型として考えることもでき、盛んに研究がなされている。

本研究の目的は、Kane-Mele 模型によって与えられる系がジグザグ端を有するジグザグ型リボンの場合とアームチェア端を有するアームチェア型リボンの場合の両方について、大規模数値シミュレーションを用いて電気伝導特性に対する不純物散乱の効果を理論的に明らかにすることである。先に述べたように、トポロジカル絶縁体の特徴は系の端においてヘリカルエッジ状態が出現することである。したがって端の形状が系の性質に影響をもたらすことが期待できる。実際の物質には必ず存在する不純物による影響について調べることは、トポロジカル絶縁体の物性の理解という基礎物理学的意義を有するに加えて、対象物質の「新デバイスへの可能性探索」という応用科学的観点からも意味を持つ。

まず、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を考察する。ヘリカルエッジ状態が存在する端にそのような不純物がある場合、および系全体に分布している場合を考察する。次に、スピン反転を引き起こす磁性不純物の効果を調べる。この場合については、数値シミュレーションだけでなく、有効モデルを用いた解析的な手法による解析も行ない、両者を比較・検討する。なお、異符号のバレーチャーン数を有する 2 種類の

自明な絶縁体を接合した系では接合部にギャップレスな伝導状態が出現することが知られており、これを用いることにより電気伝導のコントロールが可能になると期待されている [15]。このような系に対しても、同様な考察を行なう。

### 1.3 本論文の構成

本論文は全7章で構成されている。第2章で2次元蜂の巢格子トポロジカル物質であるシリセンなどの性質と、その有効模型である Kane-Mele 模型について紹介する。第3章では Kane-Mele 模型からなるリボンの電子状態について述べ、第4章で再帰グリーン関数を用いたコンダクタンスの計算手法について説明する。本研究で得られた結果について第5章では通常の不純物が存在する場合について、第6章では磁性不純物が存在する場合について考察する。第7章で本研究のまとめを行なう。



## 第 2 章

# 2次元蜂の巣格子トポロジカル絶縁体

本章では、研究で対象とする物質である2次元蜂の巣格子トポロジカル絶縁体について述べる。2.1節でチャーン数を定義する。2.2節で2次元蜂の巣格子トポロジカル物質であるシリセン・ゲルマネン・スタネンについて紹介し、2.3節でそれらの有効模型であるKane-Mele 模型について述べる。

### 2.1 チャーン数

2次元のバンド絶縁体状態ではバンドの固有関数  $|\psi_n(\mathbf{k})\rangle$  に対してゲージポテンシャル

$$\mathbf{a}_{nj}(\mathbf{k}) = i\langle\psi_n(\mathbf{k})|\frac{\partial}{\partial k_j}|\psi_n(\mathbf{k})\rangle \quad (2.1)$$

が運動量空間で定義でき、これは Berry 接続と呼ばれている。ここで  $n$  はバンドインデックス、 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  は波数を表し、 $j = x, y$  である。次に Berry 接続から Berry 曲率  $F_n(\mathbf{k})$  と呼ばれる運動量空間中の磁場を定義する。

$$F_n(\mathbf{k}) = \frac{\partial}{\partial k_x} a_{ny}(\mathbf{k}) - \frac{\partial}{\partial k_y} a_{nx}(\mathbf{k}) \quad (2.2)$$

チャーン数  $C_n$  は第一ブリルアンゾーンでの Berry 曲率の積分として定義できる。

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int d^2\mathbf{k} F_n(\mathbf{k}) \quad (2.3)$$

チャーン数は整数値をとることが知られている。系のチャーン数  $C$  は

$$C = \sum_{n:\text{occupied}} C_n \quad (2.4)$$

によって定義される。ここで  $n$  についての和は電子によって占有されたバンドについて行なう。先に述べたように、通常の絶縁体ではチャーン数がゼロとなり、トポロジカル絶縁体ではチャーン数がゼロでない整数の値をとる。

## 2.2 シリセン・ゲルマネン・スタネン

グラフェンと同じ IV 族元素に属するケイ素原子、ゲルマニウム原子が2次元蜂の巣格子状に整列した物質が1994年、武田・白石らによって理論的に予想された [11]。これらは  $sp^2$  混成軌道により平坦な構造を示すグラフェンとは異なる構造をとり、図 2.1 に示す蜂の巣格子構造において黒丸の A 副格子と白丸の B 副格子が異なる平面上に整列する (バククルした) 構造となる。このとき、ケイ素やゲルマニウムは  $sp^2$  混成軌道と  $sp^3$  混

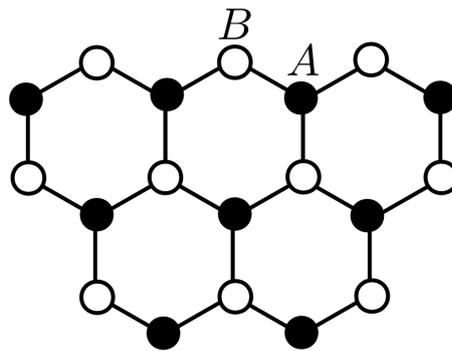


図 2.1: A 副格子 (黒丸) と B 副格子 (白丸) からなる蜂の巣格子構造。

成軌道が交じり合った軌道となっている。これらの2次元ケイ素・ゲルマニウム物質はそれぞれシリセン、ゲルマネンと名付けられている。また、スズ原子が2次元蜂の巣格子状に整列した物質の存在が予想され、スタネンと名付けられている [12]。これらの2次元蜂の巣格子単原子層物質の第1ブリルアンゾーンを図 2.2 に示す。蜂の巣格子構造を反映して、第1ブリルアンゾーンも正六角形をとる。六角形の中心は  $\Gamma$  点、各辺の中点は M 点、頂点は K 点および  $K'$  点と呼ばれる。

グラフェンはブリルアンゾーン内の K 点、 $K'$  点でギャップレスな線形分散を示すことにより、低エネルギーで質量のないディラックフェルミオンを与える。図 2.3(a) にグラフェンの K 点での線形分散を示す。また、グラフェンと同様に、シリセン、ゲルマネン、スタネンにおいても K 点、 $K'$  点でほぼ線形な分散関係が現れる。しかしながら、シリセン、ゲルマネン、スタネンでは、それぞれ図 2.3(b), (c), (d) の挿入図の赤線で示された K 点近傍での分散関係から明らかなように、小さなバンドギャップが現れている。なお、黒線はスピン軌道相互作用を無視した場合の結果である。したがって、これらの物質ではグラフェンでは無視できたスピン軌道相互作用の存在によりバンドギャップが出現し

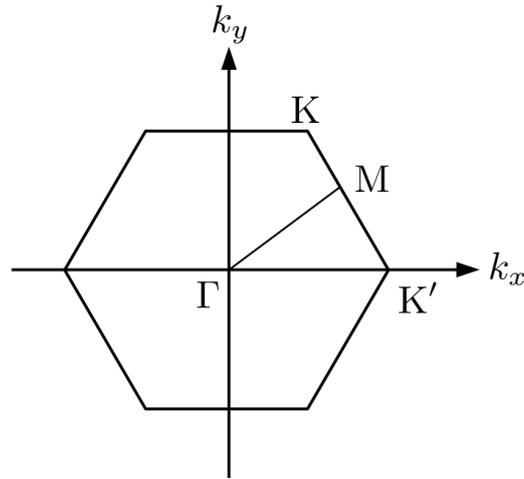


図 2.2: 2次元蜂の巣格子単原子層物質の第1ブリルアンゾーン。六角形の中心は  $\Gamma$  点、各辺の中点は  $M$  点、頂点は  $K$  点、 $K'$  点と呼ばれる。

ていることがわかる。スピン軌道相互作用が非常に小さいことに起因してグラフェンではギャップの制御は困難であったが、シリセン、ゲルマネン、スタネンでは有意な大きさのスピン軌道相互作用の存在によりギャップの制御が可能となる。エネルギーギャップの大きさについては表 2.1 に記す。これを利用したトポロジカル・デバイスの出現が期待されている。

これらの2次元蜂の巣格子トポロジカル物質は自然界に存在しておらず、またグラフェンのようにスコッチテープ法で作製することもできてはいない。現在、次のような方法での作製が行なわれている(図 2.4) [17]。シリセンの最初の実験は  $\text{Ag}(111)$  上での堆積法によるものである [18]。多層シリセンの基板としても銀が使用されてきており [19]、他の金属(イリジウムや金)の(111)表面上における単層シリセンの作製も報告されている [20, 21]。層の剥離が容易なケイ酸塩鉱物上の銀基板で作製する試みも行なわれている。他にもシリコン基板から運ばれたケイ素原子が  $\text{ZrB}_2$  の上に拡散したものとしてシリセンが作成されている [22]。金属基板上のシリセンが金属性を示すのとは対照的に、 $\text{ZrB}_2$  基板上のシリセンはバンド構造にギャップが存在する。 $\text{MoS}_2$  化合物上にシリセンを成長させる実験も行なわれており [23]、さらに最近ではグラファイト上でのシリセンの作製も試みられている [24]。これらの成果は、扱いやすいフレークやナノシート状のシリセンを作製できる可能性を大きく秘めている。また基板からの原子が薄い金属膜(ガドリニウム、ストロンチウム、ユーロピウム)を媒介することによって Zintl シリサイド構造( $\text{GdSi}_2$ ,  $\text{SrSi}_2$ ,  $\text{EuSi}_2$ )を形成する方法も行なわれている [25]。ここでシリセンは構成要素として組み込まれている。

銀基板上での方法はケイ素以外の IV 族元素からなる同様の物質の合成にも影響を与え

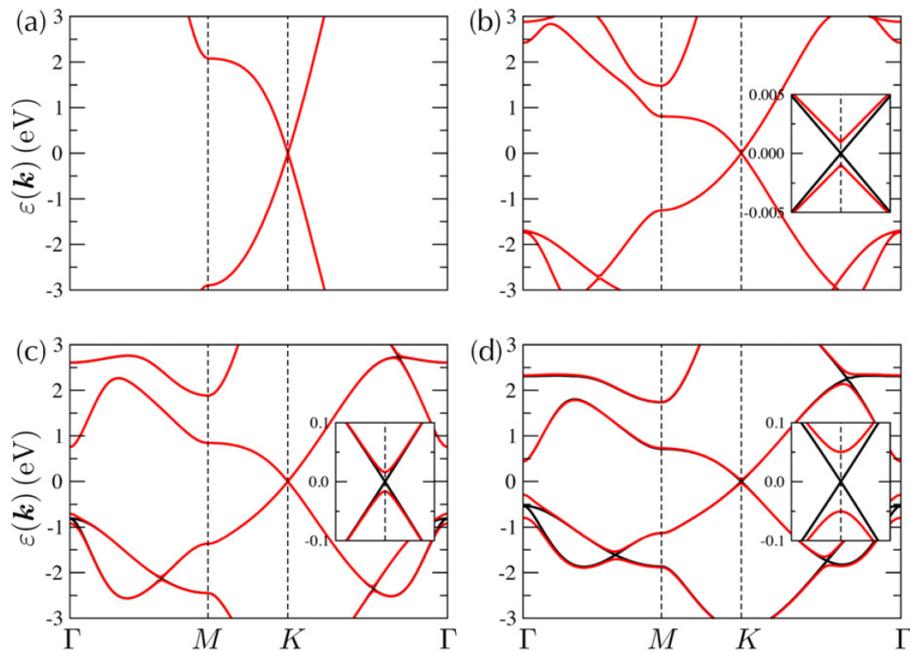


図 2.3: (a) グラフェン、(b) シリセン、(c) ゲルマネン、(d) スタネンのバンド図（赤線） [16]。黒線はスピン軌道相互作用がない場合を表し、K 点近傍を拡大した図を挿入図で表す。

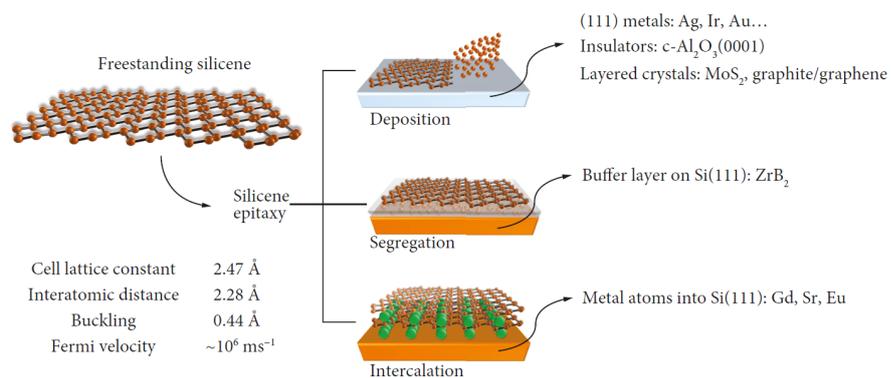


図 2.4: シリセンの作製方法の模式図。シリセンは基板への堆積法 (Deposition)、バッファ層を介した拡散法 (Segregation)、シリコン内部の金属原子のインターカレーション (Intercalation) によって合成されている。堆積法は (111) 表面上、絶縁体上、層状結晶上での成長に分けられる [17]。

た。ゲルマネンは（これまでのところ、アルミニウム、銅、金、プラチナ、アンチモネンといった）金属 (111) 表面上での成長が確認されている [26–30]。また非金属基板（MoS<sub>2</sub> と六方晶窒化アルミニウム）での成長も確認されている [31, 32]。エピタキシャル成長によるスタネンの作製は、Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 上 [33]、InSb(111) 上 [34]、Ag(111) 表面の 2 番目の層として [35] 行なわれている。

現在では金属基板上でのシリセン、ゲルマネン、スタネンの作製が主流であるが、理論研究においてはフリースタンディングなシリセン、ゲルマネン、スタネンの輸送特性に関する研究 [36, 37] が行なわれている。ここではこれら新物質の有効模型として Kane-Mele 模型が利用されている。次節ではこの Kane-Mele 模型について紹介する。

## 2.3 Kane-Mele 模型

Kane-Mele 模型とは、蜂の巣格子内に非一様な磁束を貫くことによって量子ホール状態が実現できる模型（Haldane 模型）[38] を 2 つ用意し、その磁束の向きを互いに反対方向にした模型である。そのような磁束を実現することはできないが、その役割はスピン軌道相互作用によって担われる。Kane-Mele 模型のハミルトニアンは以下のように与えられる。

$$\mathcal{H}_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + it_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \nu_{i,j} c_i^\dagger s_z c_j + i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger (\mathbf{s} \times \hat{d}_{i,j})_z c_j - M \sum_i \mu_i c_i^\dagger c_i \quad (2.5)$$

ここで  $c_i^\dagger = (c_{i\uparrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger)$ 、( $c_{i\uparrow}^\dagger$  および  $c_{i\downarrow}^\dagger$  はそれぞれ  $i$  サイトにおける上向きスピンおよび下向きスピンの生成演算子) であり、 $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$  はパウリ行列である。第 1 項は最近接格子間のホッピング、第 2 項は内在性スピン軌道相互作用、第 3 項は最近接格子 Rashba 型スピン軌道相互作用、第 4 項は電場による交替ポテンシャルの項である。 $\langle i, j \rangle$  は最近接格子の対を表し、 $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  は次近接格子の対を表す。 $\nu_{i,j}$  は次近接ホッピングの方向に依存した符号であり、六角形の格子内で次近接ホッピングが時計回りならば  $\nu_{i,j} = -1$ 、反時計回りならば  $\nu_{i,j} = +1$  と定義する。また、A 副格子では  $\mu_i = +1$ 、B 副格子では  $\mu_i = -1$  とする。 $\hat{d}_{i,j}$  は  $i$  サイトから  $j$  サイトへの電荷移動の方向に沿った単位ベクトルである。なお最近接格子 Rashba 型スピン軌道相互作用は外部電場によって導入される項であり、電場がないとき  $\lambda_R = 0$  となる。トポロジカル絶縁体から自明な絶縁体への相転移が起きるときであっても  $10 \mu\text{eV}$  のオーダーとなり、実質的には無視することができる。そのため、本研究では  $\lambda_R = 0$  とする。第一原理計算を用いた計算により、グラフェン、シリセン、ゲルマネン、スタネンにおけるパラメータの値が求められており、表 2.1 のようになる [16, 39]。 $\lambda_R = 0$  としたとき、式 (2.5) のハミルトニアンを模式的に表したものが図 2.5 であり、以下にこの場合の Kane-Mele 模型の性質を紹介する。

	$t$ (eV)	$v_F$ ( $10^5$ m/s)	$a$ (Å)	$t_2$ (meV)	$l$ (Å)	$\theta$ (deg)	$E_g$ (meV)
グラフェン	2.8	9.8	2.46	$10^{-3}$	0	90	0.0(0.0)
シリセン	1.6	5.5	3.86	0.75	0.45	101.7	1.9(1.5)
ゲルマネン	1.3	4.6	4.02	8.3	0.69	106.5	33(24)
スタネン	1.3	4.9	4.70	19	0.85	107.1	101(73)

表 2.1: 第一原理計算によって得られたグラフェン、シリセン、ゲルマネン、スタネンのパラメータ [16,39]。ここで  $v_F$  はフェルミ速度、 $l$  はバックリングの高さ、 $\theta$  は面に垂直な軸と A 副格子と B 副格子をつなぐボンドとのなす角、 $E_g$  はエネルギーギャップである。なお、 $E_g$  の値において、括弧なしの数値はハイブリッド HSE06 で得られた値、括弧内は GGA で得られた値である。

式 (2.5) のハミルトニアンを波数表示すると以下ようになる。

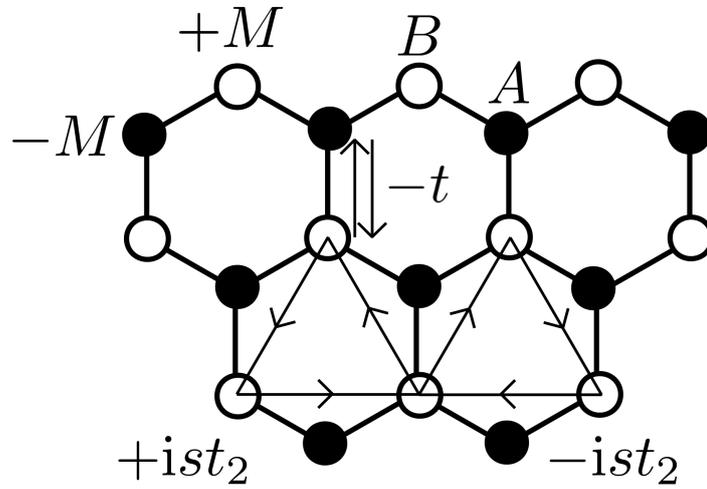


図 2.5: 2次元蜂の巣格子と  $\lambda_R = 0$  の場合の Kane-Mele 模型のパラメータ。黒丸は A 副格子、白丸は B 副格子を表し、最近接格子間の電荷移動は  $-t$ 、内因性スピン軌道相互作用の係数は電子の運動方向が反時計回りの場合は  $+ist_2$ 、時計回りの場合は  $-ist_2$  である。A サイト、B サイトのオンサイトエネルギーはそれぞれ  $-M$ 、 $+M$  である。

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{q},s} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{q},s}^{A\dagger} & c_{\mathbf{q},s}^{B\dagger} \end{pmatrix} \hat{H}(\mathbf{q}) \begin{pmatrix} c_{\mathbf{q},s}^A \\ c_{\mathbf{q},s}^B \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

ここで  $c_{\mathbf{q},s}^A$  および  $c_{\mathbf{q},s}^B$  はそれぞれ A サイト、B サイト上の波数  $\mathbf{q}$ , スピン  $s$  のフェルミオンの消滅演算子である。2行2列の行列  $\hat{H}(\mathbf{q})$  は以下のように与えられる。

$$\hat{H}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} X_s(\mathbf{q}) & f(\mathbf{q}) \\ f^*(\mathbf{q}) & -X_s(\mathbf{q}) \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

$$f(\mathbf{q}) = -t (e^{-i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\delta}_3}) \quad (2.8)$$

$$X_s(\mathbf{q}) = 2st_2 \{ \sin \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_+ - \sin \mathbf{q} \cdot (\mathbf{a}_+ - \mathbf{a}_-) - \sin \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_- \} - M \quad (2.9)$$

である。ただし  $a$  を格子間隔として、

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \left( 0, \frac{a}{\sqrt{3}} \right) \quad (2.10)$$

$$\boldsymbol{\delta}_2 = \left( -\frac{a}{2}, -\frac{a}{2\sqrt{3}} \right) \quad (2.11)$$

$$\boldsymbol{\delta}_3 = \left( \frac{a}{2}, -\frac{a}{2\sqrt{3}} \right) \quad (2.12)$$

$$\mathbf{a}_+ = \left( \frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2} \right) = \boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_2 \quad (2.13)$$

$$\mathbf{a}_- = \left( -\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2} \right) = \boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_3 \quad (2.14)$$

とする。したがってエネルギースペクトル  $E$  は

$$E = \pm \sqrt{|f(\mathbf{q})|^2 + |X_s(\mathbf{q})|^2} \equiv \pm E_s(\mathbf{q}) \quad (2.15)$$

で与えられる。 $E_s(\mathbf{q})$  は K 点 ( $\eta = -1$ ), K' 点 ( $\eta = +1$ ) において最小値  $|3\sqrt{3}s\eta t_2 - M|$  をとり、 $M = 3\sqrt{3}s\eta t_2$  の場合にギャップの消失が起こる。次に K 点、K' 点近傍における有効ハミルトニアンを求める。 $\mathbf{q} = \eta\mathbf{K}_0 + \mathbf{k}$  とし、 $\hat{H}(\mathbf{q})$  の行列要素を  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  の一次まで求めると以下のようなディラック型のハミルトニアンが得られる。

$$\hat{H}_s^\eta = \begin{pmatrix} \Delta_s^\eta & \hbar v_F(\eta k_x - i k_y) \\ \hbar v_F(\eta k_x + i k_y) & -\Delta_s^\eta \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

ここで  $v_F$  はフェルミ速度であり、

$$\Delta_s^\eta = 3\sqrt{3}s\eta t_2 - M \quad (2.17)$$

である。 $\Delta_s^\eta$  はディラック質量として振る舞い、エネルギー分散は

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{(\hbar v_F)^2(k_x^2 + k_y^2) + (\Delta_s^\eta)^2} \quad (2.18)$$

である。 $\Delta_s^\eta = 0$  のときギャップが閉じる。

ハミルトニアンが式 (2.16) で与えられているとき、Berry 曲率  $F_s^\eta(\mathbf{k})$  およびチャーン数  $C_s^\eta$  は以下のように与えられる (付録 A 参照)。

$$F_s^\eta(\mathbf{k}) = -\eta(\hbar v_F)^2 \frac{\Delta_s^\eta}{2 \{(\hbar v_F)^2 |\mathbf{k}|^2 + (\Delta_s^\eta)^2\}^{3/2}} \quad (2.19)$$

$$C_s^\eta = -\frac{\eta}{2} \text{sgn}(\Delta_s^\eta) \quad (2.20)$$

すなわち、ディラックハミルトニアンはチャーン数  $\pm 1/2$  をとる。いま K 点、K' 点近傍について独立に計算したため半整数をとっているが、六角形の格子に対してはそれらの和として定義されるためチャーン数は整数をとる。スピンチャーン数  $C_s$ 、バレーチャーン数は  $C_v$  は次のように定義される。

$$C_s = \sum_{s,\eta} s C_s^\eta \quad (2.21)$$

$$C_v = \sum_{s,\eta} \eta C_s^\eta \quad (2.22)$$

これらを用いて得た相図を図 2.6 に示す。 $t_2/t$  が有限のとき、 $M/t = 0$  では  $C_s$  が有限なトポロジカル絶縁体であるが、交替ポテンシャルを強めていくに従って自明な絶縁体への量子相転移を起こし、 $C_v$  が有限な自明な絶縁体となる。なお、相境界においてバルクのエネルギーギャップが閉じる。

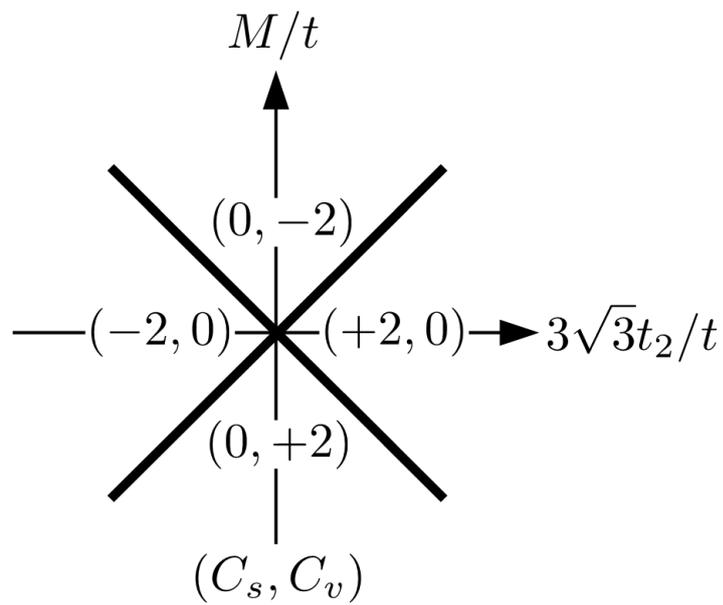


図 2.6: スピンチャーン数  $C_s$ , バレーチャーン数  $C_v$  から決定された  $3\sqrt{3}t_2 - M$  平面での Kane-Mele 模型の相図。



## 第 3 章

# Kane-Mele 模型からなるリボンの電子状態

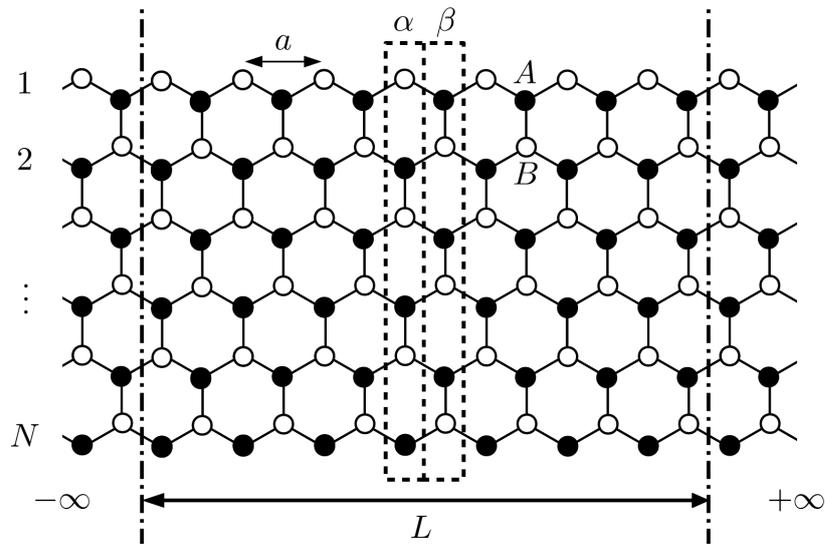
本章では本研究で対象とするジグザグ型リボンおよびアームチェア型リボンのバンド構造やそれに対応する波動関数について紹介する。3.1 節では本研究で用いる模型について述べ、3.2 節で 1 種類のトポロジカル相からなる系のバンド構造や端に出現する伝導状態の波動関数を紹介する。3.3 節では、異符号のバレーチャーン数で特徴付けられる 2 つの自明な絶縁体相を接合した系のバンド構造や境界に出現する伝導状態の波動関数について述べる。

### 3.1 本研究で用いる模型

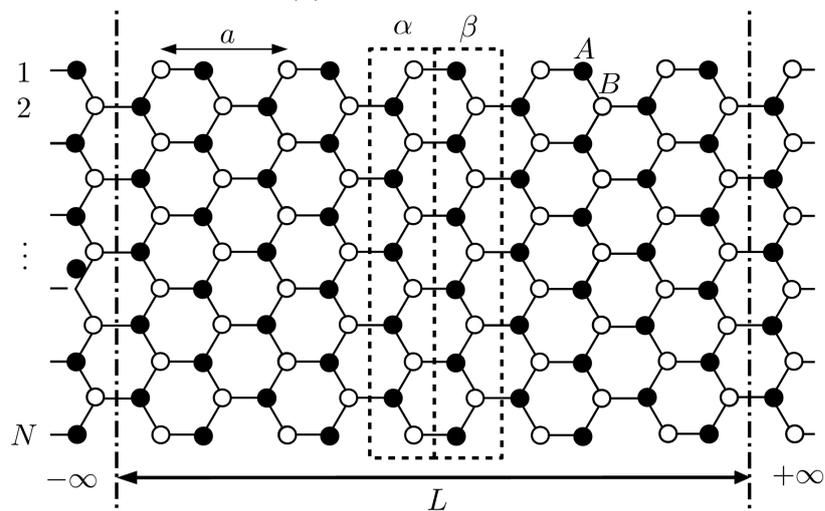
本研究で用いる模型を図 3.1 に示す。ジグザグ端を有する (a) ジグザグ型リボン、肘掛け椅子状の端を有する (b) アームチェア型リボンのそれぞれにおいてチャンネル幅が  $N$  で点線で示した単位セル  $L$  個からなる試料に理想的なリード線が取り付けられており、リード線も Kane-Mele 模型でできているものとする。1 つの単位セルは 2 つのスライスに分けることができ、それぞれを  $\alpha$  セル,  $\beta$  セルとする。  $a$  は単位セルの間隔である。黒丸、白丸はそれぞれ A 副格子、B 副格子を表している。

### 3.2 バンド構造と波動関数

図 3.2 に (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのバンド構造を示す。いずれも  $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  としている。ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれも価電子帯と伝導帯をつなぐような伝導状態が出現しており、これらは上向きスピンと下向きスピンの縮退した状態になっている。図 3.2 におけるこれらの伝導



(a) ジグザグ型リボン



(b) アームチェア型リボン

図 3.1: 本研究で用いた (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボン。試料は  $N$  本の鎖、破線で示した単位セル  $L$  個からなる。1つの単位セルを  $\alpha$  列と  $\beta$  列の2つのスライスに分ける。リード線も Kane-Mele 模型で記述されるものとする。黒丸、白丸はそれぞれ A 副格子、B 副格子を表し、単位セルの間隔を  $a$  とする。

状態についてさらに詳細に調べる。図 3.3, 図 3.4 に図 3.2 において (a) ジグザグ型リボンの  $ka = 12501\pi/25000$ , (b) アームチェア型リボンの  $ka = \pi/12500$  での下から  $N$  番目、 $N+1$  番目のバンドの波動関数の絶対値の二乗のサイト依存性を示す。 $i_N$  はスピン  $s$  を持つ  $\alpha$  セル、 $\beta$  セルのそれぞれにおけるサイトを表している。ジグザグ型リボンでは、伝導状態は  $\alpha$  セルの端のサイト、すなわちジグザグ端に局在していることがわかる。また、アームチェア型の伝導状態も端近傍に局在しているが、 $\alpha$  セルと  $\beta$  セルの存在確率

は等しい。ジグザグ型リボンとアームチェア型リボンと比較すると、ジグザグ型リボンのほうが波動関数が端に局在していることがわかる。また、このときスピンの流れを模式的に表すと図 3.5 のようになり、ヘリカルエッジ状態が実現していることが確認できる。

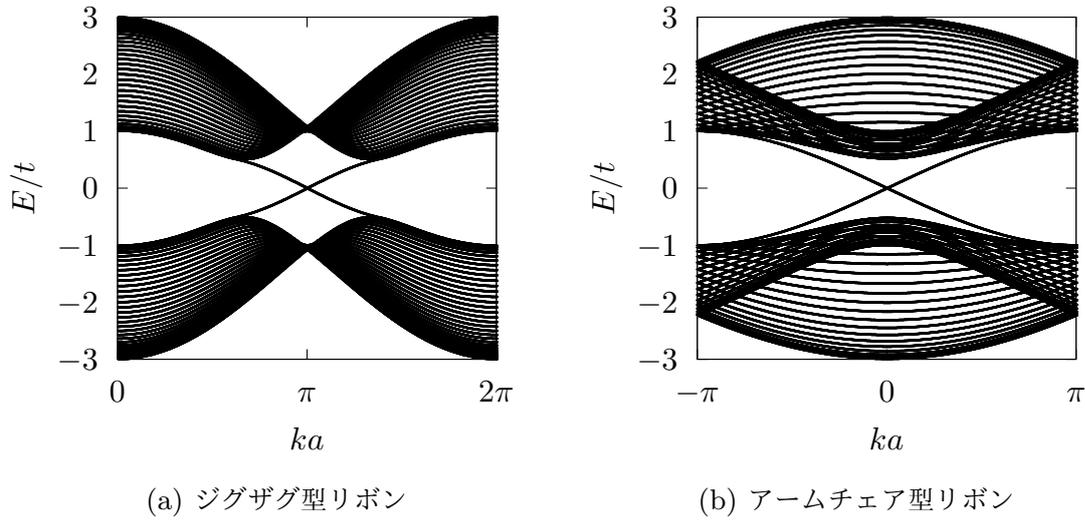


図 3.2: (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのバンド構造。  $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  である。

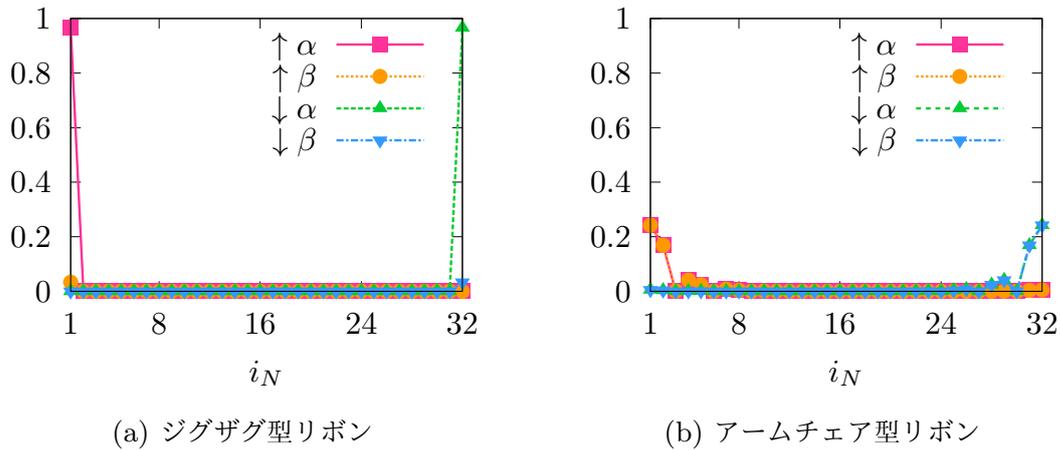


図 3.3: (a) ジグザグ型リボンの  $ka = 12501\pi/25000$  と (b) アームチェア型リボンの  $ka = \pi/12500$  における下から  $N$  番目の波動関数の絶対値の二乗の位置依存性。  $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  とした。  $i_N$  はスピン  $s$  を持つ  $\alpha$  セル,  $\beta$  セルのそれぞれにおけるサイトを表す。

つぎにヘリカルエッジ状態の分散関係に着目する。バンド構造のスピン軌道相互作用の大きさ  $t_2$  依存性を図 3.6 に示す。(a) ジグザグ型リボンでは  $t_2/t = 0.06$  の場合

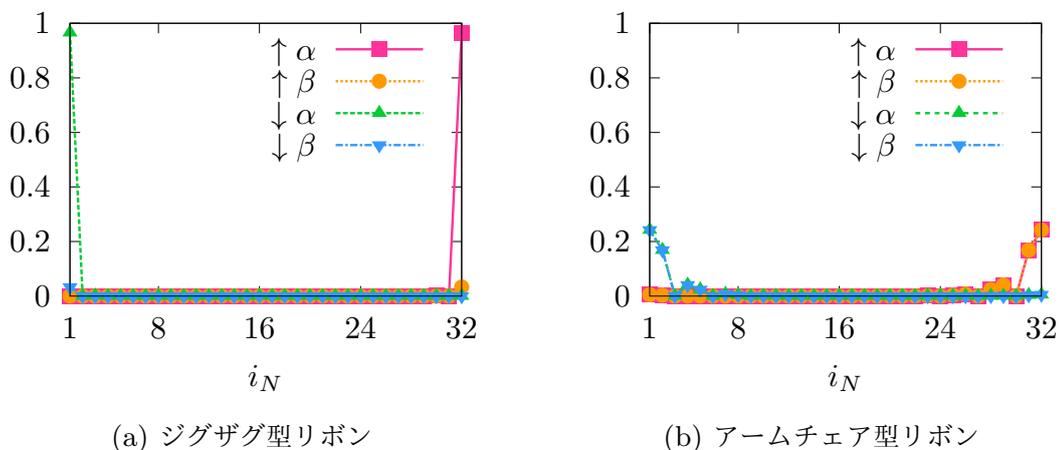


図 3.4: (a) ジグザグ型リボンの  $ka = 12501\pi/25000$  と (b) アームチェア型リボンの  $ka = \pi/12500$  における下から  $N + 1$  番目の波動関数の絶対値の二乗の位置依存性。  $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  とした。  $i_N$  はスピン  $s$  を持つ  $\alpha$  セル,  $\beta$  セルのそれぞれにおけるサイトを表す。

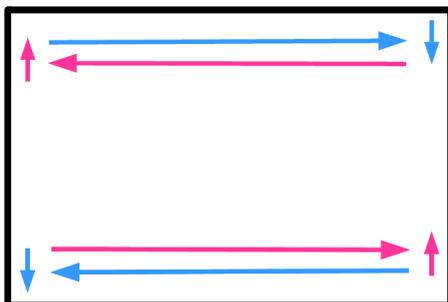


図 3.5: 図 3.3, 図 3.4 から読み取れるヘリカルエッジ状態の模式図。赤矢印は上向きスピン、青矢印は下向きスピンを表す。

と  $t_2/t = 0.12$  の場合を比較し、(b) アームチェア型リボンでは  $t_2/t = 0.25$  の場合と  $t_2/t = 0.30$  の場合を比較した。いま  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  である。ジグザグ型リボンでは  $E/\Delta$ , アームチェア型リボンでは  $E/t$  で整理することにより、 $t_2$  が異なる場合でもヘリカルエッジ状態の分散関係が一致することがわかる。ここで  $\Delta$  はバルクのバンドギャップである。この結果はジグザグ型リボンでは分散関係が  $\Delta$  に比例するが、アームチェア型リボンでは  $\Delta$  に依存せず  $t$  に比例することを意味している。

交替ポテンシャルの大きさ  $M$  を変化させた場合のバンド構造を図 3.7 に示す。(a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンのそれぞれについて  $M/t = 0.0$  (赤),  $M/t = 0.1$  (緑),  $M/t = 0.2$  (青) でのバンド構造を示す。いま  $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$  である。ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合も  $M$  が大きくなるにつ

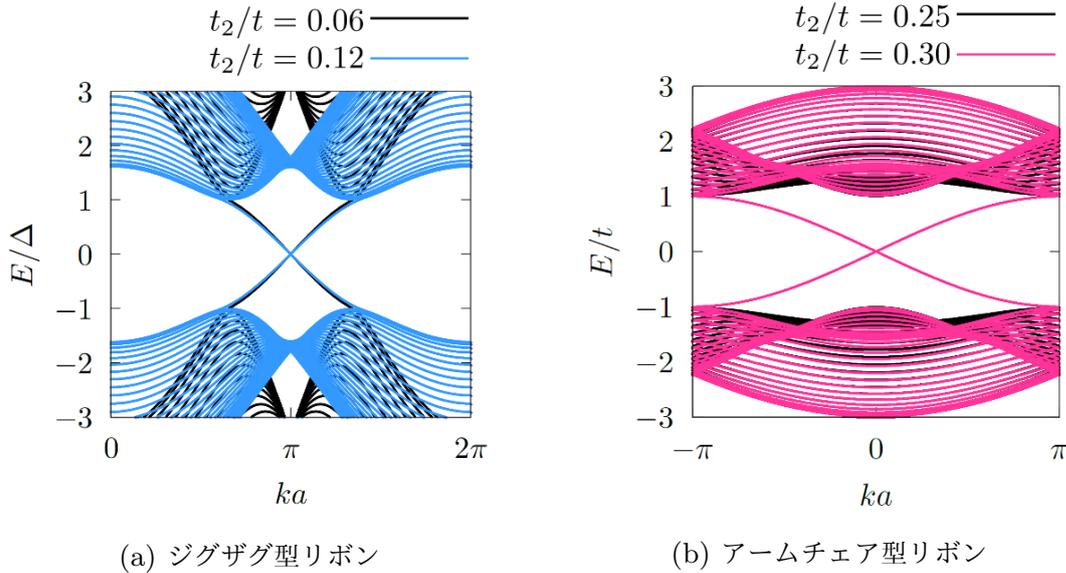


図 3.6: (a)  $t_2/t = 0.06$  (黒) と  $t_2/t = 0.12$  (青) のジグザグ型リボンと (b)  $t_2/t = 0.25$  (黒) と  $t_2/t = 0.30$  (赤) のアームチェア型リボンのバンド構造。  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  であり、 $\Delta$  はバルクのバンドギャップである。

れてバルクのバンドギャップが狭くなっている。このことから交替ポテンシャルが強くなるにつれて、バルクの状態への遷移が容易になると考えられる。

### 3.3 異なるバレーチャーン数を持つ相の接合系

異なるバレーチャーン数を持つ相を接合した系では、その境界にトポロジカルキルビホッフ則を満たすトポロジカル量子数が定義でき、有限の量子数がある場合には境界に伝導状態が出現することが知られている [15]。図 3.8 に本研究で対象とする系の模式図を示す。スピンチャーン数  $C_s$  とバレーチャーン数  $C_v$  が  $(C_s, C_v) = (0, -2)$  の系と  $(C_s, C_v) = (0, +2)$  の系が長さを  $L$  として伝導方向に沿って接合されている。それぞれのチャンネル幅を  $N_1, N_2$  とし、 $N_1 + N_2 = N$  を満たすとする。図 3.9 にジグザグ型リボンにおいて (a) 接合系を形成する相が単独で存在する場合、つまり  $M/t = +0.4$  の系 (緑)、 $M/t = -0.4$  の系 (青) のバンド構造と (b)  $M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を図 3.8 のように接合した系のバンド構造を示す。図 3.10 にはアームチェア型リボンにおいて (a) 接合系を形成する相が単独で存在する場合、つまり  $M/t = +0.4$  の系のバンド構造と (b)  $M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を図 3.8 のように接合した系のバンド構造を示す。アームチェア型リボンではジグザグ型リボンの場合とは異なり、 $M/t = +0.4$  の場合と  $M/t = -0.4$  の場合のバンド構造は一致する。いまジグザグ型リボン、アームチェア

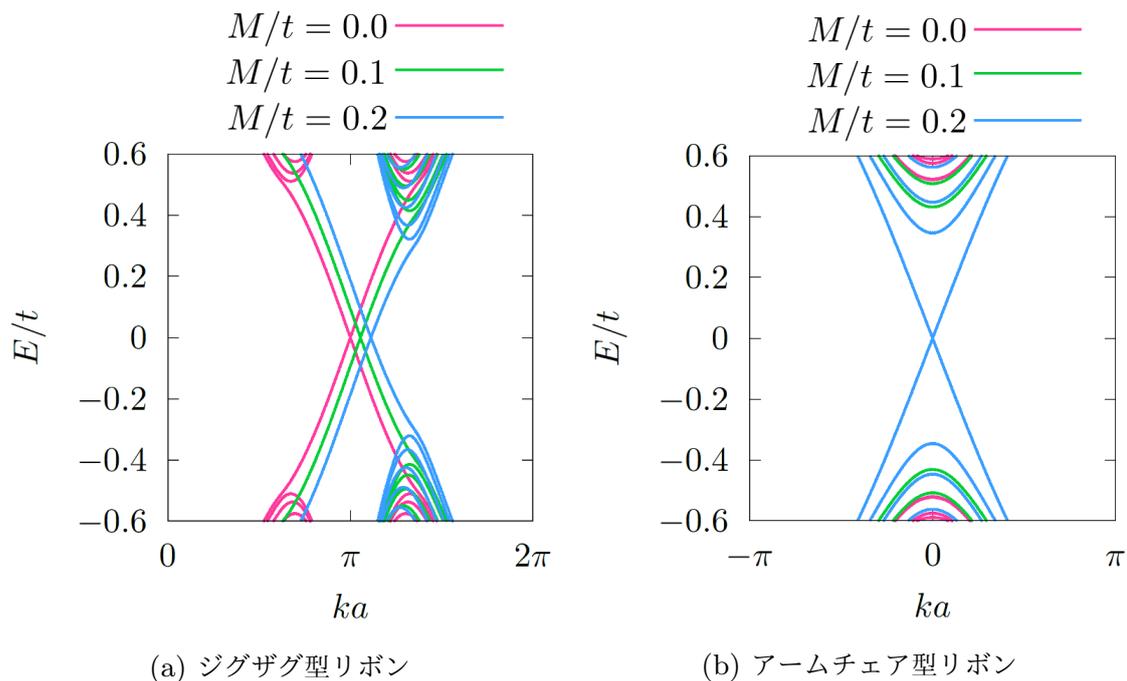


図 3.7: (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのバンド構造の交替ポテンシャル  $M$  依存性。  $M/t = 0.0$  (赤)、  $M/t = 0.1$  (緑)、  $M/t = 0.2$  (青) の場合が示されている。  $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$  とした。

型リボンいずれの場合も  $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$  とし、  $N_1 = N_2 = N/2$  とした。

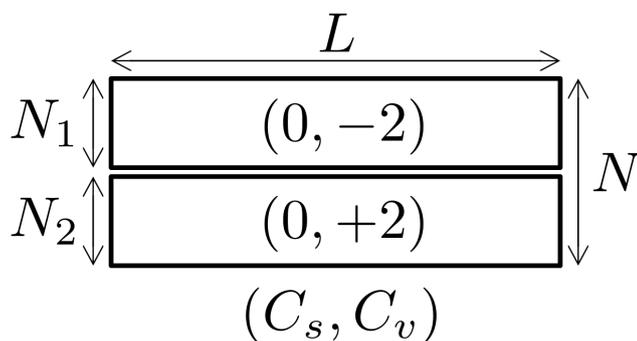
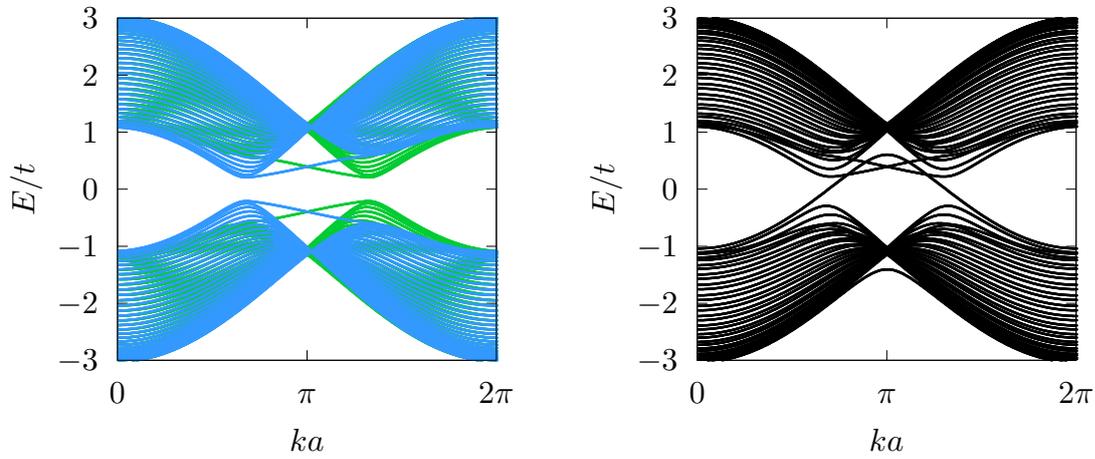


図 3.8: チャンネル幅が  $N_1$  の  $(C_s, C_v) = (0, -2)$  の系とチャンネル幅が  $N_2$  の  $(C_s, C_v) = (0, +2)$  の系を接合した系の模式図。  $N_1 + N_2 = N$  を満たし、長さを  $L$  とする。

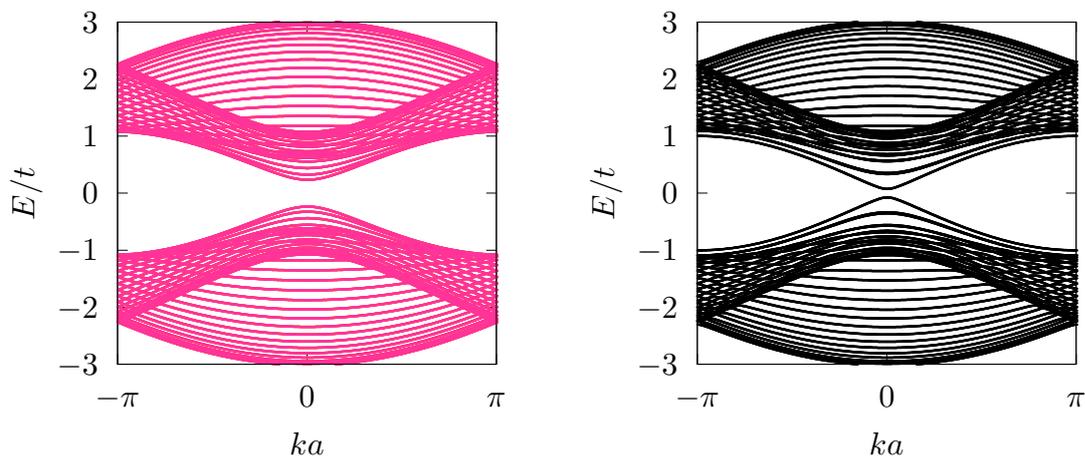
図 3.9(a), 図 3.10(a) からわかるとおり、  $(C_s, C_v) = (0, +2)$  の相と  $(C_s, C_v) = (0, -2)$  の相が単独で存在する場合はいずれの場合も絶縁体である。しかし、図 3.9(b), 図 3.10(b) に示すように、2つの相を接合した系では  $E/t = 0$  近傍に新しい状態が出現していることがわかる。この状態についてさらに調べるため、波動関数の絶対値の二乗の位置依存性を調べる。図 3.11 に (a) ジグザグ型リボンの  $ka = 210\pi/600$ , (b) アームチェア型リボン



(a) 接合系を形成する相が単独で存在

(b) 接合系

図 3.9: ジグザグ型リボンにおいて (a)  $M/t = +0.4$  の系 (緑)、 $M/t = -0.4$  の系 (青) のバンド構造と (b)  $M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を図 3.8 のように接合した系のバンド構造。  $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とした。



(a) 接合系を形成する相が単独で存在

(b) 接合系

図 3.10: アームチェア型リボンにおいて (a)  $M/t = +0.4$  の系のバンド構造と (b)  $M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を図 3.8 のように接合した系のバンド構造。  $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とした。なお、 $M/t = -0.4$  の系のバンド構造は (a) と一致する。

の  $ka = -13\pi/300$  における下から  $N$  番目のバンドの波動関数の絶対値の二乗のサイト依存性を、図 3.12 に (a) ジグザグ型リボンの  $ka = 390\pi/600$ , (b) アームチェア型リボンの  $ka = 13\pi/300$  における下から  $N$  番目のバンドの波動関数の絶対値の二乗のサイト依存性を示す。 $i_N$  はスピン  $s$  を持つ  $\alpha$  セル、 $\beta$  セルのそれぞれにおけるサイトを表している。ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンのいずれの場合も、接合した境界付近に波動関数が局在していることが確認できた。また、ジグザグ型リボンとアームチェア型リボンと比較すると、ジグザグ型リボンのほうが波動関数の局在が強いことがわかる。また、これらからスピンの流れを模式的に表すと図 3.13 のようになり、境界に互いに逆向きのスピンの流れが実現していることが確認できる。

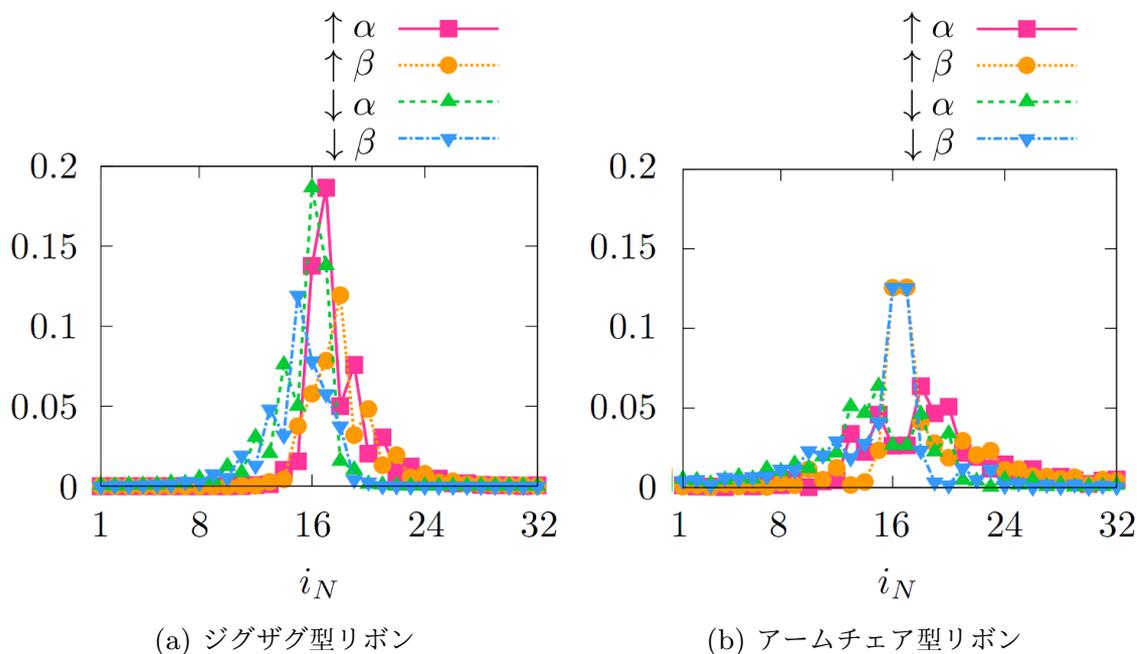


図 3.11:  $M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を図 3.8 のように接合した (a) ジグザグ型リボンの  $ka = 210\pi/600$ , (b) アームチェア型リボンの  $ka = -13\pi/300$  における下から  $N$  番目の波動関数の絶対値の二乗の位置依存性。 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とした。 $i_N$  はスピン  $s$  を持つ  $\alpha$  セル、 $\beta$  セルのそれぞれのセルにおけるサイトを表す。

なお、本研究ではチャンネル方向に  $y$  軸をとり、境界を  $y = 0$  として  $\text{sgn}(y)$  のかたちで交替ポテンシャル  $M$  を導入したが、先行研究 [15] のように  $\tanh(y/a)$  として導入することにより図 3.10(b) で開いていたギャップが閉じる (図 3.14)。

$M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を接合した (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンのバンド構造におけるチャンネル幅  $N$  依存性を図 3.15 に示す。 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$  とし、 $N = 16$  (赤),  $N = 24$  (橙),  $N = 32$  (緑),  $N = 64$  (青) の 4 種類について調

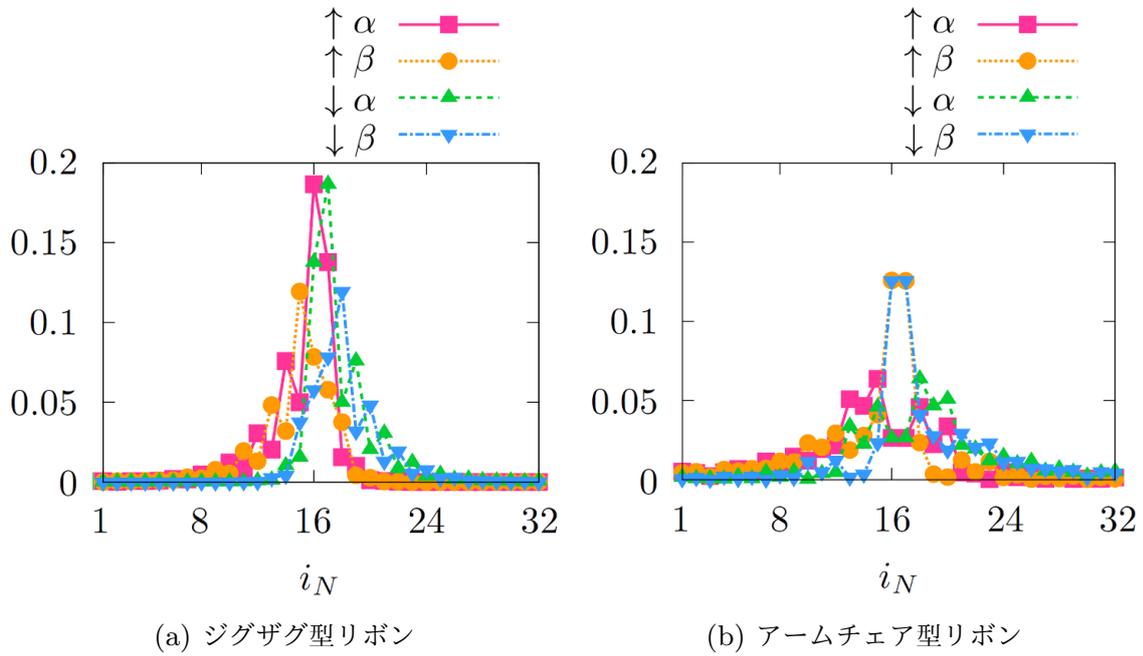


図 3.12:  $M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を図 3.8 のように接合した (a) ジグザグ型リボンの  $ka = 390\pi/600$ , (b) アームチェア型リボンの  $ka = 13\pi/300$  における下から  $N$  番目の波動関数の絶対値の二乗の位置依存性。  $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とした。  $i_N$  はスピン  $s$  を持つ  $\alpha$  セル、  $\beta$  セルのそれぞれのセルにおけるサイトを表す。



図 3.13: 図 3.11, 図 3.12 から読み取れる接合系の境界に出現する互いに逆向きのスピンの反対方向に流れる状態の模式図。赤矢印は上向きスピン、青矢印は下向きスピンを表す。

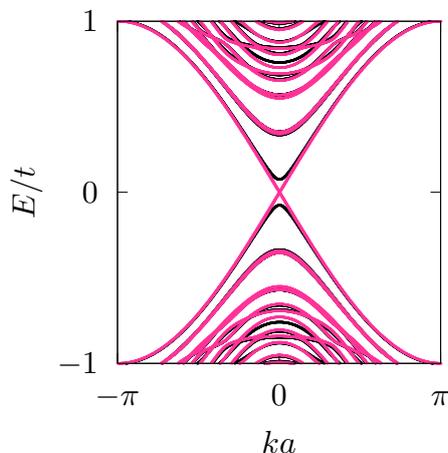


図 3.14: 本研究で用いたアームチェア型リボンの接合系におけるバンド構造 (黒) と先行研究 [15] の方法で交替ポテンシャルを導入したときのバンド構造 (赤)。先行研究ではチャンネル方向に  $y$  軸をとり、境界を  $y = 0$  として  $\tanh(y/a)$  として交替ポテンシャルを導入している。 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.4$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とした。

べた。いま  $N_1 = N_2 = N/2$  とした。ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合も伝導状態の分散関係はチャンネル幅に依存せず、またチャンネル幅が広くなるにつれてバルクのバンドギャップは狭くなることがわかる。

次に接合した (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンのバンド構造の交替ポテンシャルの大きさ  $M$  依存性を図 3.16 に示す。 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とし、 $M/t = \pm 0.30$  (赤),  $M/t = \pm 0.35$  (緑),  $M/t = \pm 0.40$  (青) の 3 種類について調べた。伝導状態の分散関係はジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合も交替ポテンシャルの絶対値にほとんど依存せず、またジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合も交替ポテンシャルの絶対値が小さくなるにつれてバルクのバンドギャップは狭くなることがわかる。

また、図 3.16 のそれぞれについて、接合の境界付近を左方向に流れる上向きスピンの  $\alpha$  セルでの波動関数の絶対値の二乗の交替ポテンシャルの大きさ  $M$  依存性を図 3.17 に示す。 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とし、 $M/t = \pm 0.30$  (赤),  $M/t = \pm 0.35$  (緑),  $M/t = \pm 0.40$  (青) の 3 種類について調べた。なお、ジグザグ型リボンでは  $E/t = 0$  で境界付近に局在している状態が存在しているが、アームチェア型リボンでは  $E/t = 0$  で境界付近に局在している状態は存在しない。境界付近に局在している状態の波動関数について調べるため、ジグザグ型リボンでは  $E/t = 0$ , アームチェア型リボンでは  $E/t = 0.15$  での波動関数を調べることにした。境界付近に局在している状態はジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合も交替ポテンシャルの絶対値

が大きくなるにつれて伝導状態は境界に局在し、1次元性を強めることがわかる。また交替ポテンシャルの絶対値が同じ場合で比較するとアームチェア型リボンに比べ、ジグザグ型リボンのほうが波動関数の広がりが狭く、境界付近に局在している。

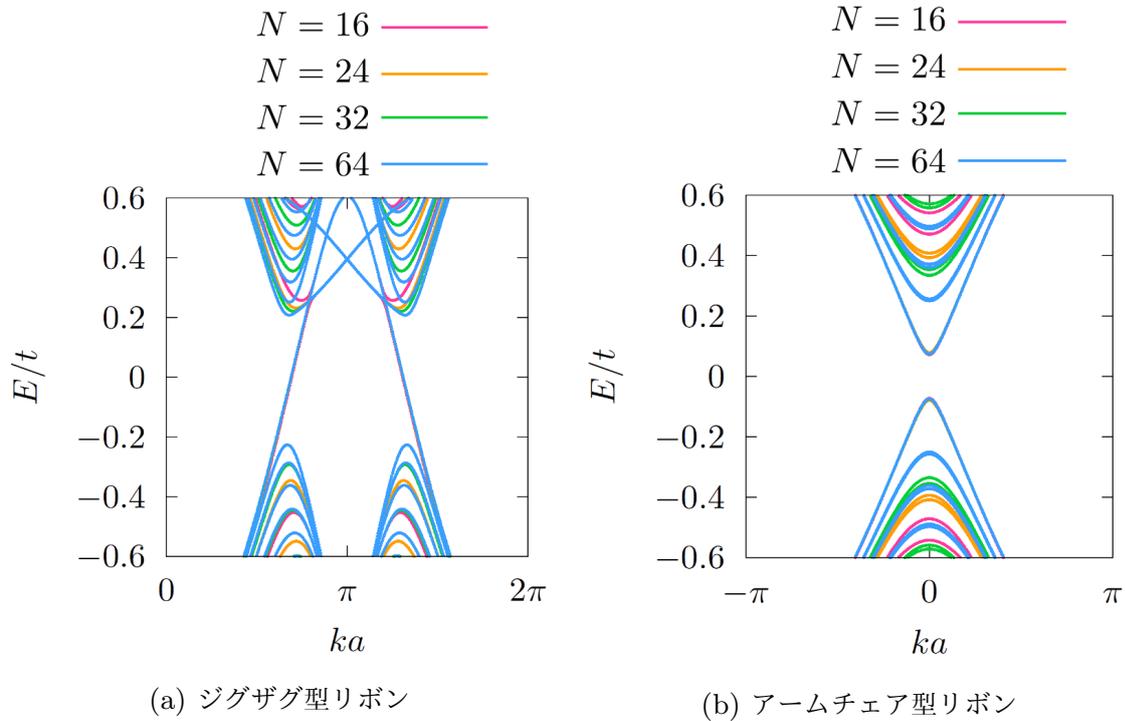


図 3.15:  $M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を接合した (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのバンド構造のチャネル幅  $N$  依存性。  $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$  とし、  $N = 16$  (赤),  $N = 24$  (橙),  $N = 32$  (緑),  $N = 64$  (青) の場合について示している。  $N_1 = N_2 = N/2$  とした。

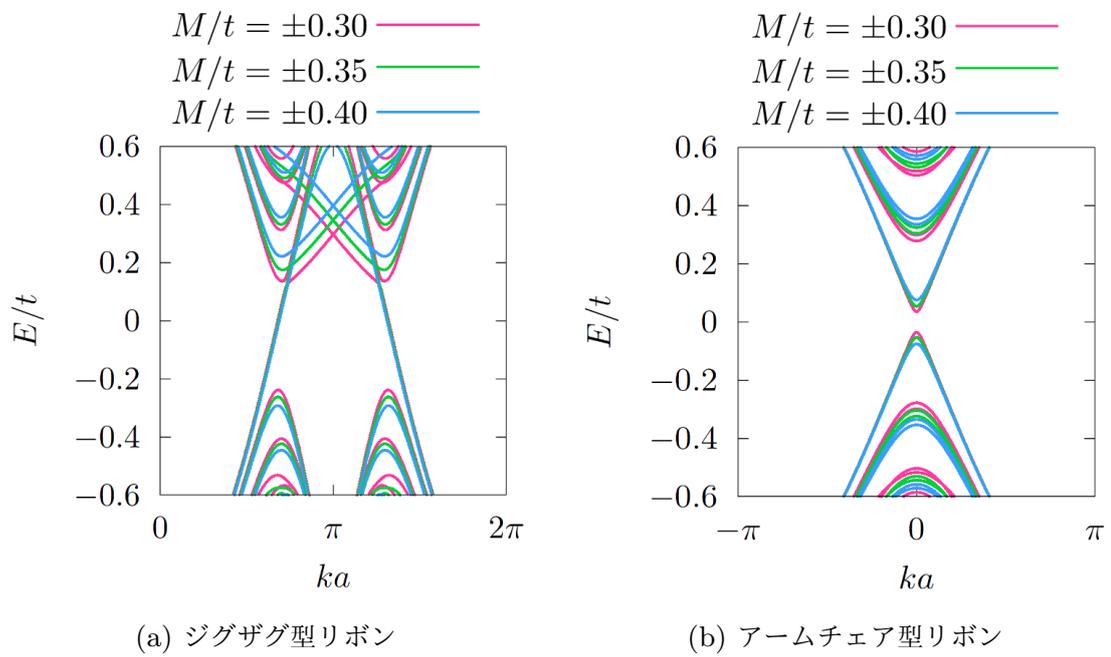


図 3.16: 接合系における (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのバンド構造の交替ポテンシャルの大きさ  $M$  依存性。  $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とし、  $M/t = \pm 0.30$  (赤),  $M/t = \pm 0.35$  (緑),  $M/t = \pm 0.40$  (青) の場合について示している。

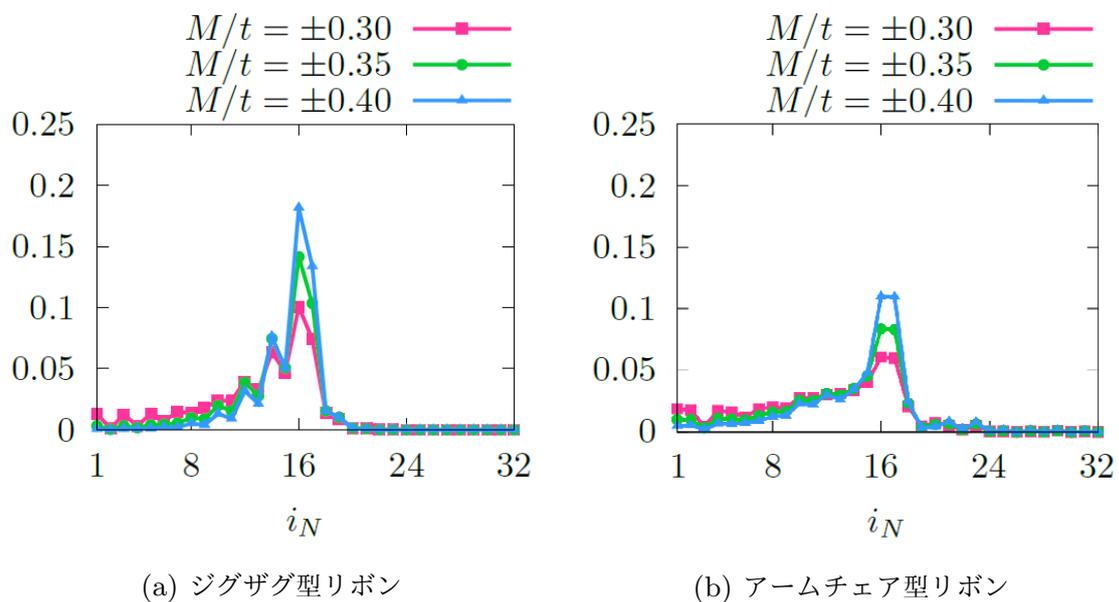


図 3.17: 接合系における (a) ジグザグ型リボンで  $E/t = 0$ , (b) アームチェア型リボンで  $E/t = 0.15$  における接合の境界を左方向に流れる上向きスピンの  $\alpha$  セルでの波動関数の絶対値の二乗の交替ポテンシャル  $M$  依存性。  $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とし、  $M/t = \pm 0.30$  (赤),  $M/t = \pm 0.35$  (緑),  $M/t = \pm 0.40$  (青) の場合について示している。  $i_N$  は上向きスピンを持つ  $\alpha$  セルにおけるサイトを表す。



## 第 4 章

# 数値シミュレーションのための定式化

### 4.1 ランダウアー公式

本研究ではランダウアー公式を用いてコンダクタンスを求める。この公式ではコンダクタンス  $G$  は

$$G = \frac{e^2}{h} g \quad (4.1)$$

$$g = \sum_{\mu\nu} |t_{\mu\nu}|^2 \quad (4.2)$$

と表すことができる。ここで  $t_{\mu\nu}$  は  $\nu$  番目のチャンネルから  $\mu$  番目のチャンネルへの遷移振幅であり、 $e$  は素電荷、 $h$  はプランク定数である。なお、チャンネルは不純物のない理想的なリード線の領域で定義され、スピンの自由度も含む。遷移振幅  $t_{\mu\nu}$  は、以下に示す方法によって計算される。

### 4.2 再帰グリーン関数によるコンダクタンスの定式化

ここでは、図 3.1 で導入した模型における  $\nu$  番目のチャンネルから  $\mu$  番目のチャンネルへの遷移振幅  $t_{\mu\nu}$  を再帰グリーン関数の方法を用いて計算するための定式化を行なう。先行研究では、最近接格子間のホッピングのみを有する正方格子 [41] や蜂の巣格子 [42, 43]、そしてリード線が正方格子で試料が蜂の巣格子の場合 [44–46] が研究されていた。2.3 節で紹介したように、トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体との相転移が起こるという Kane-Mele 模型の特徴は、次近接格子間のホッピングで表されたスピン軌道相互作用に起因する。し

たがって、本研究では次近接格子間のホッピングを取り入れて数値計算を行なうことが本質的である。この効果を取り入れるために、以下に示す手法で定式化を行なう。

#### 4.2.1 運動方程式と理想的なリード線

シュレーディンガー方程式

$$\mathcal{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad (4.3)$$

から  $j$  番目のセルの運動方程式をたてる。固有関数  $|\phi\rangle$  を、

$$|\phi\rangle = \sum_{i',j',\tau'} \sum_{s'} C_{i',j',s'}^{\tau'} |i',j',s',\tau'\rangle \quad (4.4)$$

とする。ここで  $\tau = \alpha, \beta$ ,  $s = \pm$  であり、 $s = +(-)$  は上向きスピン  $\uparrow$  (下向きスピン  $\downarrow$ ) を表す。これを用いるとシュレーディンガー方程式は、

$$\sum_{i',j',\tau'} \sum_{s'} C_{i',j',s'}^{\tau'} \mathcal{H} |i',j',s',\tau'\rangle = E \sum_{i',j',\tau'} \sum_{s'} C_{i',j',s'}^{\tau'} |i',j',s',\tau'\rangle \quad (4.5)$$

と表すことができる。両辺に左から  $\langle i, j, s, \tau |$  を作用させると

$$\begin{aligned} \sum_{i',j',\tau'} \sum_{s'} C_{i',j',s'}^{\tau'} \langle i, j, s, \tau | \mathcal{H} |i',j',s',\tau'\rangle &= E \sum_{i',j',\tau'} \sum_{s'} C_{i',j',s'}^{\tau'} \langle i, j, s, \tau | i',j',s',\tau'\rangle \\ &= E \sum_{i',j',\tau'} \sum_{s'} C_{i',j',s'}^{\tau'} \delta_{ii'} \delta_{jj'} \delta_{ss'} \delta_{\tau\tau'} \\ &= E C_{i,j,s}^{\tau} \end{aligned} \quad (4.6)$$

となる。以下でジグザグ型リボンとアームチェア型リボンにおける運動方程式を得る手法について記す。

#### 4.2.2 ジグザグ型リボンの波動関数が従う運動方程式

ジグザグ型リボンでは式 (4.6) より以下の2つの運動方程式を得る。

$$\begin{aligned} (E1 - \mathcal{H}_j^\alpha) C_j^\alpha + t_{(j\alpha \leftarrow j\beta)} C_j^\beta + t_{(j\alpha \leftarrow j+1\alpha)} C_{j+1}^\alpha \\ + t_{(j\alpha \leftarrow j-1\beta)} C_{j-1}^\beta + t_{(j\alpha \leftarrow j-1\alpha)} C_{j-1}^\alpha = 0 \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} (E1 - \mathcal{H}_j^\beta) C_j^\beta + t_{(j\beta \leftarrow j+1\alpha)} C_{j+1}^\alpha + t_{(j\beta \leftarrow j+1\beta)} C_{j+1}^\beta \\ + t_{(j\beta \leftarrow j\alpha)} C_j^\alpha + t_{(j\beta \leftarrow j-1\beta)} C_{j-1}^\beta = 0 \end{aligned} \quad (4.8)$$

ここで  $\mathbf{0}$  は零ベクトル、 $\mathbf{1}$  は単位行列である。 $\mathbf{C}_j^\tau$  は  $j$  番目の単位セルの中の  $\tau$  列の振幅を表すベクトルであり、以下のように定義される。

$$\mathbf{C}_j^\tau = \begin{pmatrix} C_{j\uparrow}^\tau \\ C_{j\downarrow}^\tau \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

$$\mathbf{C}_{js}^\tau = \begin{pmatrix} C_{1,js}^\tau \\ C_{2,js}^\tau \\ \vdots \\ C_{N,js}^\tau \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

また  $\mathcal{H}_j^\tau$  は  $j$  番目の単位セルの  $\tau$  列におけるハミルトニアンを表す  $2N \times 2N$  行列で、

$$\mathcal{H}_j^\tau = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{j\uparrow}^\tau & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathcal{H}_{j\downarrow}^\tau \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

と定義できる。ここで  $\mathcal{H}_{js}^\tau$  は  $N \times N$  行列であり、以下のように書ける。

$$\mathcal{H}_{js}^\alpha = \begin{pmatrix} +M & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & -M & -t & 0 & \cdots \\ 0 & -t & +M & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & -M & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

$$\mathcal{H}_{js}^\beta = \begin{pmatrix} -M & -t & 0 & 0 & \cdots \\ -t & +M & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & -M & -t & \cdots \\ 0 & 0 & -t & +M & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

で表される。一方、 $\mathbf{t}_{(j\tau \leftarrow j'\tau')}$  は単位セル  $j'$  の  $\tau'$  列から単位セル  $j$  の  $\tau$  列への電荷移動に対応する  $2N \times 2N$  行列で以下のように定義される。

$$\mathbf{t}_{(j\tau \leftarrow j'\tau')} = \begin{pmatrix} \mathbf{t}_{(j\tau \leftarrow j'\tau')}^\uparrow & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{t}_{(j\tau \leftarrow j'\tau')}^\downarrow \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

$\mathbf{t}_{(j\tau \leftarrow j'\tau')}^s$  は  $N \times N$  行列であり、

$$\mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j\beta)}^s = \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j\alpha)}^s = \begin{pmatrix} t & -ist_2 & 0 & 0 & \cdots \\ +ist_2 & t & +ist_2 & 0 & \cdots \\ 0 & -ist_2 & t & -ist_2 & \cdots \\ 0 & 0 & +ist_2 & t & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

$$\mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j-1\beta)}^s = \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j+1\alpha)}^s = \begin{pmatrix} t & +ist_2 & 0 & 0 & \cdots \\ -ist_2 & t & -ist_2 & 0 & \cdots \\ 0 & +ist_2 & t & +ist_2 & \cdots \\ 0 & 0 & -ist_2 & t & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

$$\mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j+1\alpha)}^s = \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j-1\beta)}^s = \begin{pmatrix} +ist_2 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & -ist_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & +ist_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & -ist_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

$$\mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j-1\alpha)}^s = \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j+1\beta)}^s = \begin{pmatrix} -ist_2 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & +ist_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & -ist_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & +ist_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

である。式 (4.7), 式 (4.8) をまとめて書くと

$$\begin{pmatrix} E\mathbf{1} - \mathcal{H}_j^\alpha & \mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j\beta)} \\ \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j\alpha)} & E\mathbf{1} - \mathcal{H}_j^\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_j^\alpha \\ \mathbf{C}_j^\beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j+1\alpha)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j+1\alpha)} & \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j+1\beta)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{j+1}^\alpha \\ \mathbf{C}_{j+1}^\beta \end{pmatrix} \\ + \begin{pmatrix} \mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j-1\alpha)} & \mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j-1\beta)} \\ \mathbf{0} & \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j-1\beta)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{j-1}^\alpha \\ \mathbf{C}_{j-1}^\beta \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (4.19)$$

となる。ここで

$$\mathbf{T}_R = \begin{pmatrix} \mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j+1\alpha)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j+1\alpha)} & \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j+1\beta)} \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

$$\mathbf{T}_L = \begin{pmatrix} \mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j-1\alpha)} & \mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j-1\beta)} \\ \mathbf{0} & \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j-1\beta)} \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

$$\mathcal{H}_j = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_j^\alpha & -\mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j\beta)} \\ -\mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j\alpha)} & \mathcal{H}_j^\beta \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

$$\mathbf{C}_j = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_j^\alpha \\ \mathbf{C}_j^\beta \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

と置くと、式 (4.19) は次のように書き換えられる。

$$(E\mathbf{1} - \mathcal{H}_j) \mathbf{C}_j + \mathbf{T}_R \mathbf{C}_{j+1} + \mathbf{T}_L \mathbf{C}_{j-1} = \mathbf{0} \quad (4.24)$$

これが波動関数が従う運動方程式である。

### 4.2.3 アームチェア型リボンの波動関数が従う運動方程式

アームチェア型リボンでは式 (4.6) より以下の2つの運動方程式を得る。

$$(E\mathbf{1} - \mathcal{H}_j^\alpha) \mathbf{C}_j^\alpha + t_{(j\alpha \leftarrow j\beta)} \mathbf{C}_j^\beta + t_{(j\alpha \leftarrow j-1\beta)} \mathbf{C}_{j-1}^\beta = \mathbf{0} \quad (4.25)$$

$$(E\mathbf{1} - \mathcal{H}_j^\beta) \mathbf{C}_j^\beta + t_{(j\beta \leftarrow j+1\alpha)} \mathbf{C}_{j+1}^\alpha + t_{(j\beta \leftarrow j\alpha)} \mathbf{C}_j^\alpha = \mathbf{0} \quad (4.26)$$

ここでジグザグ型リボンと同様に、 $\mathbf{0}$  は零ベクトル、 $\mathbf{1}$  は単位行列であり、 $\mathbf{C}_j^\tau$  は  $j$  番目の単位セルの中の  $\tau$  列の振幅を表すベクトルであり、以下のように定義される。

$$\mathbf{C}_j^\tau = \begin{pmatrix} C_{j\uparrow}^\tau \\ C_{j\downarrow}^\tau \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

$$\mathbf{C}_{js}^\tau = \begin{pmatrix} C_{1,js}^\tau \\ C_{2,js}^\tau \\ \vdots \\ C_{N,js}^\tau \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

また  $\mathcal{H}_j^\tau$  は  $j$  番目の単位セルの  $\tau$  列におけるハミルトニアンを表す  $2N \times 2N$  行列で、

$$\mathcal{H}_j^\tau = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{j\uparrow}^\tau & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathcal{H}_{j\downarrow}^\tau \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

と定義できる。ここで  $\mathcal{H}_{js}^\tau$  は  $N \times N$  行列であり、以下のように書ける。

$$\mathcal{H}_{js}^\alpha = \begin{pmatrix} -M & -t & -ist_2 & 0 & \cdots \\ -t & +M & -t & +ist_2 & \cdots \\ +ist_2 & -t & -M & -t & \cdots \\ 0 & -ist_2 & -t & +M & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

$$\mathcal{H}_{js}^\beta = \begin{pmatrix} +M & -t & +ist_2 & 0 & \cdots \\ -t & -M & -t & -ist_2 & \cdots \\ -ist_2 & -t & +M & -t & \cdots \\ 0 & +ist_2 & -t & -M & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

一方、 $\mathbf{t}_{(j\tau \leftarrow j'\tau')}$  は単位セル  $j'$  の  $\tau'$  列から単位セル  $j$  の  $\tau$  列への電荷移動に対応する  $2N \times 2N$  行列で以下のように定義される。

$$\mathbf{t}_{(j\tau \leftarrow j'\tau')} = \begin{pmatrix} \mathbf{t}_{(j\tau \leftarrow j'\tau')}^\uparrow & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{t}_{(j\tau \leftarrow j'\tau')}^\downarrow \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

$\mathbf{t}_{(j\tau \leftarrow j'\tau')}^s$  は  $N \times N$  行列であり、

$$\mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j\beta)}^s = \begin{pmatrix} t & -ist_2 & 0 & 0 & \cdots \\ -ist_2 & 0 & +ist_2 & 0 & \cdots \\ 0 & +ist_2 & t & -ist_2 & \cdots \\ 0 & 0 & -ist_2 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.33)$$

$$\mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j\alpha)}^s = \begin{pmatrix} t & +ist_2 & 0 & 0 & \cdots \\ +ist_2 & 0 & -ist_2 & 0 & \cdots \\ 0 & -ist_2 & t & +ist_2 & \cdots \\ 0 & 0 & +ist_2 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

$$\mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j-1\beta)}^s = \begin{pmatrix} 0 & -ist_2 & 0 & 0 & \cdots \\ -ist_2 & t & +ist_2 & 0 & \cdots \\ 0 & +ist_2 & 0 & -ist_2 & \cdots \\ 0 & 0 & -ist_2 & t & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

$$\mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j+1\alpha)}^s = \begin{pmatrix} 0 & +ist_2 & 0 & 0 & \cdots \\ +ist_2 & t & -ist_2 & 0 & \cdots \\ 0 & -ist_2 & 0 & +ist_2 & \cdots \\ 0 & 0 & +ist_2 & t & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

となる。アームチェア型リボンでは、ジグザグ型リボンのように式 (4.25), 式 (4.26) の2式から式 (4.37) のようにした場合、 $\mathbf{C}_{j+1}$  の係数である  $\mathbf{T}_R$  にあたる行列の逆行列が定義できない。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E1} - \mathcal{H}_j^\alpha & \mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j\beta)} \\ \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j\alpha)} & \mathbf{E1} - \mathcal{H}_j^\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_j^\alpha \\ \mathbf{C}_j^\beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j+1\alpha)} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{j+1}^\alpha \\ \mathbf{C}_{j+1}^\beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j-1\beta)} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{j-1}^\alpha \\ \mathbf{C}_{j-1}^\beta \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (4.37)$$

次節で述べるが、ジグザグ型リボンの場合と同様に計算していくためには  $\mathbf{T}_R^{-1}$  が定義される必要がある。そのため、以下では  $\mathbf{C}_j^\beta$  を  $\mathbf{C}_j^\alpha$  で表すことにより、 $\mathbf{T}_R^{-1}$  が定義可能であるような有効的な固有値方程式を求める。式 (4.26) から

$$\mathbf{C}_j^\beta = \left( \mathbf{E}\mathbf{1} - \mathcal{H}_j^\beta \right)^{-1} \left[ -\mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j+1\alpha)} \mathbf{C}_{j+1}^\alpha - \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j\alpha)} \mathbf{C}_j^\alpha \right] \quad (4.38)$$

が得られる。これを式 (4.25) に代入すると

$$\left( \mathbf{E}\mathbf{1} - \mathcal{H}_j \right) \mathbf{C}_j + \mathbf{T}_R \mathbf{C}_{j+1} + \mathbf{T}_L \mathbf{C}_{j-1} = \mathbf{0} \quad (4.39)$$

となる。ただしここで  $\mathcal{H}_j, \mathbf{T}_R, \mathbf{T}_L$  は  $2N \times 2N$  行列で

$$\mathcal{H}_j = \mathcal{H}_j^\alpha + \mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j\beta)} \left( \mathbf{E}\mathbf{1} - \mathcal{H}_j^\beta \right)^{-1} \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j\alpha)} + \mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j-1\beta)} \left( \mathbf{E}\mathbf{1} - \mathcal{H}_{j-1}^\beta \right)^{-1} \mathbf{t}_{(j-1\beta \leftarrow j\alpha)} \quad (4.40)$$

$$\mathbf{T}_R = -\mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j\beta)} \left( \mathbf{E}\mathbf{1} - \mathcal{H}_j^\beta \right)^{-1} \mathbf{t}_{(j\beta \leftarrow j+1\alpha)} \quad (4.41)$$

$$\mathbf{T}_L = -\mathbf{t}_{(j\alpha \leftarrow j-1\beta)} \left( \mathbf{E}\mathbf{1} - \mathcal{H}_{j-1}^\beta \right)^{-1} \mathbf{t}_{(j-1\beta \leftarrow j\alpha)} \quad (4.42)$$

で表される。 $\mathbf{C}_j^\alpha \equiv \mathbf{C}_j$  と書き換えた。これが波動関数が従う運動方程式である。式 (4.39) はジグザグ型リボンの定式化で得られた式 (4.24) と同じ形になっている。ただし行列サイズ、ベクトルサイズが半分になっていることに注意する。

### 4.3 チャネルの定義

式 (4.24), 式 (4.39) よりジグザグ型リボンとアームチェア型リボンの運動方程式は同じ形になっているため、以下ではジグザグ型リボンの場合について述べる。アームチェア型リボンの場合は適宜行列サイズ、ベクトルサイズを半分に読み替える。理想的なリード線を考えるとき、式 (4.24) の解を求めるために

$$\mathbf{C}_j = \lambda \mathbf{C}_{j-1} \quad (4.43)$$

と置くと、以下の式が得られる。

$$\mathbf{C}_{j+1} = \lambda \mathbf{C}_j \quad (4.44)$$

式 (4.44), 式 (4.24) より、

$$\mathbf{C}_{j+1} = \lambda \mathbf{C}_j = -\mathbf{T}_R^{-1} \left( \mathbf{E}\mathbf{1} - \mathcal{H}_j \right) \mathbf{C}_j - \mathbf{T}_R^{-1} \mathbf{T}_L \mathbf{C}_{j-1} \quad (4.45)$$

が導かれ、式 (4.43), 式 (4.45) を用いると以下の式が得られる。

$$\lambda \begin{pmatrix} \mathbf{C}_j \\ \mathbf{C}_{j-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{T}_R^{-1}(\mathbf{E}\mathbf{1} - \mathcal{H}_j) & -\mathbf{T}_R^{-1}\mathbf{T}_L \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_j \\ \mathbf{C}_{j-1} \end{pmatrix} \quad (4.46)$$

以下では  $j = 0$  とする。この固有値方程式は  $8N$  個の固有値と対応する  $8N$  個の固有ベクトルを持つ。それらは  $4N$  個の右向き解（モード）と  $4N$  個の左向き解（モード）に分類される。また、その各々は進行波の解（モード）と減衰波の解（モード）に分けられる。右向き減衰波の解は  $|\lambda| > 1$  を満たし、左向き減衰波の解は  $|\lambda| < 1$  を満たす。一方、右向き進行波も左向き進行波も  $|\lambda| = 1$  を満たすため、右向き進行波と左向き進行波を区別するために速度を直接計算し、その符号で判断する。固有値  $\lambda_n$  ( $|\lambda_n| = 1$ ) に対応する進行波の速度  $v_n$  は以下のように与えられる（付録 B 参照）。

$$v_n = -ia [\lambda_n \mathbf{u}_n^\dagger \mathbf{T}_R \mathbf{u}_n - \lambda_n^* \mathbf{u}_n^\dagger \mathbf{T}_L \mathbf{u}_n] \quad (4.47)$$

ここで、 $\mathbf{u}_n$  は  $\lambda_n$  に対応する固有ベクトルの  $\mathbf{C}_0$  に対応した部分であり、 $\mathbf{u}_n^\dagger \mathbf{u}_n = 1$  となるように規格化されている。 $v_n > 0$  を与える固有値、固有ベクトルが右向き進行波を表し、 $v_n < 0$  を与える固有値、固有ベクトルが左向き進行波を表す。右向きの波に対応する式 (4.46) の固有値を  $\lambda_1(+), \dots, \lambda_{4N}(+)$  とし、対応する固有ベクトルの  $\mathbf{C}_0$  に対応した部分を  $\mathbf{u}_1(+), \dots, \mathbf{u}_{4N}(+)$  とする。また、左向きの波に対応する式 (4.46) の固有値を  $\lambda_1(-), \dots, \lambda_{4N}(-)$  とし、対応する固有ベクトルの  $\mathbf{C}_0$  に対応した部分を  $\mathbf{u}_1(-), \dots, \mathbf{u}_{4N}(-)$  とする。ただし、固有ベクトルは  $\mathbf{u}_l^\dagger(\pm) \mathbf{u}_l(\pm) = 1$  ( $l = 1, \dots, 4N$ ) となるように規格化されている。これらを用いて以下のような行列を定義する。

$$\mathbf{U}(\pm) = (\mathbf{u}_1(\pm), \dots, \mathbf{u}_{4N}(\pm)) \quad (4.48)$$

$$\mathbf{\Lambda}(\pm) = \begin{pmatrix} \lambda_1(\pm) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2(\pm) & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_{4N}(\pm) \end{pmatrix} \quad (4.49)$$

$j = 0$  における振幅  $\mathbf{C}_0$  の右向き成分  $\mathbf{C}(+)$  と左向き成分  $\mathbf{C}(-)$  は以下のように展開できる。

$$\mathbf{C}_0(\pm) = \sum_{n=1}^{4N} C_n(\pm) \mathbf{u}(\pm) \quad (4.50)$$

$$= \mathbf{U}(\pm) \mathbf{C}(\pm) \quad (4.51)$$

ここで  $\mathbf{C}(\pm)$  は

$$\mathbf{C}(\pm) = \begin{pmatrix} C_1(\pm) \\ C_2(\pm) \\ \vdots \\ C_{4N}(\pm) \end{pmatrix} \quad (4.52)$$

で表されるベクトルであり、その成分はモード毎の振幅を表している。一般の  $j$  に対して、 $\mathbf{C}_j(\pm)$  は式 (4.43) を用いて

$$\mathbf{C}_j(\pm) = \sum_{n=1}^{4N} \lambda_n^j(\pm) C_n(\pm) \mathbf{u}_n(\pm) \quad (4.53)$$

$$= \mathbf{U}(\pm) \mathbf{\Lambda}^j(\pm) \mathbf{C}(\pm) \quad (4.54)$$

と表すことができる。ここで  $\mathbf{\Lambda}^j(\pm)$  は

$$\mathbf{\Lambda}^j(\pm) = \begin{pmatrix} \lambda_1^j(\pm) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^j(\pm) & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_{4N}^j(\pm) \end{pmatrix} \quad (4.55)$$

で表される。また  $\mathbf{C}_{j'}(\pm)$  は

$$\mathbf{C}_{j'}(\pm) = \mathbf{U}(\pm) \mathbf{\Lambda}^{j'}(\pm) \mathbf{C}(\pm) \quad (4.56)$$

となる。式 (4.56) より  $\mathbf{C}(\pm)$  は

$$\mathbf{C}(\pm) = \mathbf{\Lambda}^{-j'}(\pm) \mathbf{U}^{-1}(\pm) \mathbf{C}_{j'}(\pm) \quad (4.57)$$

となり、式 (4.54), 式 (4.57) から以下の関係式が得られる。

$$\mathbf{C}_j(\pm) = \mathbf{U}(\pm) \mathbf{\Lambda}^{j-j'}(\pm) \mathbf{U}^{-1}(\pm) \mathbf{C}_{j'}(\pm) \quad (4.58)$$

$$\equiv \mathbf{F}^{j-j'}(\pm) \mathbf{C}_{j'}(\pm) \quad (4.59)$$

ここで

$$\mathbf{F}(\pm) = \mathbf{U}(\pm) \mathbf{\Lambda}(\pm) \mathbf{U}^{-1}(\pm) \quad (4.60)$$

である。

## 4.4 散乱問題

引き続きジグザグ型リボンの場合の散乱問題を考える。アームチェア型リボンの場合も行列サイズ、ベクトルサイズを半分にすることにより同様に計算できる。左側のリード線の終わり ( $j = 0$ ) では入射波と反射波が存在する。 $j = 0$  で右向きに進む波の振幅を  $C_0(+)$ 、左向きに進む波の振幅を  $C_0(-)$  とすると、0 番目のセルの振幅  $C_0$  は以下のようになる。

$$C_0 = C_0(+) + C_0(-) \quad (4.61)$$

式 (4.60) を用いると、 $-1$  番目のセルの振幅  $C_{-1}$  は

$$\begin{aligned} C_{-1} &= C_{-1}(+) + C_{-1}(-) \\ &= F^{-1}(-)C_0 + [F^{-1}(+) - F^{-1}(-)] C_0(+) \end{aligned} \quad (4.62)$$

と表される。よって 0 番目のセルの運動方程式は式 (4.24) より

$$(E1 - \tilde{\mathcal{H}}_0) C_0 + T_R C_1 = -T_L [F^{-1}(+) - F^{-1}(-)] C_0(+) \quad (4.63)$$

となる。ここで  $\tilde{\mathcal{H}}_0$  は

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = \mathcal{H}_0 - T_L F^{-1}(-) \quad (4.64)$$

である。一方  $L+1$  番目のセルでは右向きの波のみが存在するので、 $L+1$  番目のセルの振幅  $C_{L+1}$  は以下のようになる。

$$C_{L+1} = C_{L+1}(+) \quad (4.65)$$

式 (4.60) を用いると

$$C_{L+2} = F(+ ) C_{L+1}(+) \quad (4.66)$$

となるので、 $L+1$  番目のセルの運動方程式は式 (4.24) より

$$(E1 - \tilde{\mathcal{H}}_{L+1}) C_{L+1} + T_L C_L = 0 \quad (4.67)$$

となる。ここで  $\tilde{\mathcal{H}}_{L+1}$  は

$$\tilde{\mathcal{H}}_{L+1} = \mathcal{H}_{L+1} - T_R F(+ ) \quad (4.68)$$

である。式 (4.24), 式 (4.63), 式 (4.67) を用いて 0 番目から  $L + 1$  番目までのセルの運動方程式を行列の形で表すと

$$\begin{pmatrix} E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}_0 & \mathbf{T}_R & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{T}_L & E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}_1 & \mathbf{T}_R & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{T}_L & E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}_2 & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}_L & \mathbf{T}_R \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{T}_L & E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}_{L+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_0 \\ \mathbf{C}_1 \\ \mathbf{C}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{C}_L \\ \mathbf{C}_{L+1} \end{pmatrix} \quad (4.69)$$

$$= \begin{pmatrix} -\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_0(+), \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (4.70)$$

となる。ただし  $\tilde{\mathcal{H}}_j = \mathcal{H}_j$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ) である。ここでグリーン関数

$$G = \frac{1}{E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}} \quad (4.71)$$

を定義する。ここで

$$\tilde{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathcal{H}}_0 & -\mathbf{T}_R & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{T}_L & \tilde{\mathcal{H}}_1 & -\mathbf{T}_R & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{T}_L & \tilde{\mathcal{H}}_2 & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \tilde{\mathcal{H}}_L & -\mathbf{T}_R \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & -\mathbf{T}_L & \tilde{\mathcal{H}}_{L+1} \end{pmatrix} \quad (4.72)$$

で、 $\tilde{\mathcal{H}}$  の各成分は  $4N \times 4N$  行列である。グリーン関数を用いて書き直すと、

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C}_0 \\ \mathbf{C}_1 \\ \mathbf{C}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{C}_L \\ \mathbf{C}_{L+1} \end{pmatrix} = G \begin{pmatrix} -\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] \mathbf{C}_0(+) & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (4.73)$$

となる。ここから 0 番目のセルの振幅と  $L + 1$  番目のセルの振幅は以下のように導かれる。

$$\mathbf{C}_0 = -(0|G^{(L+1)}|0)\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] \mathbf{C}_0(+) \quad (4.74)$$

$$\mathbf{C}_{L+1} = -(L+1|G^{(L+1)}|0)\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] \mathbf{C}_0(+) \quad (4.75)$$

式 (4.61), (4.74) より、 $j = 0$  で左向きに進む波の振幅は

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_0(-) &= \mathbf{C}_0 - \mathbf{C}_0(+) \\ &= \left\{ -(0|G^{(L+1)}|0)\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] - \mathbf{1} \right\} \mathbf{C}_0(+) \end{aligned} \quad (4.76)$$

である。一方  $j = L+1$  では右向きに進む波しか存在しないので、その波の振幅  $\mathbf{C}_{L+1}(+)$  は式 (4.75) を用いて

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{L+1}(+) &= \mathbf{C}_{L+1} \\ &= -(L+1|G^{(L+1)}|0)\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] \mathbf{C}_0(+) \end{aligned} \quad (4.77)$$

となる。式 (4.51) を用いると、 $j = 0$  で右向き、左向きに進む波と  $j = L+1$  で右向きに進む波はモード毎の振幅を表す  $\mathbf{C}_{\text{inc}}$ ,  $\mathbf{C}_{\text{ref}}$  および  $\mathbf{C}_{\text{trans}}$  を用いて次のように表される。

$$\mathbf{C}_0(+) = \mathbf{U}(+)\mathbf{C}_{\text{inc}} \quad (4.78)$$

$$\mathbf{C}_0(-) = \mathbf{U}(-)\mathbf{C}_{\text{ref}} \quad (4.79)$$

$$\mathbf{C}_{L+1}(+) = \mathbf{U}(+)\mathbf{C}_{\text{trans}} \quad (4.80)$$

式 (4.77), (4.80) より、

$$\mathbf{C}_{\text{trans}} = -\mathbf{U}^{-1}(+)(L+1|G^{(L+1)}|0)\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] \mathbf{U}(+)\mathbf{C}_{\text{inc}} \quad (4.81)$$

が得られる。また式 (4.76), (4.79) より、

$$\mathbf{C}_{\text{ref}} = \mathbf{U}^{-1}(-) \left\{ -(0|G^{(L+1)}|0)\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] - \mathbf{1} \right\} \mathbf{U}(+)\mathbf{C}_{\text{inc}} \quad (4.82)$$

となる。式 (4.81), (4.82) より  $\nu$  番目のチャネルから  $\mu$  番目のチャネルへの透過係数  $t_{\mu\nu}$ ,  $\nu$  番目のチャネルから  $\mu$  番目のチャネルへの反射係数  $r_{\mu\nu}$  は

$$t_{\mu\nu} = \sqrt{\frac{v_\mu}{v_\nu}} \left\{ -\mathbf{U}^{-1}(+)(L+1|G^{(L+1)}|0)\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] \mathbf{U}(+) \right\}_{\mu\nu} \quad (4.83)$$

$$r_{\mu\nu} = \sqrt{-\frac{v_\mu}{v_\nu}} \left\{ \mathbf{U}^{-1}(-) \left\{ -(0|G^{(L+1)}|0)\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] - \mathbf{1} \right\} \mathbf{U}(+) \right\}_{\mu\nu} \quad (4.84)$$

となる。ここで  $v_\mu$ ,  $v_\nu$  はそれぞれ  $\mu$  番目、 $\nu$  番目のチャネルの速度である。減衰波のモードは電流を流さないで  $\mu$ ,  $\nu$  は進行波のモードのみとなる。

## 4.5 再帰グリーン関数

透過係数  $t_{\mu\nu}$ , 反射係数  $r_{\mu\nu}$  を求めたい。そこで再帰グリーン関数の方法を用いて  $(L+1|G^{(L+1)}|0)$  と  $(0|G^{(L+1)}|0)$  を求める。まずグリーン関数を以下のように定義する。

$$(j|G^{(j)}|j) = \left( j \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \right| j \right) \quad (4.85)$$

$$(j|G^{(j)}|0) = \left( j \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \right| 0 \right) \quad (4.86)$$

$$(0|G^{(j)}|0) = \left( 0 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \right| 0 \right) \quad (4.87)$$

$$(0|G^{(j)}|j) = \left( 0 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \right| j \right) \quad (4.88)$$

ここで  $\tilde{\mathcal{H}}^{(j)}$  は式 (4.72) の 0 から  $j$  番目までのセルから構成される系のハミルトニアンとする。すると  $\tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)}$  は次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} &= \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} + \tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j+1} + \tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j} + \tilde{\mathcal{H}}_{j,j+1} \\ &= \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} + h(j+1) \end{aligned} \quad (4.89)$$

ここで、 $\tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j+1}$  は  $j+1$  セル内のハミルトニアン  $\tilde{\mathcal{H}}_{j+1}$  であり、 $\tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j}$  はセル  $j$  からセル  $j+1$  への電荷移動を表すハミルトニアン、 $\tilde{\mathcal{H}}_{j,j+1}$  はセル  $j+1$  からセル  $j$  への電荷移動を表すハミルトニアンであり、本モデルではそれぞれ  $-\mathbf{T}_L$ ,  $-\mathbf{T}_R$  である。また、 $h(j+1) = \tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j+1} + \tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j} + \tilde{\mathcal{H}}_{j,j+1}$  とした。ここで  $G^{(j+1)}$  は

$$\begin{aligned} G^{(j+1)} &= \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} \\ &= \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} - h(j+1) \right)^{-1} \\ &= \left\{ \mathbf{1} - \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} h(j+1) \right\} \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \\ &= \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} + \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} h(j+1) \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} \\ &= \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} + \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} h(j+1) \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (4.90)$$

と表せる。よって

$$\begin{aligned}
(j+1|G^{(j+1)}|0) &= \left( j+1 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} + \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} h(j+1) \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \right| 0 \right) \\
&= \left( j+1 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} \tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j} \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \right| 0 \right) \\
&= (j+1|G^{(j+1)}|j+1) \tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j} (j|G^{(j)}|0) \tag{4.91}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&(j+1|G^{(j+1)}|j+1) \\
&= \left( j+1 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} + \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} h(j+1) \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \right| j+1 \right) \\
&= \frac{1}{E} \mathbf{1} + \left( j+1 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} \right| j+1 \right) \tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j+1} \frac{1}{E} \mathbf{1} \\
&\quad + \left( j+1 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} \right| j \right) \tilde{\mathcal{H}}_{j,j+1} \frac{1}{E} \mathbf{1} \\
&= \frac{1}{E} \mathbf{1} + (j+1|G^{(j+1)}|j+1) \tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j+1} \frac{1}{E} \mathbf{1} \\
&\quad + (j+1|G^{(j+1)}|j+1) \tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j} (j|G^{(j)}|j) \tilde{\mathcal{H}}_{j,j+1} \frac{1}{E} \mathbf{1}
\end{aligned}$$

$$\therefore (j+1|G^{(j+1)}|j+1)^{-1} = E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j+1} - \tilde{\mathcal{H}}_{j+1,j} (j|G^{(j)}|j) \tilde{\mathcal{H}}_{j,j+1} \tag{4.92}$$

$$\begin{aligned}
(0|G^{(j+1)}|0) &= \left( 0 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} + \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} h(j+1) \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} \right| 0 \right) \\
&= \left( 0 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \right| 0 \right) \\
&\quad + \left( 0 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \right| j \right) \tilde{\mathcal{H}}_{j,j+1} \left( j+1 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} \right| 0 \right) \\
&= (0|G^{(j)}|0) + (0|G^{(j)}|j) \tilde{\mathcal{H}}_{j,j+1} (j+1|G^{(j+1)}|0) \tag{4.93}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(0|G^{(j+1)}|j+1) &= \left( 0 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} + \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} h(j+1) \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} \right| j+1 \right) \\
&= \left( 0 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j)} \right)^{-1} \right| j \right) \tilde{\mathcal{H}}_{j,j+1} \left( j+1 \left| \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}^{(j+1)} \right)^{-1} \right| j+1 \right) \\
&= (0|G^{(j)}|j) \tilde{\mathcal{H}}_{j,j+1} (j+1|G^{(j+1)}|j+1) \tag{4.94}
\end{aligned}$$

である。式 (4.91), (4.92), (4.93), (4.94) を用いて透過係数  $t_{\mu\nu}$ , 反射係数  $r_{\mu\nu}$  を求めることができる。ただし初期条件は

$$(0|G^{(0)}|0) = \left( E\mathbf{1} - \tilde{\mathcal{H}}_0 \right)^{-1} \tag{4.95}$$

である。また確率の保存より以下の式が成り立つ。

$$\sum_{\mu} (|t_{\mu\nu}|^2 + |r_{\mu\nu}|^2) = 1 \quad (4.96)$$

数値計算を行なう際にすべての計算で式 (4.96) が成り立っていることを確認した。



## 第 5 章

# 結果 1 通常の不純物による散乱

本章では、Kane-Mele 模型に通常の不純物による散乱が存在する場合の輸送現象に関して本研究で得られた結果を紹介する。ここで、通常の不純物による散乱とは時間反転対称性がありスピンを保存する散乱であり、そのハミルトニアン  $\mathcal{H}_{\text{imp}}^{\text{normal}}$  は以下のように与えられる。

$$\mathcal{H}_{\text{imp}}^{\text{normal}} = \sum_{p,s} K_p C_{p,s}^\dagger C_{p,s} \quad (5.1)$$

ここで、 $p$  は不純物が存在する位置であり、 $K_p$  は位置  $p$  における不純物ポテンシャルの強さである。5.1 節では端に数個の不純物が存在する場合、5.2 節では試料全体に不純物がランダムに分布した場合について議論する。5.3 節では異なるバレーチェーン数を持つ相を接合した試料の境界付近に不純物がある場合、5.4 節では異なるバレーチェーン数を持つ相を接合した試料全体に不純物がランダムに分布した場合について述べる。なお、5.1 節、5.3 節では不純物ポテンシャルの強さは位置によって変化しないため、 $K_p \equiv K$  とする。

### 5.1 数個の不純物が端に存在する場合

系の端に不純物が存在するときの輸送特性に対する不純物散乱の効果について議論する。図 5.1 に本節で考察を行なう不純物の位置を示す。(a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのそれぞれについて、(1) が上端に不純物がある場合、(2) が下端に不純物がある場合、(3) が上下端の 2 ヶ所に不純物が存在する場合を表す。

図 5.1 に示す不純物の配置で、 $K/t = 100$  の非常に強い不純物ポテンシャル  $K$  が存在する場合のコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$  依存性を図 5.2 に示す。(a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンのそれぞれについて、上端（下端）に不純物が存在する場合が赤（緑）、上下端の 2 ヶ所に不純物が存在する場合が青で表されている。ここで

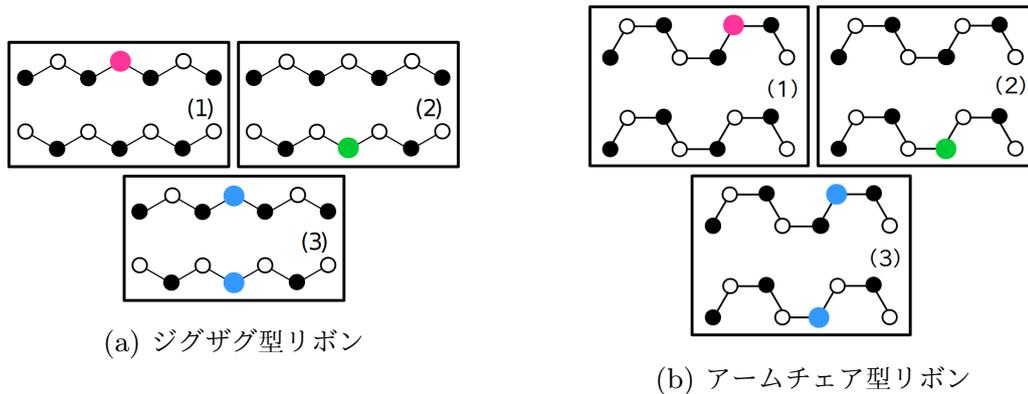


図 5.1: 本節で考察する (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンの試料における不純物の配置。(1) 上端の 1 ヶ所 (赤)・(2) 下端の 1 ヶ所 (緑)・(3) 上下端の 2 ヶ所 (青)。

$t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  を用いている。なお、図 5.2 には不純物のない系のコンダクタンスが黒線で示されている。

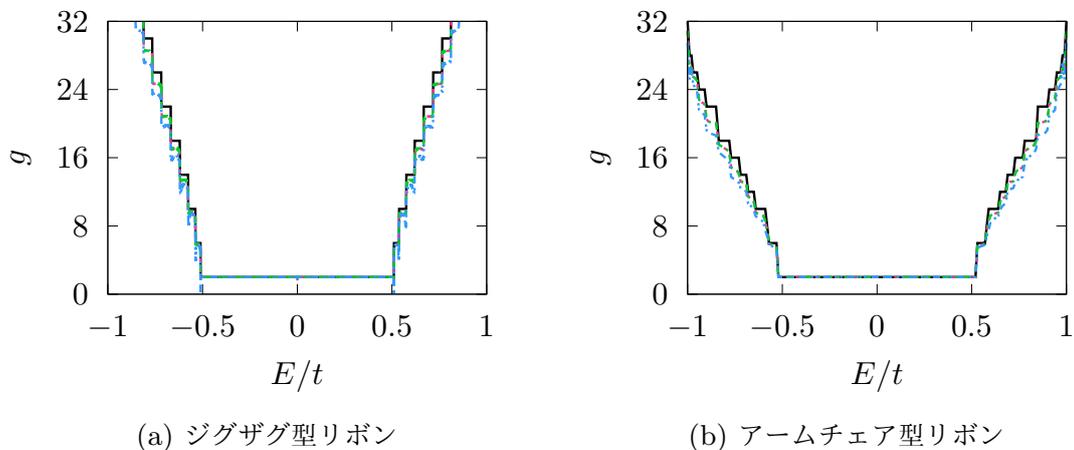


図 5.2: 上端の 1 ヶ所 (赤)、下端の 1 ヶ所 (緑)、上下端の 2 ヶ所 (青) に  $K/t = 100$  の強さの不純物ポテンシャルが存在する場合の (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$  依存性。黒の実線は不純物がない場合である。ここで  $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  とした。

次に不純物を図 5.1(3) のように上下端の 2 ヶ所に置き、不純物ポテンシャルの強さを変化させた場合の (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンのコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$  依存性を図 5.3 に示す。不純物ポテンシャルの強さは  $K/t = 0.5$  (赤)、 $K/t = 5.0$  (緑)、 $K/t = 100$  (青) とした。黒の実線は不純物がない場合の結果である。 $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  とした。

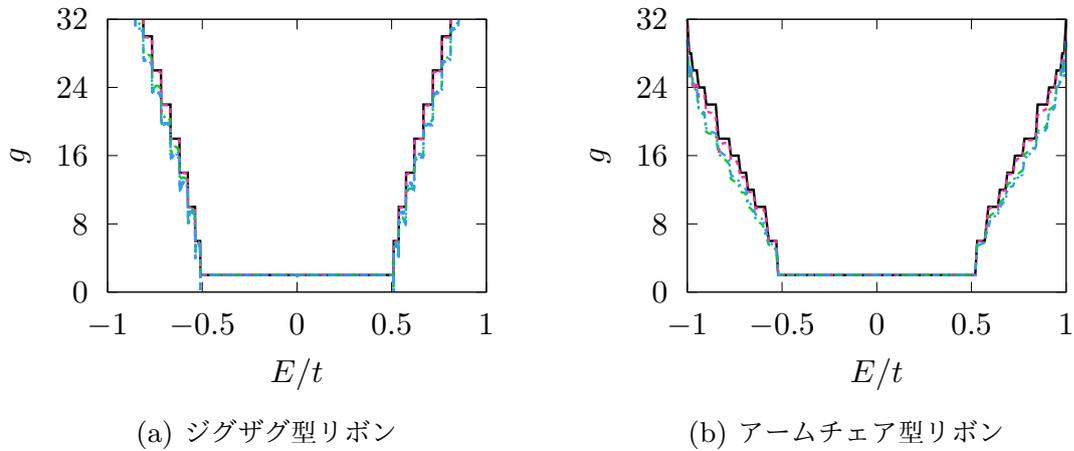


図 5.3: 図 5.1(3) のように上下端の 2 ヶ所に不純物が存在する場合の (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$  依存性。不純物ポテンシャルの強さは  $K/t = 0.5$  (赤)、 $K/t = 5.0$  (緑)、 $K/t = 100$  (青) とした。黒の実線は不純物がない場合である。ここで  $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  とした。

ヘリカルエッジ状態のみがコンダクタンスに寄与しているエネルギー領域は、不純物がない場合（図 5.2 および図 5.3 の黒線）で  $g = 2$  となっている領域、 $-0.5 \lesssim E/t \lesssim 0.5$  である。端に不純物が存在する場合であっても、この領域では  $g = 2$  のままである。すなわち、不純物ポテンシャルの強さによらずヘリカルエッジ状態は完全透過している。一方バルクの状態がコンダクタンスに寄与するとき、つまり黒線で表されたコンダクタンス  $g > 2$  であるときは不純物の影響を受け、伝導が抑制されてコンダクタンスは不純物がない場合に比べて小さくなっている。コンダクタンスに影響を及ぼす不純物散乱は後方散乱である。有限幅のトポロジカル絶縁体で出現するヘリカルエッジ状態においては、上向きスピンと下向きスピンが試料の端を互いに逆向きに流れるため、一端に着目したときスピンを反転させるような不純物でない限り後方散乱は起こらず、また幅が十分に広い場合には不純物ポテンシャルがいかに強くとも一端から他端への散乱は起こらない。これがヘリカルエッジ状態のみがコンダクタンスに寄与しているとき、 $g = 2$  のままである理由である。

## 5.2 系全体にランダムに不純物が分布している場合

次に通常の不純物が系全体にランダムに分布している場合について考察する。通常の 1 次元系、2 次元系では、任意の強さのランダムポテンシャルが存在すると波動関数の局在

(アンダーソン局在) が起こり、コンダクタンスは試料の長さを  $L$  として

$$g = g_0 \exp(-\alpha L/\xi) \quad (5.2)$$

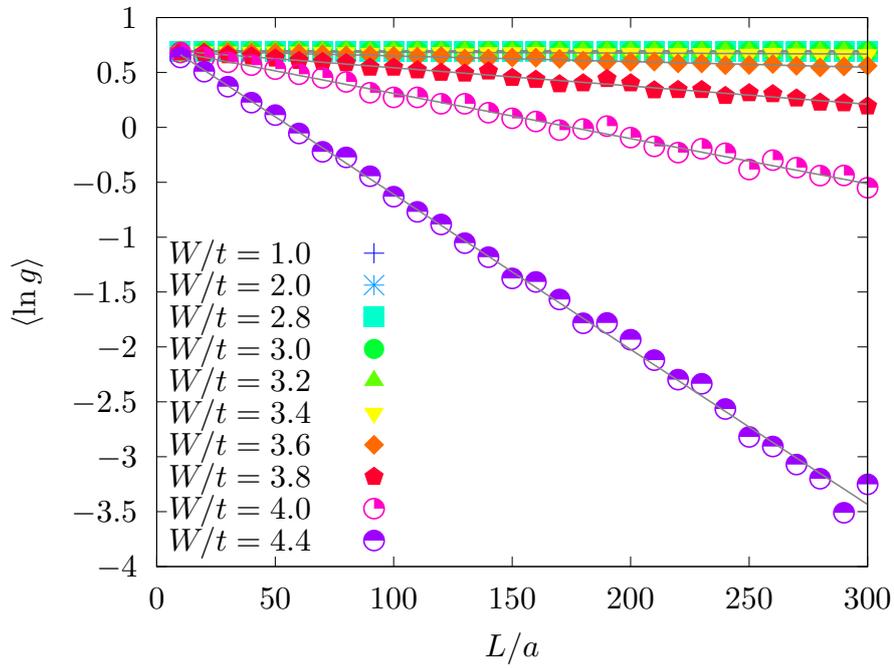
のように振舞うことが知られている [47]。ここで  $\alpha$  は  $O(1)$  の定数、 $\xi$  は局在長であり、1次元系の場合は平均自由行程を表す。トポロジカル絶縁体のヘリカルエッジ状態は1次元的な伝導状態であるが、5.1節で示したように数個の通常の不純物散乱による影響を受けない。したがって通常の1次元系とは異なる局在現象が起こることが期待される。

各格子点のポテンシャル  $K_p$  を  $-W/2 \leq K_p \leq +W/2$  でランダムに発生させ、そのようなポテンシャルのもとで  $E/t = 0.005$  におけるコンダクタンス  $g$  を計算する。そのような操作を 1000 個のサンプルで行ない、その対数平均  $\langle \ln g \rangle$  の長さ  $L$  依存性を (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンのそれぞれについて図 5.4 に示す。 $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  とした。局在長  $\xi$  は数値計算データから以下の式によって得られる [48]。

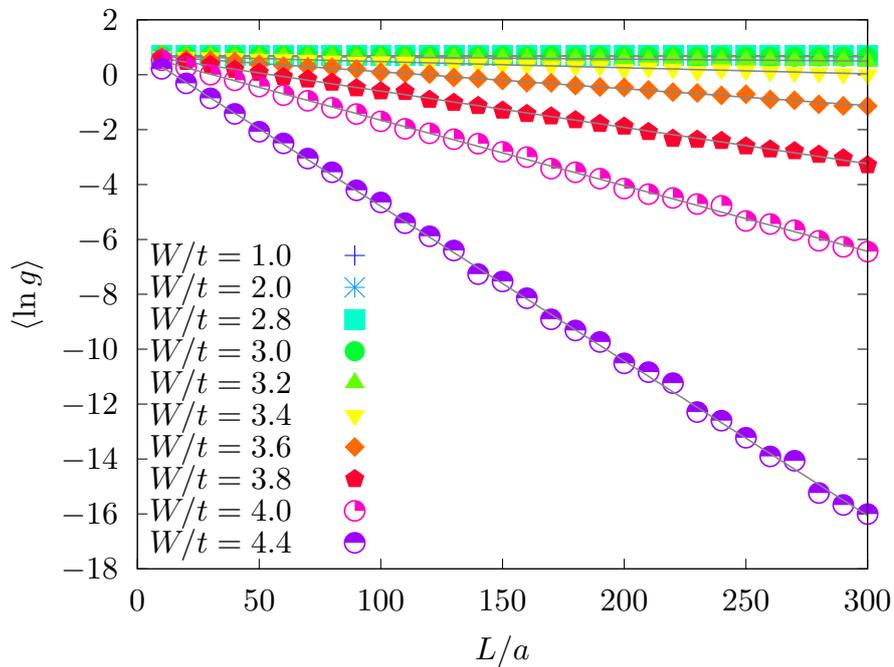
$$\langle \ln g \rangle = -\alpha L/\xi + \text{Const.} \quad (5.3)$$

乱れがある程度小さい場合には局在が起こらず、コンダクタンスは2のみである。しかし  $W$  が大きくなってくるとコンダクタンスは2よりも小さくなり、 $L$  が十分に大きくなると式 (5.3) に従う振る舞いが出現する。これはランダムポテンシャルによる多重散乱によって上下端に局在している右向きのエッジ状態が中間状態としてバルクのバンドの状態を介してそれぞれ反対の端にある左向きエッジ状態へ散乱すること（後方散乱）が可能になったためであると考えられる。ヘリカルエッジ状態とバルクのバンド状態の間には有限のエネルギー差が存在し、これを超えて散乱が起こる必要があるためランダムポテンシャルには閾値が現れる。局在が起こるランダムポテンシャルの閾値  $W_c$  を正確に定めることは難しいが、図 5.4 の場合にはジグザグ型リボン、アームチェア型リボンともに  $W_c/t \sim 3.4$  であることが示唆される。

$N = 16$ ,  $N = 24$ ,  $N = 64$  の場合についても同様に計算を行ない、 $N = 32$  を含めた4つの場合について式 (5.3) を用いて局在長  $\xi$  を求める。図 5.5 に (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンについて得られた局在長  $\xi$  の逆数のランダムポテンシャルの幅  $W$  依存性を示す。ランダムポテンシャルの幅  $W$  を固定したとき、ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれについても  $N$  が小さいほど局在しやすいことがわかる。これはチャンネル幅が狭いほど一方から他方への散乱が起こりやすいことに起因している。またチャンネル幅  $N$  が同じ場合においてジグザグ型リボンとアームチェア型リボンを比較すると、アームチェア型リボンのほうがジグザグ型リボンよりも局在しやすいことがわかる。これは波動関数の広がり方が図 3.3, 図 3.4 に示したようにジグザグ型リボンに比べアーム



(a) ジグザグ型リボン



(b) アームチェア型リボン

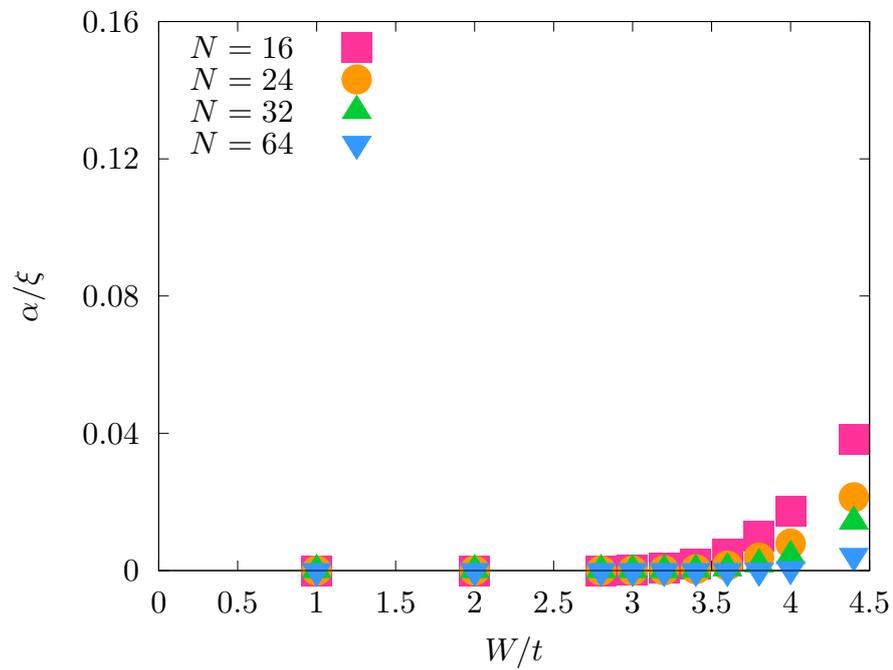
図 5.4: (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンの各格子点に不純物ポテンシャルが  $-W/2$  から  $+W/2$  の範囲で試料全体にランダムに分布した場合の  $E/t = 0.005$  でのコンダクタンスの対数平均  $\langle \ln g \rangle$  の長さ  $L$  依存性。1000 個のサンプルで平均をとった。  $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  とした。

ムチェア型リボンのほうが広く、一方から他方への散乱が起りやすいためである。局在が起こる閾値  $W_c$  はジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合もチャンネル幅  $N$  に依存しており、 $N$  が大きいほど  $W_c$  は大きくなることが示唆される結果となった。

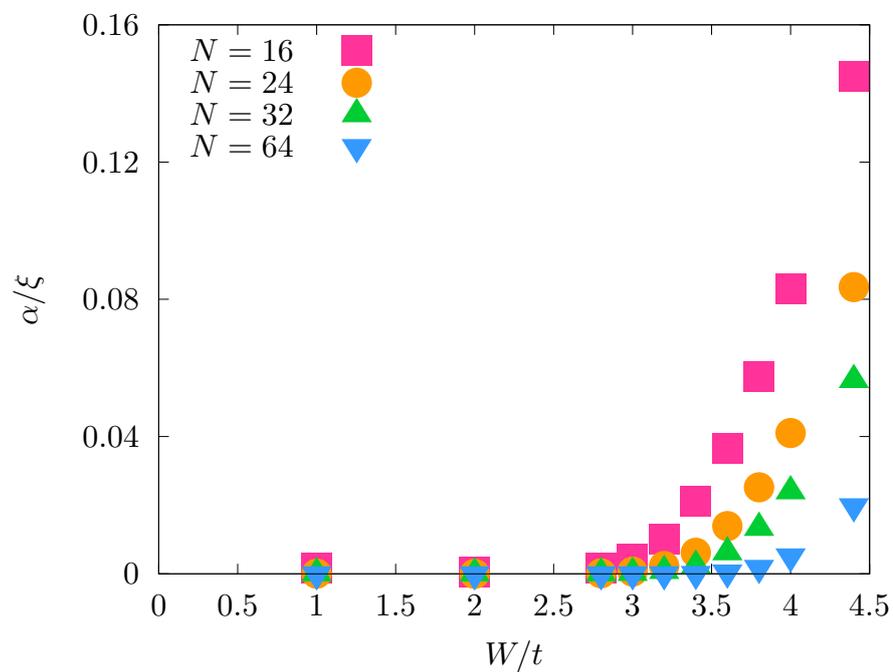
次に交替ポテンシャル  $M$  による効果を調べた。図 5.6 に (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンについて  $M/t = 0.0$ ,  $M/t = 0.1$ ,  $M/t = 0.2$  の場合の局在長  $\xi$  の逆数のランダムポテンシャルの幅  $W$  依存性を示す。ランダムポテンシャルの幅  $W$  を固定したとき、ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合でも交替ポテンシャル  $M$  が大きくなるにつれて局在しやすくなっていることがわかる。これは図 3.7 に示したように、 $M$  が大きいほどバルクのバンドへの遷移が容易になるためである。また、交替ポテンシャル  $M$  が同じ場合においてジグザグ型リボンとアームチェア型リボンと比較すると、アームチェア型リボンのほうがジグザグ型リボンよりも局在しやすいことがわかる。これは波動関数の広がり図 3.3, 図 3.4 に示したようにジグザグ型リボンに比べアームチェア型リボンのほうが広く、一方から他方への散乱が起りやすいためである。局在は交替ポテンシャル  $M$  の大きさにかかわらずジグザグ型リボンでは  $W/t \sim 3.6$ , アームチェア型リボンでは  $W/t \sim 3.2$  から起り始めており、局在が起こる閾値  $W_c$  は  $M$  に依存しないことが示唆される。

### 5.3 接合系の相境界に 1 個の不純物がある場合

3.3 節で述べたように、異なるバレーチェーン数を持つ相を接合した系では、その境界にトポロジカル量子数が定義でき、有限の量子数がある場合には境界に伝導状態が出現する。ここでは境界付近に現れる伝導状態に対する不純物散乱の効果について述べる。図 5.7 に  $(C_s, C_v) = (0, -2)$  の系と  $(C_s, C_v) = (0, +2)$  の系を黒の破線を境界として伝導方向に沿って接合し、(a) ジグザグ型リボンで青丸の位置、(b) アームチェア型リボンで赤丸の位置に不純物が存在する場合を考える。図 5.8 にそのような不純物が存在する場合の (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$  依存性を示す。黒の実線は不純物がない場合を表し、それ以外はそれぞれ不純物ポテンシャルの強さが  $K/t = 0.5$  (赤)、 $K/t = 5.0$  (緑)、 $K/t = 100$  (青) の場合を表している。 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とし、 $M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を接合している。なお、図 5.8(b) のアームチェア型リボンについては  $|E|/t \geq 0.5$  においてコンダクタンスが非常に大きな値となっている箇所がいくつか現れているが、これは数値計算の誤差によりコンダクタンスが計算不可能となっていることによる。本節では境界状態のみがコンダクタンスに寄与しているとき、つまり不純物がない場合 (黒線) で  $g = 2$  となっているときに着目するため、これらの箇所については無視することとする。

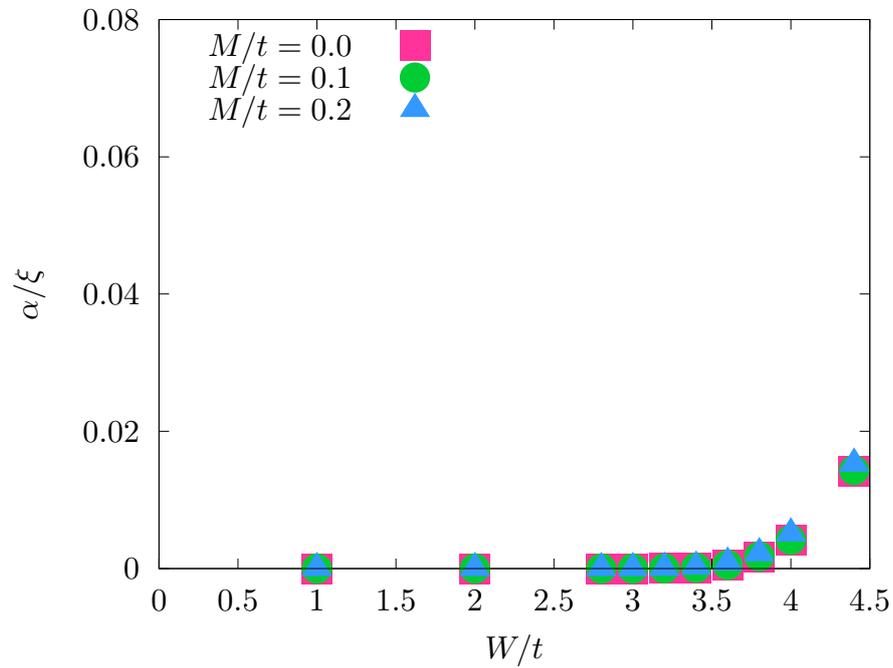


(a) ジグザグ型リボン

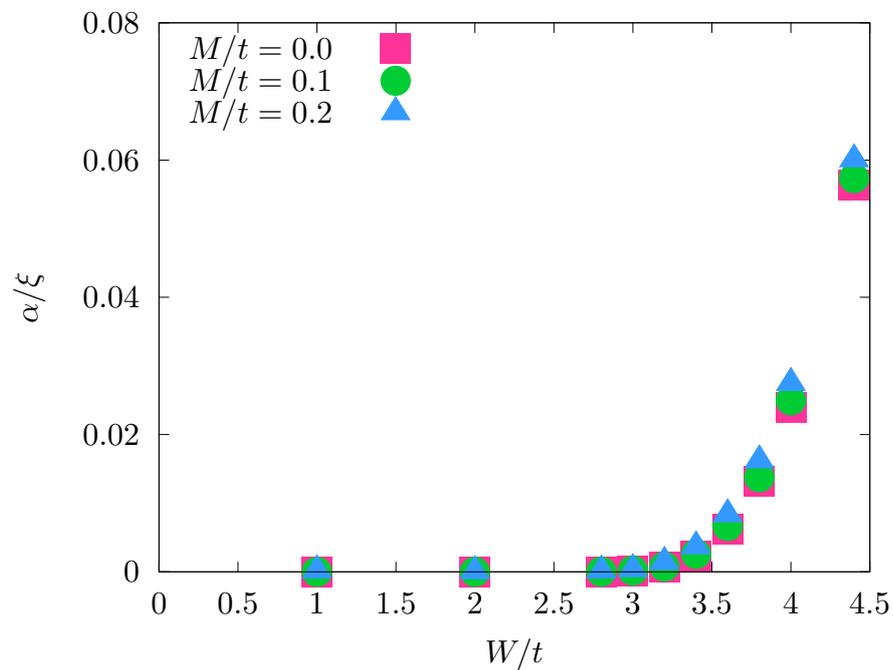


(b) アームチェア型リボン

図 5.5:  $E/t = 0.005$  における (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンでの  $\alpha/\xi$  ( $\alpha$  は  $O(1)$  の定数、 $\xi$  は局在長) のランダムポテンシャルの幅  $W$  依存性。チャンネル幅が  $N = 16$  (赤)、 $N = 24$  (橙)、 $N = 32$  (緑)、 $N = 64$  (青) の場合について調べた。 $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = 0.0$  とした。



(a) ジグザグ型リボン



(b) アームチェア型リボン

図 5.6:  $E/t = 0.005$  における (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンでの  $\alpha/\xi$  ( $\alpha$  は  $O(1)$  の定数、 $\xi$  は局在長) のランダムポテンシャルの幅  $W$  依存性。交替ポテンシャルの大きさは  $M/t = 0.0$  (赤)、 $M/t = 0.1$  (緑)、 $M/t = 0.2$  (青) であり、 $t_2/t = 0.5/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$  である。

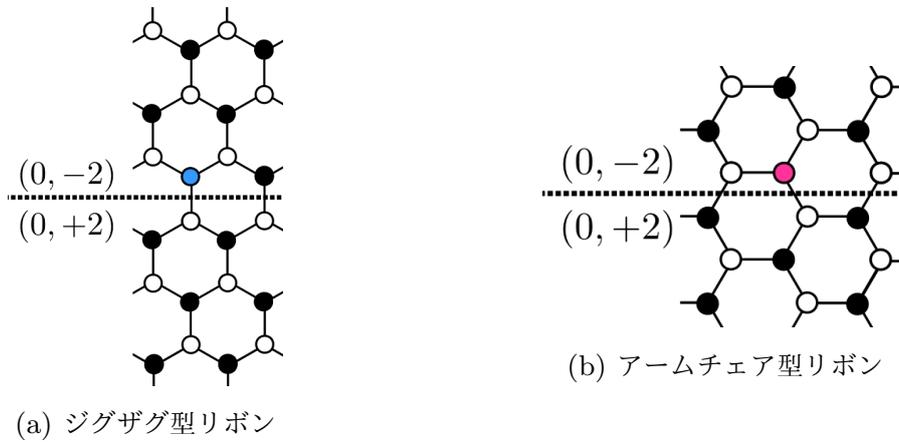


図 5.7:  $(C_s, C_v) = (0, -2)$  の相と  $(C_s, C_v) = (0, +2)$  の相を黒の破線を境界として伝導方向に沿って接合した系において不純物を配置する位置を (a) ジグザグ型リボンで青丸、(b) アームチェア型リボンで赤丸で示している。

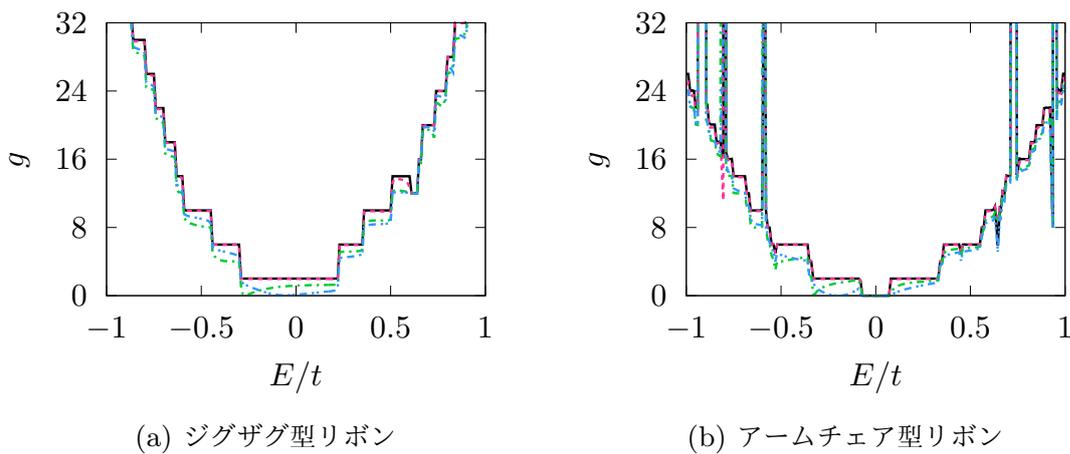


図 5.8: 接合系において図 5.7 に示す位置に不純物が存在する場合の (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$  依存性。不純物ポテンシャルの強さが  $K/t = 0.5$  (赤)、 $K/t = 5.0$  (緑)、 $K/t = 100$  (青) の場合を表し、黒の実線は不純物がない場合である。 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とし、 $M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を接合している。

ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンのいずれの場合も比較的弱い不純物ポテンシャルが存在するときは境界の伝導状態はほとんど抑制されていないが、不純物ポテンシャルが強くなるにつれてコンダクタンスは抑制される。5.1 節で示したように 1 種類のトポロジカル相からなる試料の端に発現する伝導状態は両端の離れた位置に局在していたため不純物ポテンシャルの強さに関わらず抑制されなかった。しかし、本節で示すような

2種類の異なるトポロジカル相からなる接合系では互いに反対方向に流れる上向き（下向き）スピン流が近い位置に存在するために図 5.9 のように後方散乱を起こし、コンダクタンスが抑制される。

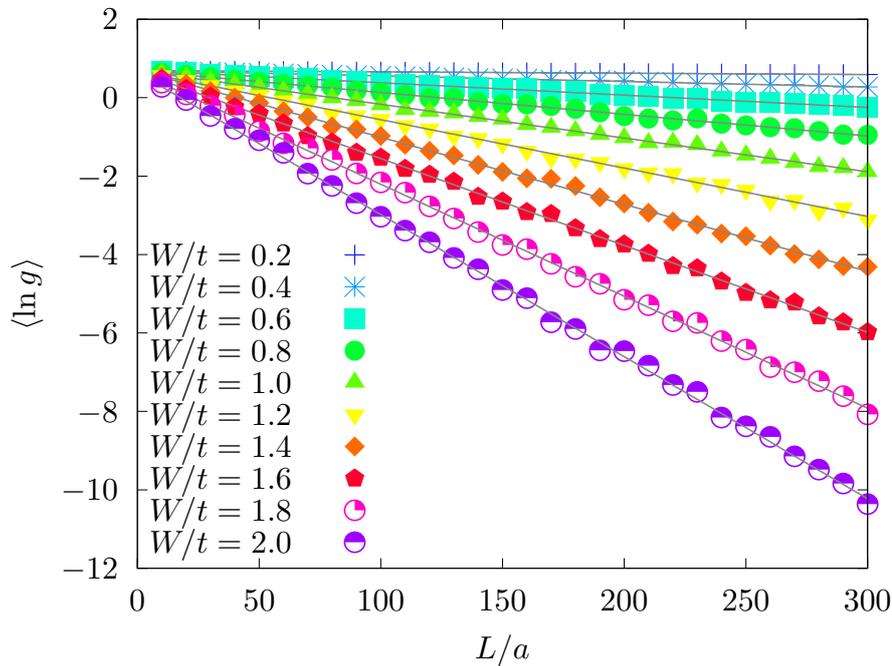


図 5.9: 接合系の境界に通常の不純物が存在するときの散乱過程の模式図。赤矢印は上向きスピン、青矢印は下向きスピンを表し、黒の矢印のようにして後方散乱が起きる。

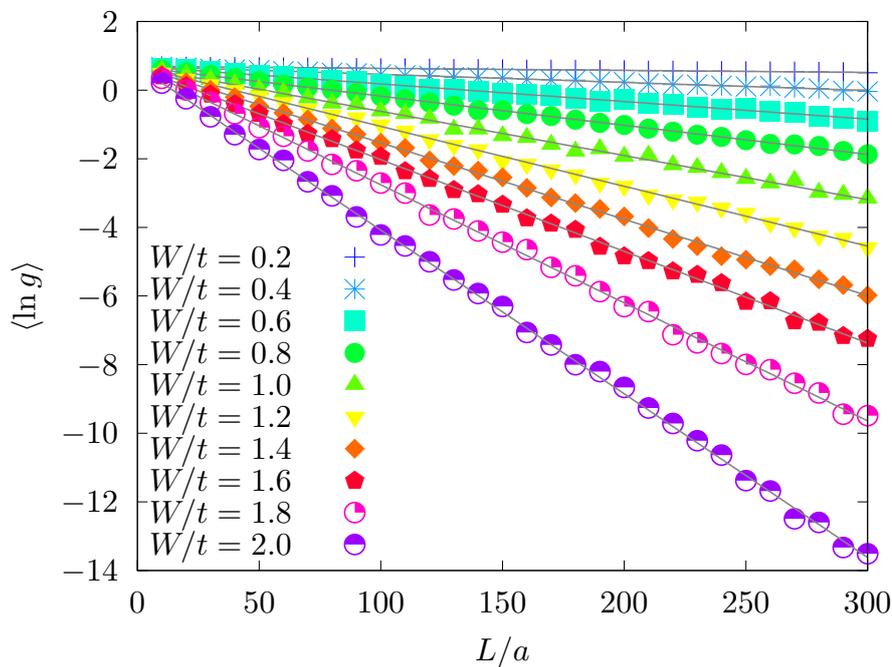
#### 5.4 接合系全体にランダムに不純物が分布している場合

異なるバレーチャーン数を持つ相の接合系について、5.2 節と同様に計算を行なう。ジグザグ型リボンでは  $E/t = 0$  で境界状態が存在しコンダクタンスが有限となっているが、アームチェア型リボンではバンドギャップが存在し、 $E/t = 0$  でコンダクタンスが 0 となっている。境界状態が存在しているときの局在について調べるため、本節ではジグザグ型リボンでは  $E/t = 0$  でのコンダクタンス、アームチェア型リボンでは  $E/t = 0.15$  でのコンダクタンスを調べることとする。各格子点のポテンシャル  $K_p$  を  $-W/2 \leq K_p \leq +W/2$  でランダムに発生させる操作を 1000 個のサンプルで行ない、その対数平均  $\langle \ln g \rangle$  の長さ  $L$  依存性を (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンのそれぞれについて図 5.10 に示す。  $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = \pm 0.4$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とした。5.2 節で示した 1 種類のトポロジカル相からなる系では、一方の端に存在した右向きに流れる状態が他方の端に存在する左向きの状態に後方散乱されるためにはバルクの状態を介する必要があるため、ある程度の大きさの  $W$  が必要であるため、局在が起こる閾値  $W_c$  の存在が示唆されていた。しかし図 5.10 によると接合系においてはランダムポテンシャルの幅  $W$  が十分小さいところからコンダクタンスが 2 より小さくなり、局在が起こっている。これは 2 種類の異なるトポロジカル相からなる接合系では互いに反対方向に流れる上向き（下向き）スピン流が図 5.9 に示すように非常に近い位置に存在しており、後方散乱が起こりやすいためであると考えられる。

$N = 16$ ,  $N = 24$ ,  $N = 64$  の場合についても同様に調べ、 $N = 32$  を含めた 4 つの場合について式 (5.3) によって局在長  $\xi$  を求める。図 5.11 に (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンについて得られた局在長  $\xi$  の逆数のランダムポテンシャルの幅  $W$  依存性を示す。ランダムポテンシャルの幅  $W$  がある程度小さい場合には局在長は幅には依存



(a) ジグザグ型リボン



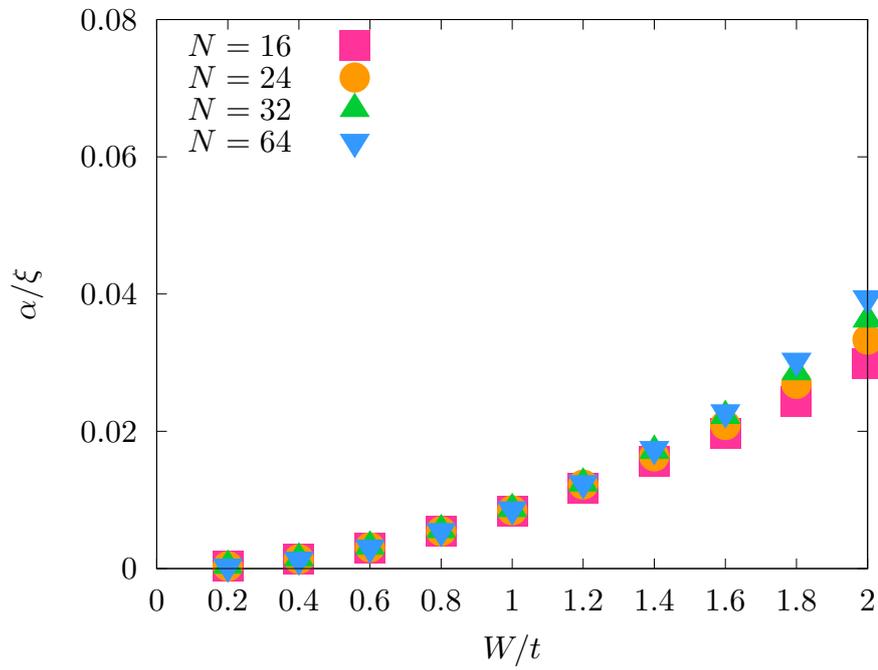
(b) アームチェア型リボン

図 5.10: (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンの各格子点に不純物ポテンシャルが  $-W/2$  から  $+W/2$  の範囲で試料全体にランダムに分布した場合のコンダクタンスの対数平均  $\langle \ln g \rangle$  の長さ  $L$  依存性。1000 個のサンプルで平均をとった。 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $M = \pm 0.4$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とし、ジグザグ型リボンでは  $E/t = 0$ , アームチェア型リボンでは  $E/t = 0.15$  とした。

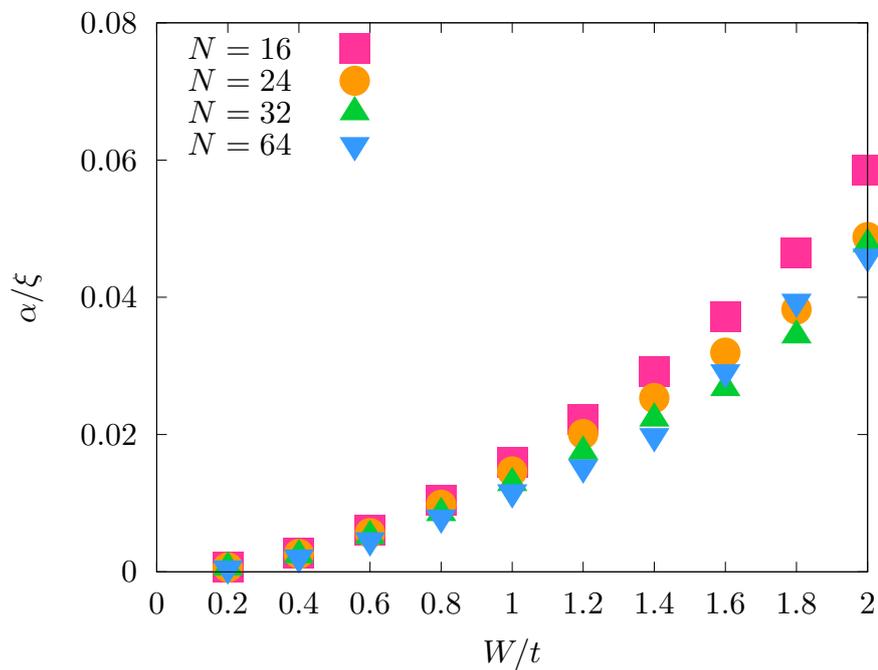
しない。しかし  $W$  が比較的大きい部分に着目すると、ジグザグ型リボンでは幅が広いほど局在しやすくなるが、アームチェア型リボンでは幅が狭いほど局在しやすくなるという違いを示す。幅が広がるほどバルクの状態への遷移が起こりやすくなるため、図 3.15 に示したようにジグザグ型リボンでは幅が広いほど局在しやすくなると考えられる。

ここで、1次元系におけるシミュレーション結果と比較する。図 5.12 に (a) 1次元系、(b) 図 5.11(a) で示したジグザグ型リボンにおける  $\alpha/\xi$  ( $\alpha$  は  $O(1)$  の定数、 $\xi$  は局在長) のランダムポテンシャルの幅  $W$  依存性を示す。ジグザグ型リボンにおいて、 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = \pm 0.4$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とし、チャンネル幅は  $N = 16$  (赤)、 $N = 24$  (橙)、 $N = 32$  (緑)、 $N = 64$  (青) である。1次元系での結果は  $\alpha/\xi \propto W^2$  であることを示し、ジグザグ型リボンにおいても同様である。このことから2種類の異なるトポロジカル相からなる接合系では互いに反対方向に流れる上向き(下向き)スピン流が図 5.9 に示すように非常に近い位置に存在しているために、1次元的な振る舞いを見せることがわかる。図 3.11, 図 3.12 に示したように接合系において波動関数は境界を中心として広がり示すため、1次元系にくらべ接合系では局在しにくい。

次に交替ポテンシャル  $M$  による効果を調べる。図 5.13 に (a) ジグザグ型リボン、(b) アームチェア型リボンについて  $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  のとき、 $M/t = \pm 0.30$ ,  $M/t = \pm 0.35$ ,  $M/t = \pm 0.40$  の相をそれぞれ伝導方向に沿って接合した系について局在長  $\xi$  の逆数のランダムポテンシャルの大きさ  $W$  依存性を示す。ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合も交替ポテンシャルの絶対値が大きくなるにつれて局在しやすくなっていることがわかる。これは図 3.17 に示したように  $M$  が大きくなるにつれて1次元性が強くなっているためである。



(a) ジグザグ型リボン



(b) アームチェア型リボン

図 5.11: (a) ジグザグ型リボンでは  $E/t = 0$ , (b) アームチェア型リボンでは  $E/t = 0.15$  としたときの  $\alpha/\xi$  ( $\alpha$  は  $O(1)$  の定数、 $\xi$  は局在長) のランダムポテンシャルの幅  $W$  依存性。  $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = \pm 0.4$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とし、チャンネル幅は  $N = 16$  (赤)、 $N = 24$  (橙)、 $N = 32$  (緑)、 $N = 64$  (青) である。

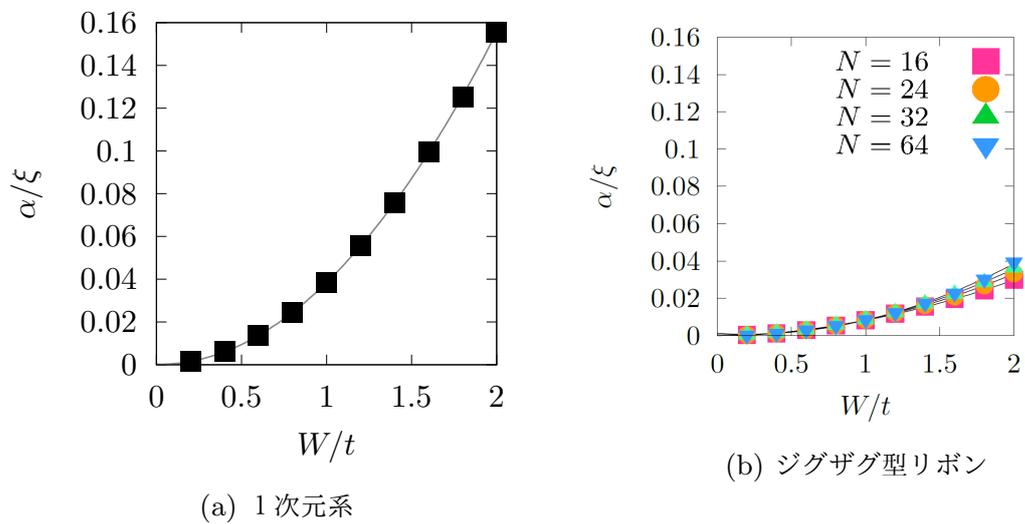
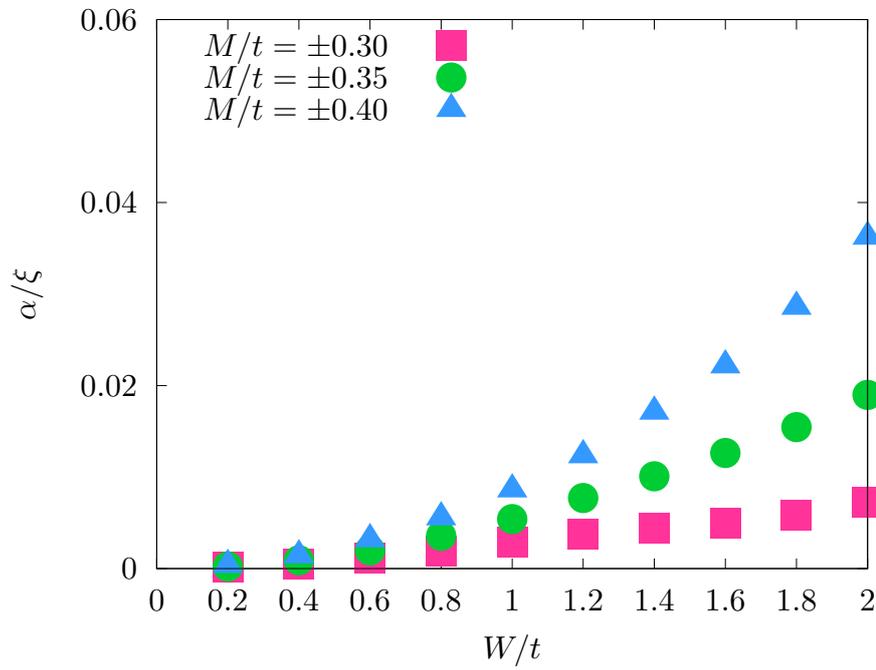
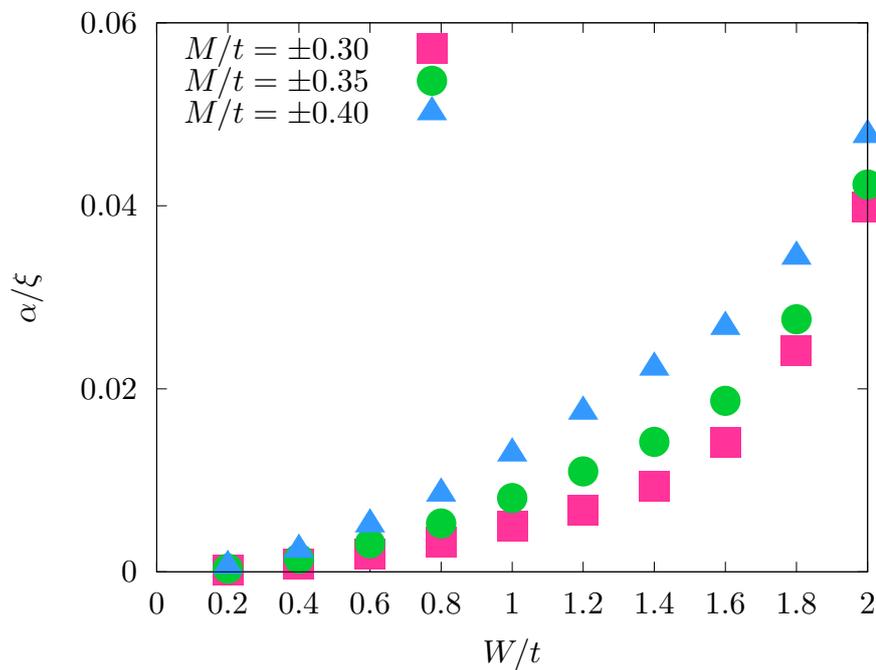


図 5.12: (a) 1次元系、(b) 図 5.11(a) で示したジグザグ型リボンにおける  $\alpha/\xi$  ( $\alpha$  は  $O(1)$  の定数、 $\xi$  は局在長) のランダムポテンシャルの幅  $W$  依存性。ジグザグ型リボンにおいて  $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $M/t = \pm 0.4$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とし、チャンネル幅は  $N = 16$  (赤)、 $N = 24$  (橙)、 $N = 32$  (緑)、 $N = 64$  (青) である。



(a) ジグザグ型リボン



(b) アームチェア型リボン

図 5.13: (a) ジグザグ型リボンでは  $E/t = 0$ , (b) アームチェア型リボンでは  $E/t = 0.15$  としたときの  $\alpha/\xi$  ( $\alpha$  は  $O(1)$  の定数、 $\xi$  は局在長) のランダムポテンシャルの幅  $W$  依存性。交替ポテンシャルを  $M/t = \pm 0.30$  (赤)、 $M/t = \pm 0.35$  (緑)、 $M/t = \pm 0.40$  (青) とし、 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  としている。



## 第 6 章

# 結果 2 磁性不純物による散乱

本章では、Kane-Mele 模型に磁性不純物が存在する場合の輸送現象に関して本研究で得られた結果を紹介する。ここで磁性不純物による散乱として、伝導電子のスピンを反転させる効果を取り入れる。そのハミルトニアン  $\mathcal{H}_{\text{imp}}^{\text{magnetic}}$  は以下のように与えられる。

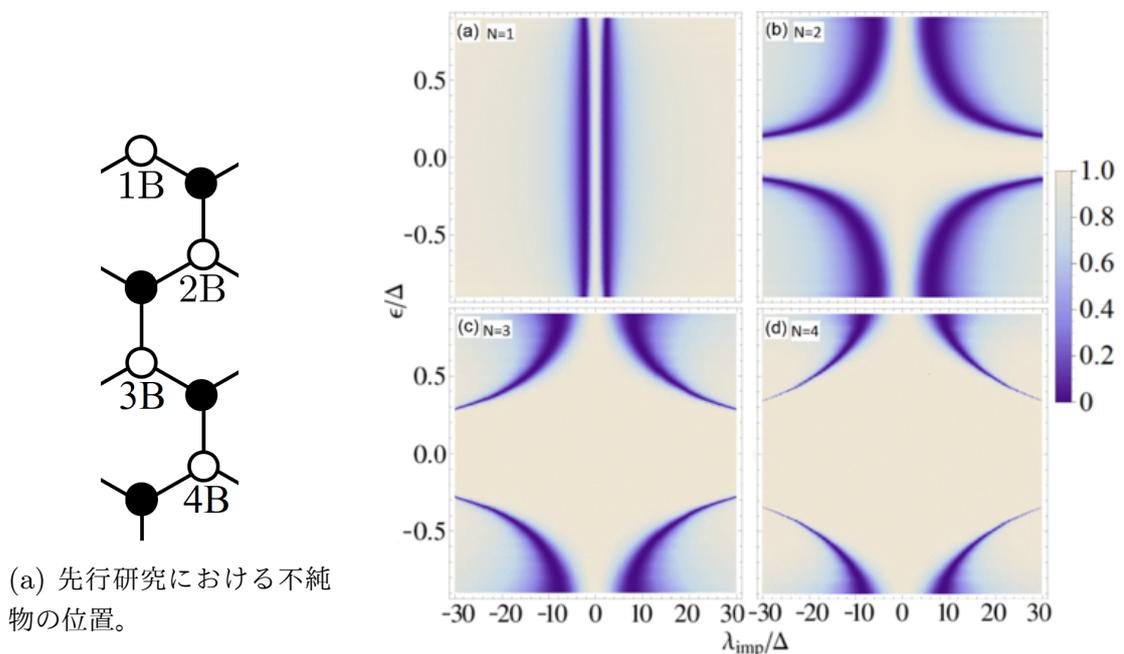
$$\mathcal{H}_{\text{imp}}^{\text{magnetic}} = \sum_{p,s} K_p e^{is\phi_p} C_{p,s}^\dagger C_{p,-s} \quad (6.1)$$

ここで、 $p$  は不純物が存在する位置、 $K_p$  は位置  $p$  における不純物ポテンシャルの強さである。位相  $\phi_p$  は不純物スピンの面内でどの方向を向いているかを表すパラメータであり、 $\phi_p = 0$  は不純物スピンの  $x$ -方向、 $\phi_p = \pi/2$  は  $y$ -方向を向いている場合に対応する。

ヘリカルエッジ状態ではそれぞれの端に反対方向に流れる互いに逆向きのスピンの局在しており、スピンを反転させる磁性不純物によって後方散乱が起きる。伝導状態近傍に磁性不純物が存在する場合について調べることにより 5 章で述べた通常の不純物とは異なる現象が期待されるため、本章では磁性不純物による散乱の効果について調べていくこととする。6.1 節では本研究に関連する先行研究について紹介する。6.2 節では端近傍に 1 個の不純物が存在する場合のシミュレーション結果について述べ、6.3 節では 1 次元系における解析とシミュレーション結果との比較、6.4 節では T-matrix を用いた解析とシミュレーション結果との比較を行なう。6.5 節では異符号のバレーチェーン数を持つ相を接合した系の境界付近に不純物がある場合について述べる。本研究では 1 個の磁性不純物が存在する場合を考察するため  $K_p \equiv K$  とする。この場合には、Kane-Mele 模型がスピンの  $z$  軸回りの回転対称性を持っているため、以下に示す結果は位相  $\phi_p$  の値には依存しない。なお、本研究の考察する磁性不純物は古典スピンであるとする。これは不純物スピンの大きさが十分に大きい場合に対応する。そのため、不純物スピンの量子性に起因する近藤効果は考慮されない。

## 6.1 先行研究

はじめに本研究に関連する先行研究について紹介する [40]。先行研究では、磁性不純物が B 副格子に存在する場合のジグザグ型リボンにおける輸送特性についてシミュレーションを行ない、結果を解析している。最初に磁性不純物が図 6.1(a) のそれぞれの位置にあるときの透過率  $T$  の数値シミュレーションの結果を図 6.1(b) に示す。ここで、 $\epsilon$  は電子のエネルギー、 $\lambda_{\text{imp}}$  は不純物ポテンシャルの強さである。磁性不純物が 1B ( $N = 1$ ) に



(a) 先行研究における不純物の位置。

(b) 透過率  $T$  のエネルギー  $\epsilon$ 、不純物ポテンシャルの強さ  $\lambda_{\text{imp}}$  依存性。

図 6.1: (a) のそれぞれの位置に不純物が 1 個置かれているときの (b) 透過率  $T$  のエネルギー  $\epsilon$ 、不純物ポテンシャルの強さ  $\lambda_{\text{imp}}$  依存性 [40]。いま  $t_2/t = 0.06$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 16$  である。

ある場合は透過率はほとんどエネルギーによらず一定であるが、2B ( $N = 2$ ), 3B ( $N = 3$ ), 4B ( $N = 4$ ) にある場合はエネルギーの絶対値が増えるにつれて透過率はいったん減少し、その後元の大きさまで戻るといった振る舞いを見せることがわかる。また、不純物の位置にかかわらず不純物ポテンシャルの絶対値が増えるにつれて透過率がいったん減少し、その後元の大きさまで戻るといった振る舞いを見せている。この振る舞いの考察を行なうため、先行研究ではヘリカルエッジ状態が磁性不純物だけでなく 2 準位系と相互作用するというモデルを用いた解析を行なっている。この解析では、ヘリカルエッジ状態と磁性不純物と

の相互作用  $V_B$ 、ヘリカルエッジ状態と2準位系との相互作用  $V_C$ 、および2準位系のエネルギー間隔  $\epsilon_0$  がフィッティングパラメータとなっている。これらのパラメータを用いて2Bの位置に磁性不純物がある場合のシミュレーション結果を解析したものが図6.2である。このように、 $\lambda_{\text{imp}}/\Delta \gg 1$  の場合、この解析方法はシミュレーション結果を再現でき

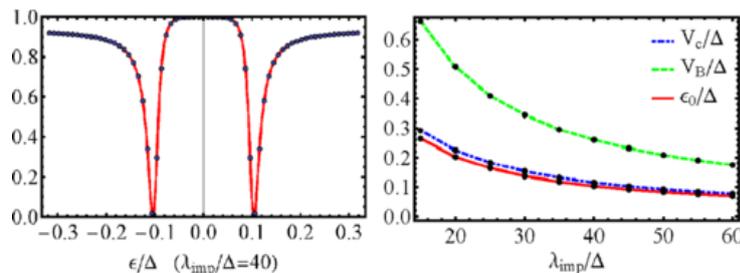


図6.2: 図6.1(a)の2Bの位置に不純物があるときの透過率のエネルギー  $\epsilon/\Delta$  依存性とそのときに用いたフィッティングパラメータ  $V_B/\Delta$ ,  $V_C/\Delta$ ,  $\epsilon_0/\Delta$  の値を示した図 [40]。  $t_2/t = 0.06$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 16$  である。左図は不純物ポテンシャルの強さが  $\lambda_{\text{imp}}/\Delta = 40$  のときであり、 $\Delta$  はバルクのバンドギャップである。

ている。しかしながら、ジグザグ端に磁性不純物が存在する場合の透過率がほとんどエネルギーに依存しない振る舞いはこの解析方法では再現できていない。

本研究では、B副格子だけでなくA副格子に磁性不純物が存在する場合を考察する。また、先行研究とは異なる解析を行なう。

## 6.2 端近傍に1個の不純物が存在する場合のシミュレーション結果

まずジグザグ型リボンの端近傍に磁性不純物を配置したときのシミュレーション結果について述べる。図6.3で示す位置に磁性不純物が存在するときのコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$ 、不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性を図6.4に示す。  $t_2/t = 0.06$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 16$  とした。両端に存在する伝導状態はある程度波動関数の広がりを持っているが、系が十分な幅を持つとき一方の端の伝導状態の波動関数と他方の端の伝導状態の波動関数との重なりは非常に小さい。そのため上端の伝導状態と下端の伝導状態とを独立に考えることが可能である。本章では上端に不純物が存在する場合について調べるため、以下では上端における透過率を  $T = g - 1$  と定義する。(b)1B, (d)2Bに磁性不純物が存在するときの結果はそれぞれ  $T = g - 1$  と読みかえることにより先行研究である図6.1(b)における1B ( $N = 1$ ), 2B ( $N = 2$ )の位置に不純物が存在するときの結果と一致していることが確認できる。さらに(a)1A, (c)2Aに磁性不純物が存在する場合については2Bに磁性

不純物が存在する場合と同様、エネルギーの絶対値が増えるにつれて透過率がいったん減少し、その後元の大きさに戻るといった振る舞いを見せる。また、不純物ポテンシャルの強さの絶対値が増えるにつれて透過率がいったん減少し、その後元の大きさに戻るといった振る舞いを見せることがわかる。

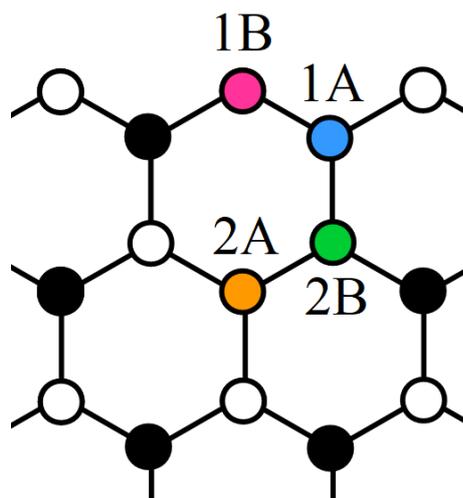


図 6.3: ジグザグ型リボンにおける磁性不純物の位置。

次にアームチェア型リボンの端近傍に磁性不純物を配置したときのシミュレーション結果について述べる。図 6.5 に示す位置に磁性不純物が存在するときのコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$ , 不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性を図 6.6 に示す。 $t_2/t = 0.25$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 16$  とした。アームチェア型リボンの (a)1B の位置に磁性不純物が存在する場合はジグザグ型リボンの 1B の位置に磁性不純物が存在する場合と同様、透過率はエネルギーによらずほとんど一定の値をとる。また不純物ポテンシャルの強さの絶対値が増えるにつれて透過率がいったん減少し、その後元の大きさに戻るといった振る舞いを示す。さらに (b)2A の位置に磁性不純物が存在する場合も不純物ポテンシャルの強さの絶対値が増えるにつれて透過率がいったん減少し、その後元の大きさに戻るといった振る舞いを示すが、ジグザグ型リボンとは異なりエネルギーの絶対値が増えても透過率は比較的ゆるやかに変化する。

透過率  $T$  の不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性をスピン軌道相互作用の大きさ  $t_2$  について比較した結果を示す。図 6.7 のジグザグ型リボンでは  $E/\Delta = 0.7$  での  $t_2/t = 0.06$  の場合と  $t_2/t = 0.12$  の場合について、図 6.8 のアームチェア型リボンでは  $E/t = 0.7$  での  $t_2/t = 0.25$  の場合と  $t_2/t = 0.30$  の場合についての比較を行なった。いま  $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  である。スピン軌道相互作用の大きさを変えることにより透過率の振る舞いは影響を受けるが、次のような整理を行なうことによりそれぞれの結果がよく一致することが分かった。 $\psi_p$  を位置  $p$  におけるヘリカルエッジ状態の波動関数として、ジグザグ型リボ

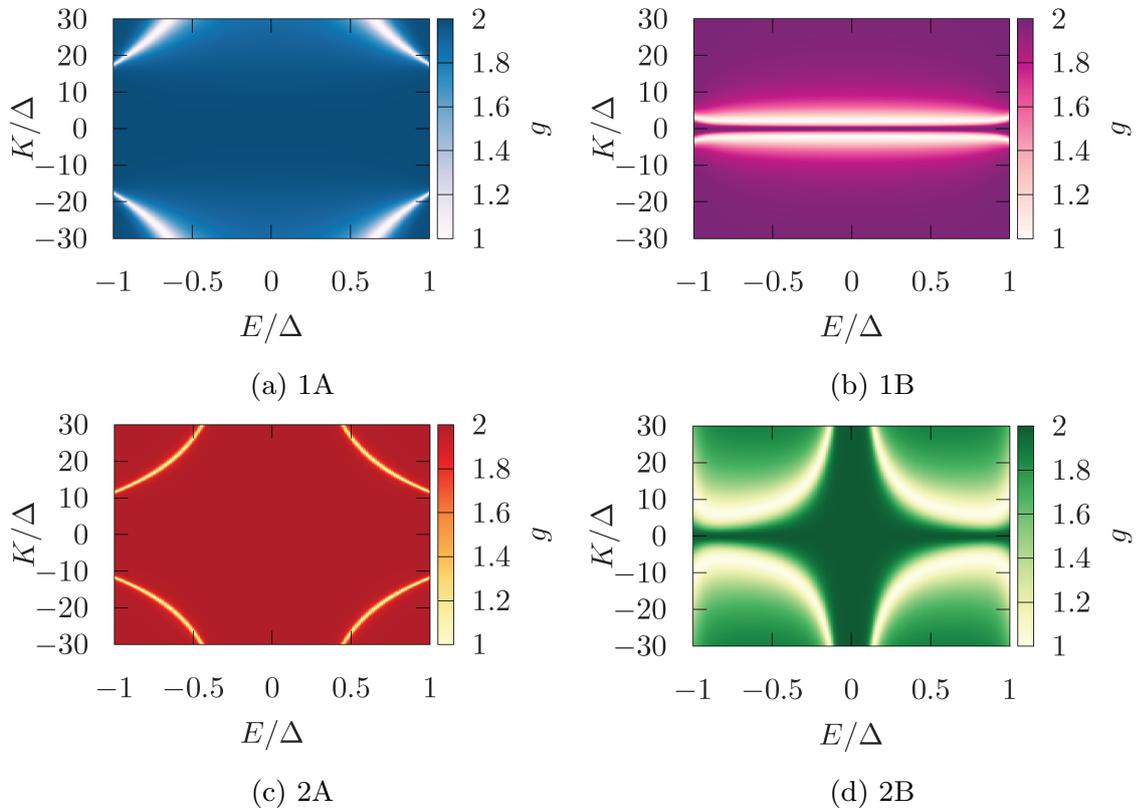


図 6.4: 図 6.3 の (a)1A, (b)1B, (c)2A, (d)2B の位置に磁性不純物が存在する場合のコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$ , 不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性。  $t_2/t = 0.06$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 16$  とした。ここで  $\Delta$  はバルクのバンドギャップを表す。[自著論文 (J. Phys. Soc. Jpn., 印刷中) より転載。]

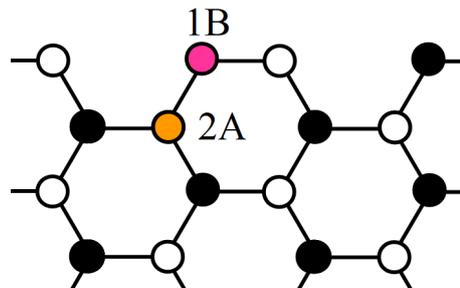


図 6.5: アームチェア型リボンにおける磁性不純物の位置。

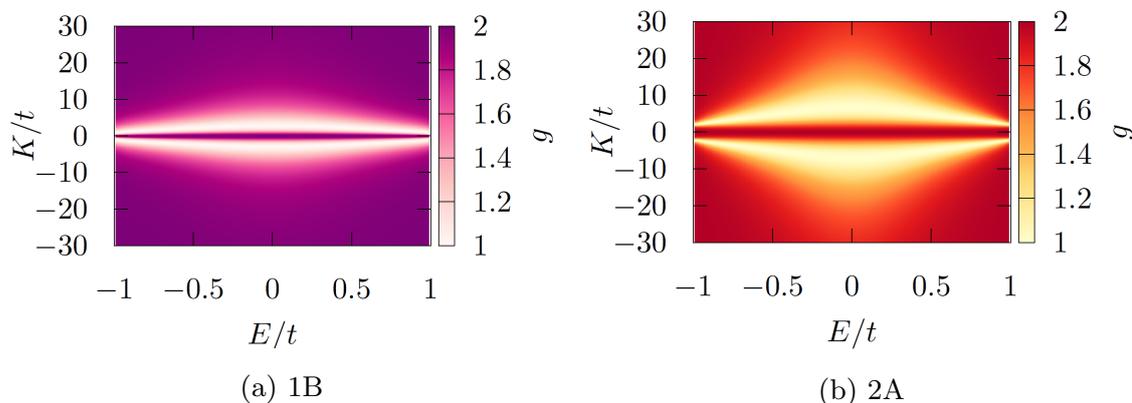


図 6.6: 図 6.5 の (a)1B, (b)2A の位置に磁性不純物が存在する場合のコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$ , 不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性。  $t_2/t = 0.25$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 16$  とした。

ンでは  $K|\psi_p|^2/\Delta$  で整理し、アームチェア型リボンでは  $K|\psi_p|^2/t$  で整理するのである。ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合についてもスピン軌道相互作用の大きさによる効果は波動関数の大きさの違いによって影響を受けており、さらに図 3.6 に示したようにジグザグ型リボンでは線形分散が  $\Delta$  に比例するが、アームチェア型リボンでは  $\Delta$  に依存せず  $t$  に比例する。これらのことがジグザグ型リボンでは  $K|\psi_p|^2/\Delta$ , アームチェア型リボンでは  $K|\psi_p|^2/t$  で整理される理由である。

これらのシミュレーション結果について、以下で解析を行なっていく。

### 6.3 1次元模型における解析

上向きスピンと下向きスピンが互いに反対方向に流れている 1次元連続体模型に強さ  $V$  でスピンを反転させる磁性不純物が 1つ存在する系を考える。このときの透過率  $T$  は

$$T = \frac{1}{\cosh^2 \frac{|V|}{v_F}} \quad (6.2)$$

によって与えられる (付録 C 参照)。ここで、 $v_F$  はフェルミ速度である。この計算によって得られた透過率  $T$  とジグザグ型リボンにおいて図 6.3 の 1B の位置に不純物が存在する場合の  $E/\Delta = 0.0$  におけるコンダクタンスのシミュレーション結果とを比較した (図 6.9)。ここで、 $V = Ka$  とした。1次元模型は  $K$  が比較的小さい透過率が減少する領域をよく再現しているが、その後元の大きさに戻る領域を再現できていない。次に、上向きスピンと下向きスピンが互いに反対方向に流れている 1次元格子模型に磁性不純物が存在する系を考える。このときシミュレーション結果を再現するような散乱過程のみを考えるためには相互作用が長距離まで働くような不純物を入れる必要がある。そのため不純物が

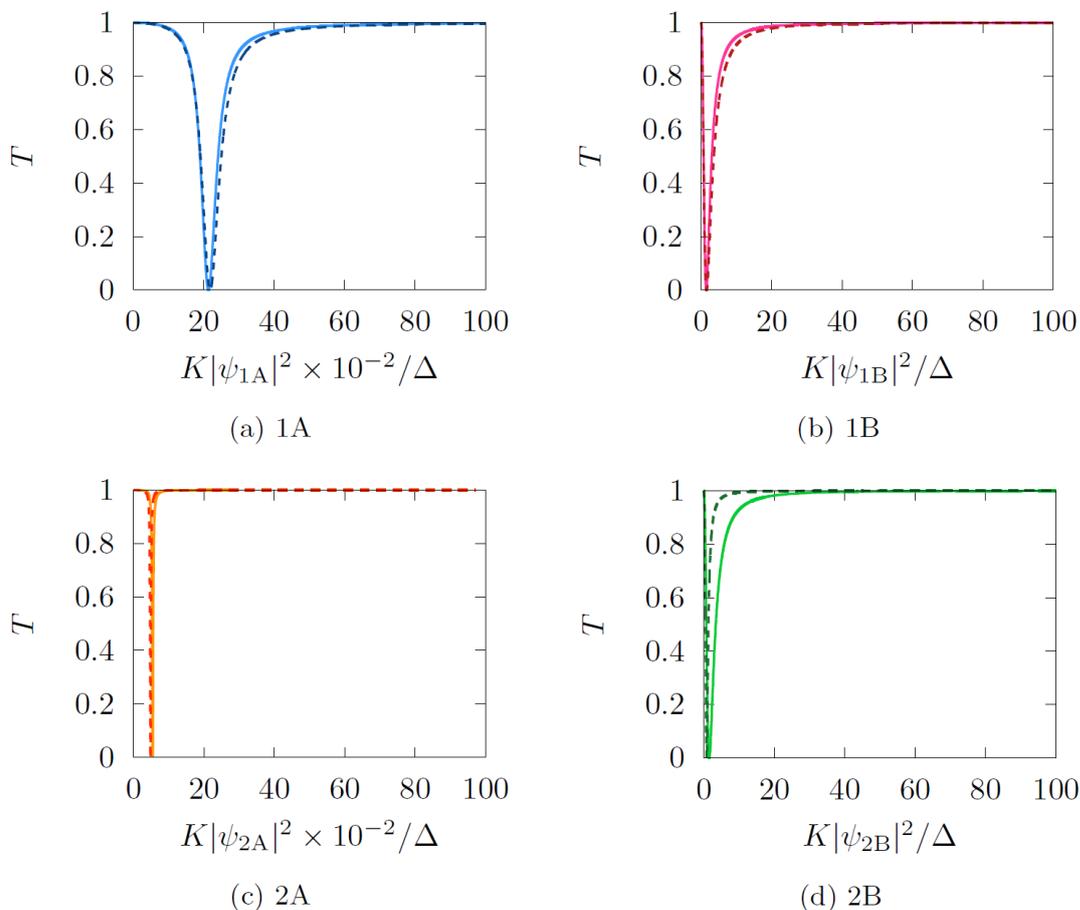


図 6.7: 図 6.3 の (a)1A, (b)1B, (c)2A, (d)2B の位置に磁性不純物が存在する場合の  $E/\Delta = 0.7$  での透過率  $T$  の不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性。実線は  $t_2/t = 0.06$ , 点線は  $t_2/t = 0.12$  の場合を表し、 $\psi_p$  は位置  $p$  におけるヘリカルエッジ状態の波動関数である。 $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  とし、 $\Delta$  はバルクのバンドギャップを表す。

テンシャルの強さを  $K$ , 試料の長さを  $L$  として、 $j$  ( $j = 1, \dots, L$ ) 番目の格子における下向きスピンを反転させる不純物  $V_{j+}$ , 上向きスピンを反転させる不純物  $V_{j-}$  を式 (6.3) のように定義し、4 章と同様の手法を用いてスピンの向きを保つような透過係数を求めた (付録 D 参照)。

$$V_{j\pm} = \pm iK \exp \left[ -\sigma \left( j - \frac{L}{2} \right)^2 \right] / \sqrt{\pi/\sigma} \quad (6.3)$$

1次元連続体模型における解析 (実線) と 1次元格子模型に相互作用が長距離に働くような磁性不純物が存在するときの解析 (1点鎖線) による透過率  $T$  の不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性を比較すると図 6.10 のようになり、ほぼ一致していることがわかる。なお  $\sigma = 0.1$  とした。

以上の結果は、 $K/\Delta \lesssim 1$  の領域の振る舞いはヘリカルエッジ状態が直接磁性不純物に

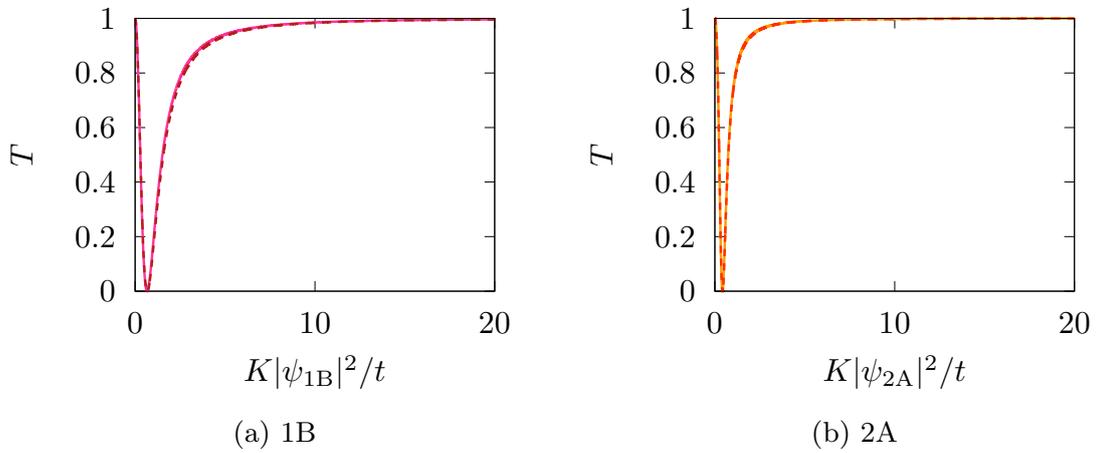


図 6.8: 図 6.5 の (a)1B, (b)2A の位置に磁性不純物が存在する場合の  $E/t = 0.7$  での透過率  $T$  の不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性。実線は  $t_2/t = 0.25$ , 点線は  $t_2/t = 0.30$  の場合を表し、 $\psi_p$  は位置  $p$  におけるヘリカルエッジ状態の波動関数である。 $M/t = 0.0$ ,  $N = 32$  とした。

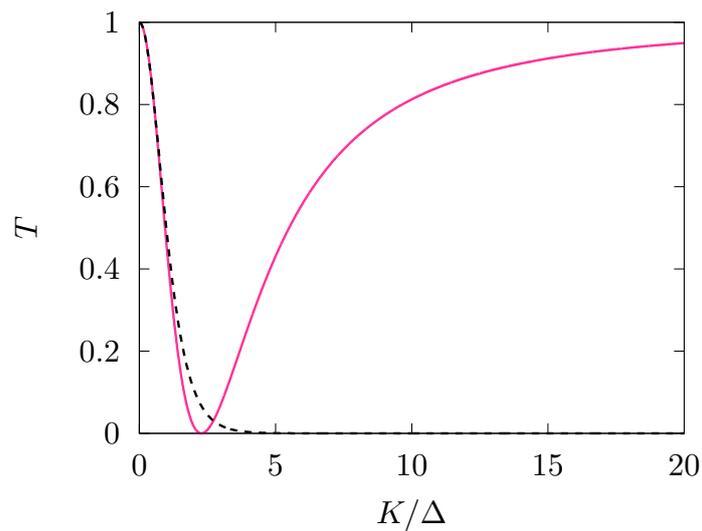


図 6.9: 透過率  $T$  の不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性。実線はジグザグ型リボンにおいて図 6.3 の 1B の位置に磁性不純物が存在するときの  $E/\Delta = 0.0$  でのシミュレーションの結果、破線は 1 次元連続体模型における解析を表す。

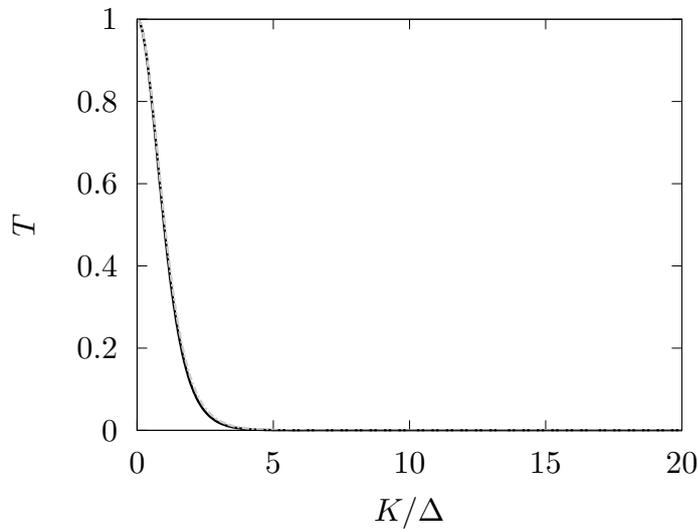


図 6.10: 透過率  $T$  の不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性の 1 次元連続体模型における解析 (実線) 1 次元格子模型に相互作用が長距離に働くような磁性不純物を入れた場合の解析 (1 点鎖線) との比較。

よって散乱されるという見方が正しいことを意味している。一方、コンダクタンスが  $K$  の関数として増加するという振る舞いはこのような単純な模型では説明できない。

## 6.4 有効ポテンシャルを用いた解析

1 次元模型による解析では、連続体模型と格子模型の両方ともコンダクタンスの  $K/\Delta \lesssim 1$  の振る舞いは再現できるが、 $K/\Delta \gtrsim 1$  の振る舞いは再現できない。これは、ヘリカルエッジ状態だけでなく、価電子帯や伝導帯のバルクに広がった状態の効果を取り入れねばならないことを示唆している。そのため、以下の手順でこの効果を取り入れる。1 次元連続体模型における解析で求めた透過率  $T$  における不純物ポテンシャル  $V$  を有効ポテンシャル  $V_{\text{eff}}$  に置き換える。また不純物の位置による効果を位置  $p$  におけるヘリカルエッジ状態の波動関数  $\psi_p$  によって取り入れる。これにより式 (6.2) は次のように書き換えられる。

$$T = \frac{1}{\cosh^2 \frac{|V_{\text{eff}}| |\psi_p|^2}{v_F}} \quad (6.4)$$

付録 E で示されているように、有効ポテンシャル  $V_{\text{eff}}$  は T-matrix  $\tilde{T}$  を用いて計算され、以下のように与えられる。

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}/a &= \langle 0, p, s | \tilde{T} | 0, p, -s \rangle \\ &= \frac{K e^{is\phi_p}}{1 - K^2 \langle 0, p, s | G_0 | 0, p, s \rangle \langle 0, p, -s | G_0 | 0, p, -s \rangle} \end{aligned} \quad (6.5)$$

ここで、 $|0, p, s\rangle$  ( $p = 1A, 1B, 2A, 2B, \dots$ ) は不純物スピンの存在する位置に局在したスピン  $s$  の状態である。また、バルク状態のグリーン関数は以下で与えられる。

$$\langle 0, p, s | G_0 | 0, p, s \rangle = \frac{1}{N_L} \sum_k \sum_{l=1}^{2N} \frac{|u_{sl}^p(k)|^2}{E - E_{sl}(k)} \theta(|E_{sl}(k)| - \Delta) \quad (6.6)$$

上式において、 $N_L$  は単位格子の数、 $E_{sl}(k)$  は Kane-Mele 模型からなるリボンの波数  $k$ 、スピン  $s$  で指定される  $l$  番目のエネルギー固有値、 $u_{sl}^p(k)$  は対応する固有ベクトルの  $p$  番目の成分である。 $\theta(|E_{sl}(k)| - \Delta)$  はグリーン関数がバルクに広がった状態で構成されることを保証している。

この解析結果とシミュレーション結果を比較する。ジグザグ型リボンでは  $E/\Delta = 0.7$  のときの透過率  $T$  の不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性を図 6.11 に、アームチェア型リボンでは  $E/t = 0.7$  のときの透過率  $T$  の不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性を図 6.12 に示す。いずれの場合も  $M/t = 0.0$ ,  $N = 16$  であり、ジグザグ型リボンでは  $t_2/t = 0.06$ 、アームチェア型リボンでは  $t_2/t = 0.25$  とした。シミュレーションを実線、有効ポテンシャルを用いた解析結果は黒の 1 点鎖線で表している。ここで、波動関数の絶対値の二乗は表 6.1 の値が用いられている。まず、どの位置に不純物があっても  $K/\Delta \lesssim 1$  の領域は本解析でよく再現できている。また、透過率  $T$  が  $K/\Delta$  の関数として最初は減少して  $T = 0$  となるが、さらに  $K/\Delta$  を増加させると  $T$  が増加するという非単調な振る舞いは、ジグザグ端に不純物が存在する場合 (1B サイト) を除けば定性的に再現できる。さらに、ジグザグ型リボンで 1A, 2A に磁性不純物が存在する場合、およびアームチェア型リボンで 2A に磁性不純物が存在する場合には解析結果とシミュレーションの結果は定量的にも非常に良い一致を示している。

本研究で用いた解析においては、バルクに広がった状態はヘリカルエッジ状態における有効ポテンシャルを与える媒質として取り扱っている。このような取り扱いは、磁性不純物が存在する場合であっても、ヘリカルエッジ状態とバルクに広がった状態がよく分離できている場合に正当化される。このような状況は、不純物散乱が比較的弱い場合、もしくはヘリカルエッジ状態の存在確率が非常に小さい場合に達成される。これが、どの位置に不純物があっても  $K/\Delta \lesssim 1$  の領域は本解析で再現でき、また、ジグザグ型リボンで 1A, 2A に不純物が存在する場合、およびアームチェア型リボンで 2A に不純物が存在する場合には本解析が定量的に正しい結果を与える理由である。このように、本解析はいわば弱

結合領域で正しい解析となっている。一方、先行研究で主張されているように、先行研究で用いられた2準位系のモデルは  $K/\Delta \gg 1$  という強結合領域で正当化される解析である。この意味でこれら2つの解析は互いに相補的であると言えよう。

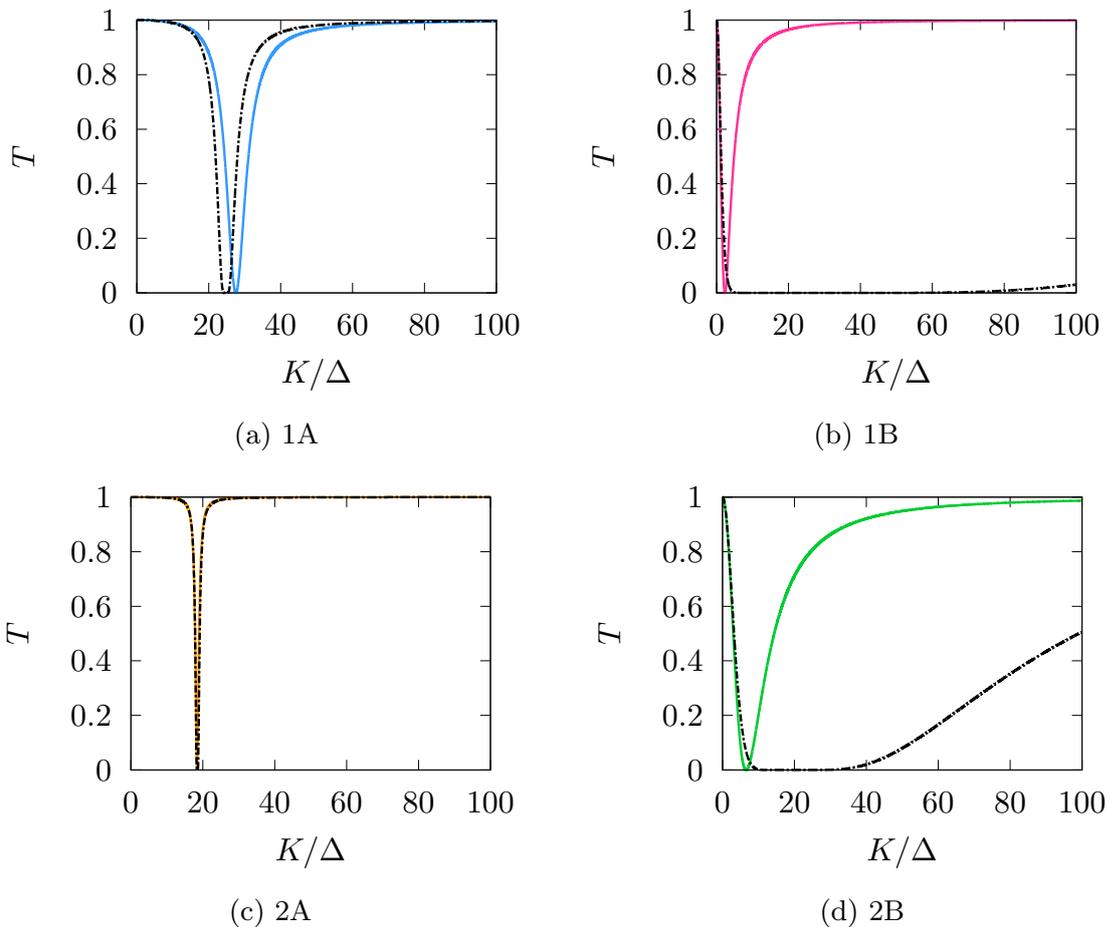


図 6.11: ジグザグ型リボンにおいて、図 6.3 の (a)1A, (b)1B, (c)2A, (d)2B の位置に磁性不純物が存在する場合の  $E/\Delta = 0.7$  での透過率  $T$  の不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性のシミュレーションの結果（実線）と有効ポテンシャルによる解析結果（1点鎖線）との比較。 $t_2/t = 0.06$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 16$  とし、 $\Delta$  はバルクのバンドギャップである。[自著論文 (J. Phys. Soc. Jpn., 印刷中) より転載。]

## 6.5 接合系の境界付近に1個の不純物が存在する場合のシミュレーション結果

異なるバレーチェーン数を持つ相を接合した系で境界付近に現れる伝導状態に対する磁性不純物散乱の効果について述べる。図 6.13 に  $(C_s, C_v) = (0, -2)$  の系と

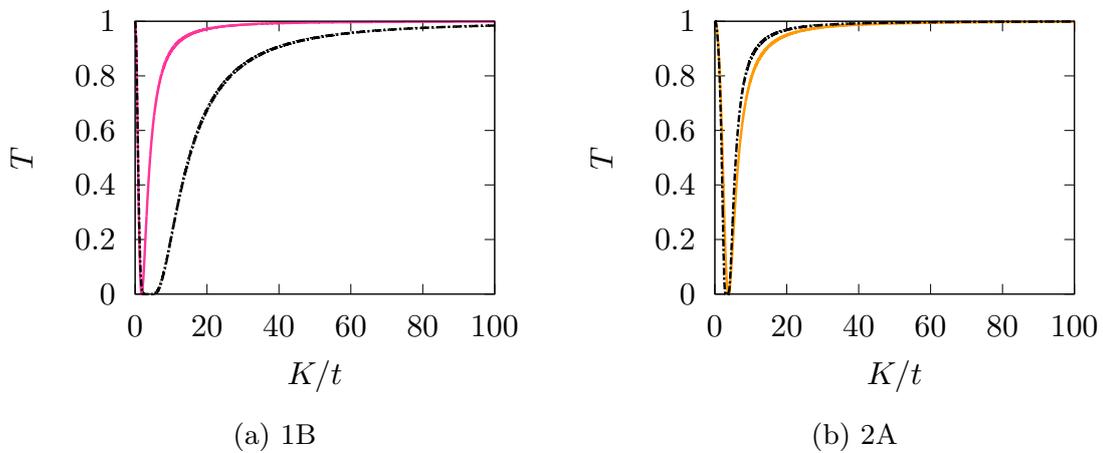


図 6.12: アームチェア型リボンにおいて、図 6.5 の (a)1B, (b)2A の位置に磁性不純物が存在する場合の透過率  $T$  の不純物ポテンシャルの強さ  $K$  依存性シミュレーション結果（実線）と有効ポテンシャルによる解析結果（一点鎖線）との比較。 $t_2/t = 0.25$ ,  $M/t = 0.0$ ,  $N = 16$  とした。

	1A	0.008
ジグザグ型リボン	1B	0.620
	2A	0.003
	2B	0.237
アームチェア型リボン	1B	0.364
	2A	0.112

表 6.1:  $t_2/t = 0.06$  のジグザグ型リボン、 $t_2/t = 0.25$  のアームチェア型リボンのそれぞれの位置におけるヘリカルエッジ状態の波動関数の絶対値の二乗の大きさを表す。ここで  $M/t = 0.0$ ,  $N = 16$  である。

$(C_s, C_v) = (0, +2)$  の系を黒の破線を境界として伝導方向に沿って接合し、(a) ジグザグ型リボンで青丸の位置、(b) アームチェア型リボンで赤丸の位置に不純物が存在する場合を考える。図 6.14 にそのような不純物が存在する場合の (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$  依存性を示す。黒の実線は不純物がない場合を表し、それ以外はそれぞれ不純物ポテンシャルの強さが  $K/t = 0.5$  (赤)、 $K/t = 5.0$  (緑)、 $K/t = 100$  (青) の場合を表している。 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = N/2$  とし、 $M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を接合した。境界状態のみがコンダクタンスに寄与しているエネルギーの範囲（不純物がない黒の実線において  $g = 2$  の範囲）では、不純物の影響を受けてコンダクタンスが抑制されていることがわ

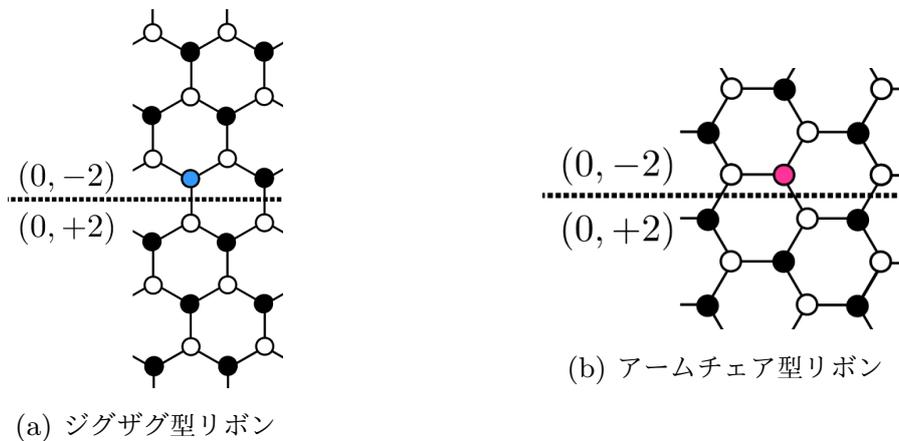


図 6.13:  $(C_s, C_v) = (0, -2)$  の相と  $(C_s, C_v) = (0, +2)$  の相を黒の破線を境界として伝導方向に沿って接合した系において不純物を配置する位置を (a) ジグザグ型リボンで青丸、(b) アームチェア型リボンで赤丸で示している。

かる。

図 5.8 に示したように接合系の境界付近に通常の不純物が存在する場合は、不純物がないときに  $g = 2$  をとる範囲のコンダクタンスは不純物の影響を受けて抑制された。これは図 5.9 に模式的に表したように右方向、左方向に流れる上向き（下向き）スピンの流が近い位置に存在しており、通常の不純物によって後方散乱が起こり、コンダクタンスが抑制されるためであった。今回の接合系の境界に磁性不純物が場合は右方向に流れる上向き（下向き）スピン流と左方向に流れる下向き（上向き）スピン流との間で図 6.15 のように後方散乱が起こることでコンダクタンスが抑制される。通常の不純物の場合と磁性不純物の場合での散乱過程はどちらもほぼ同じ場所で起きるものである。そのためコンダクタンスが抑制される振る舞いは図 5.8、図 6.14 とでよく似た結果になったと考えられる。

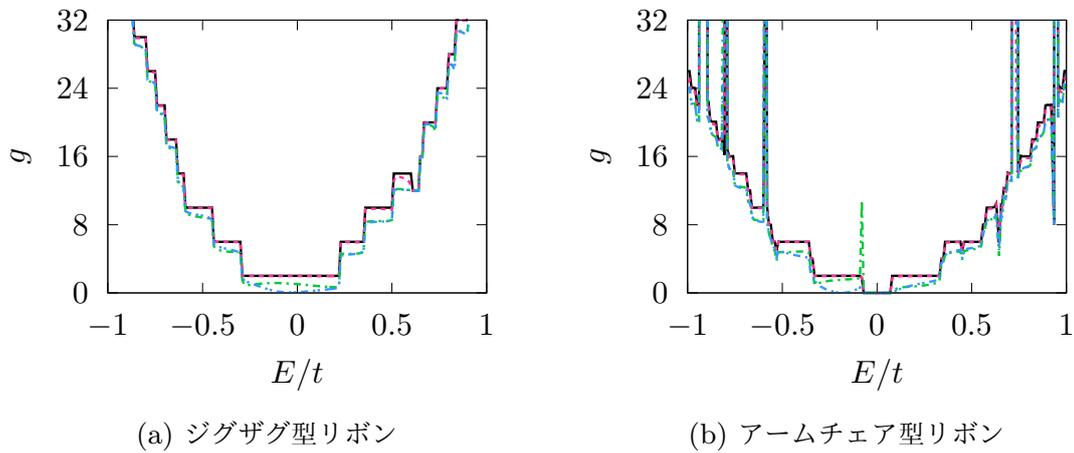


図 6.14: 接合系において図 6.13 に示す不純物が存在する場合の (a) ジグザグ型リボンと (b) アームチェア型リボンのコンダクタンス  $g$  のエネルギー  $E$  依存性。不純物ポテンシャルの強さが  $K/t = 0.5$  (赤)、 $K/t = 5.0$  (緑)、 $K/t = 100$  (青) の場合を表し、黒の実線は不純物がない場合である。 $t_2/t = 0.2/3\sqrt{3}$ ,  $N = 32$ ,  $N_1 = N_2 = 16$  とし、 $M/t = +0.4$  の系と  $M/t = -0.4$  の系を接合している。



図 6.15: 接合系の境界に磁性不純物が存在するときの散乱過程の模式図。赤矢印は上向きスピン、青矢印は下向きスピンを表し、黒の矢印のようにして後方散乱が起きる。

## 第7章

# まとめ

本研究では、シリセンなどの2次元蜂の巣格子トポロジカル絶縁体の有効模型であるKane-Mele 模型からなるリボンの輸送特性に関して、理論的な考察を行なった。特に端の形状の違いに着目し、ジグザグ端を持つジグザグ型リボンと肘掛け椅子端を持つアームチェア型リボンの結果を比較した。

まず、輸送特性の議論に進む前に、ジグザグ型およびアームチェア型リボンのバンド構造や端に出現する伝導状態について詳細な議論を行なった。得られた結果は以下のとおりである。

- ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合も、価電子帯と伝導帯との間に線形分散を持つ伝導状態が現れる。確かにその状態は上向きスピんと下向きスピんが反対方向に運動するヘリカルエッジ状態となっている。スピン軌道相互作用が同じ強さの場合、このヘリカルエッジ状態は、アームチェア型リボンよりもジグザグ型リボンのほうがより端に局在している。
- ジグザグ型リボンでは、ヘリカルエッジ状態の速度がスピン軌道相互作用の強さに比例するが、アームチェア型リボンでは速度はそれに依存しない。また、交替ポテンシャルを導入すると両方のリボンとも伝導帯の下端と価電子帯の上端のエネルギー差が小さくなる。

異なるチャーン数で指定される相を接合した系においては、その接合境界近傍に伝導状態が出現することが知られている。本研究では、異符号のバレーチャーン数によって指定される2種類の自明な絶縁体を接合した系（以下では接合系と省略）について、バンド構造や接合境界近傍に出現する伝導状態についてより詳細に調べた。得られた結果は以下のとおりである。

- ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合もその境界に互いに逆向き

のスピンの反対方向に流れる状態が実現する。スピン軌道相互作用が同じ強さの場合、その波動関数はアームチェア型リボンよりもジグザグ型リボンのほうが接合境界に局在している。

- 伝導帯の下端と価電子帯の上端のエネルギー差は、チャンネル幅が広がるにつれてもしくは交替ポテンシャルが小さくなるにつれて小さくなる。
- 伝導状態の分散関係は、ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合もチャンネル幅や交替ポテンシャルにほとんど依存しない。また、ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合も交替ポテンシャルが大きくなるほど1次元性が強まる。アームチェア型リボンよりもジグザグ型リボンのほうが波動関数が境界付近に局在する。

次に本研究で用いる数値シミュレーションのための定式化を行なった。先行研究では最近接格子間の電荷移動のみを含むモデル（正方格子や蜂の巣格子）での定式化が行なわれていた。これらをジグザグ型リボンとアームチェア型リボンの両方に対して次近接格子間の電荷移動を含むように拡張した。

この定式化に基づき、まずジグザグ型リボンおよびアームチェア型リボンに通常の不純物が存在する場合について数値シミュレーションを行ない、その結果を考察した。得られた結果は以下のとおりである。

- 数個の不純物が端に存在する場合  
ヘリカルエッジ状態による伝導は、不純物の位置や強さ、端の形状にかかわらず不純物ポテンシャルの影響を受けない。
- 不純物が系全体に分布している場合  
ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合も乱れが強くなるとアンダーソン局在が起こる。局在が起きる散乱の強さには有限の臨界値が存在しており、通常の1次元とは異なる性質を持つ。また、チャンネル幅が狭いほど、あるいは交替ポテンシャルが大きいほど局在が起こりやすい。ジグザグ型リボンとアームチェア型リボンと比較すると、アームチェア型リボンのほうが局在が起こりやすい。
- 接合系で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は端の形状にかかわらず不純物によって散乱され、伝導が抑制される。これは1種類のトポロジカル相からなる系の場合とは異なる結果である。
- 接合系で不純物が系全体に分布している場合  
ジグザグ型リボン、アームチェア型リボンいずれの場合もアンダーソン局在が起こるが、その散乱の強さの臨界値は1種類のトポロジカル相からなる場合よりも小さ

く、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いずれの場合も交替ポテンシャルが大きいほど局在が起こりやすい。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が起こりやすい。

次に、スピン反転を引き起こす磁性不純物が存在する場合の数値シミュレーションを行ない、その結果を考察した。得られた結果は以下のとおりである。

- 1 個の不純物が端近傍に存在する場合

先行研究において、B 副格子に不純物が存在する場合における透過率の不純物ポテンシャルの強さおよびエネルギー依存性が議論されているが、本研究では B 副格子の場合に加えて A 副格子に不純物が存在する場合についても議論した。不純物の位置にかかわらず、不純物ポテンシャルを強くすると透過率は最初減少しゼロとなるが、その後増加し 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存在する場合には、透過率はエネルギーにほとんど依存しないが、それ以外の位置に存在す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振る舞いを、バルクの状態を介した有効ポテンシャルを持つ 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のヘリカルエッジ状態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定量的に再現している。弱結合領域をよく再現する本解析は、強結合領域の再現が可能な先行研究の解析方法と相補的であると考えられる。

スピン軌道相互作用が異なる場合の透過率は、ジグザグ型では  $K|\psi_p|^2/\Delta$ 、アームチェア型では  $K|\psi_p|^2/t$  の関数として整理すると 1 つの曲線であらわされる。ここで  $K$  は不純物ポテンシャルの強さであり、 $\psi_p$  は位置  $p$  におけるヘリカルエッジ状態の波動関数、 $\Delta$  はバルクのバンドギャップである。

- 接合系において 1 個の不純物が境界付近に存在する場合

接合境界付近に出現す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る。このように、通常の不純物が接合の境界に存在する場合と類似した結果を示す。



## 付録 A

# 式 (2.16) の Berry 曲率とチャーン数の計算

ハミルトニアンが式 (2.16) で与えられているとき、エネルギー固有値は

$$E = \pm \sqrt{(\hbar v_F)^2 |\mathbf{k}|^2 + (\Delta_s^\eta)^2} \equiv E_{\mathbf{k},s}^\eta \quad (\text{A.1})$$

で与えられ、下のバンドの固有関数  $\psi_s^\eta(\mathbf{k})$  は

$$\begin{aligned} \psi_s^\eta(\mathbf{k}) &= \frac{1}{A_{\mathbf{k},s}^\eta} \begin{pmatrix} -\hbar v_F(\eta k_x - i k_y) \\ \Delta_s^\eta + E_{\mathbf{k},s}^\eta \end{pmatrix} \\ &\equiv \begin{pmatrix} \psi_1^\eta(\mathbf{k}) \\ \psi_2^\eta(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

で表される。ここで  $\mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2$  であり、

$$A_{\mathbf{k},s}^\eta = \sqrt{2(E_{\mathbf{k},s}^\eta)^2 + 2\Delta_s^\eta E_{\mathbf{k},s}^\eta} \quad (\text{A.3})$$

である。Berry 接続  $\mathbf{a}^\eta(\mathbf{k}) = (a_x^\eta(\mathbf{k}), a_y^\eta(\mathbf{k}))$  は以下のように与えられる。

$$a_x^\eta(\mathbf{k}) = -i \left\{ \psi_1^{\eta*}(\mathbf{k}) \frac{\partial \psi_1^\eta(\mathbf{k})}{\partial k_x} + (1 \rightarrow 2) \right\} \quad (\text{A.4})$$

$$a_y^\eta(\mathbf{k}) = -i \left\{ \psi_1^{\eta*}(\mathbf{k}) \frac{\partial \psi_1^\eta(\mathbf{k})}{\partial k_y} + (1 \rightarrow 2) \right\} \quad (\text{A.5})$$

$\psi_2^\eta(\mathbf{k})$  が実数であることを用いると Berry 曲率  $F_s^\eta(\mathbf{k})$  は以下のように計算される。

$$\begin{aligned}
F_s^\eta(\mathbf{k}) &= \frac{\partial}{\partial k_x} a_y^\eta(\mathbf{k}) - \frac{\partial}{\partial k_y} a_x^\eta(\mathbf{k}) \\
&= 2 \times \text{Im} \left\{ \frac{\partial \psi_1^{\eta*}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \frac{\partial \psi_1^\eta(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right\} \\
&= -\eta \frac{(\hbar v_F)^2}{2(E_{\mathbf{k},s}^\eta)^3} \Delta_s^\eta
\end{aligned} \tag{A.6}$$

この結果を用いると、チャーン数  $C_s^\eta$  は

$$\begin{aligned}
C_s^\eta &= \frac{1}{2\pi} \int d^2 \mathbf{k} F_s^\eta(\mathbf{k}) \\
&= -\frac{\eta}{2} \Delta_s^\eta \int_0^\infty dk k \left( \frac{(\hbar v_F)^2}{(\hbar v_F)^2 |\mathbf{k}|^2 + (\Delta_s^\eta)^2} \right)^{3/2} \\
&= -\frac{\eta}{2} \frac{\Delta_s^\eta}{|\Delta_s^\eta|} \\
&= -\frac{\eta}{2} \text{sgn}(\Delta_s^\eta)
\end{aligned} \tag{A.7}$$

## 付録 B

# チャンネル $n$ の速度 $v_n$ の導出

本付録では、文献 [49] に従ってジグザグ型リボンでのチャンネル  $n$  の速度  $v_n$  を導出する。アームチェア型リボンでは適宜行列サイズ、ベクトルサイズを半分に読み替えることとする。式 (4.24) において  $j = 0$  とする。この固有値方程式の解のうち、右向きの波に対応する固有値を  $\lambda_1(+), \dots, \lambda_{4N}(+)$  とし、対応する固有ベクトルの  $\mathbf{C}_0$  に対応した部分を  $\mathbf{u}_1(+), \dots, \mathbf{u}_{4N}(+)$  とする。また左向きの波に対応する固有値を  $\lambda_1(-), \dots, \lambda_{4N}(-)$  とし、対応する固有ベクトルの  $\mathbf{C}_0$  に対応した部分を  $\mathbf{u}_1(-), \dots, \mathbf{u}_{4N}(-)$  とする。ただし固有ベクトルは  $\mathbf{u}_l^\dagger(\pm)\mathbf{u}_l(\pm) = 1$  ( $l = 1, \dots, 4N$ ) となるように規格化されている。式 (4.43) より

$$(E\mathbf{1} - \mathcal{H}_0)\lambda_n(\pm)\mathbf{u}_n(\pm) + \mathbf{T}_R\lambda_n^2(\pm)\mathbf{u}_n(\pm) + \mathbf{T}_L\mathbf{u}_n(\pm) = \mathbf{0} \quad (\text{B.1})$$

が成立する。左から  $\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)$  をかけると

$$\lambda_n(\pm)\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)(E\mathbf{1} - \mathcal{H}_0)\mathbf{u}_n(\pm) + \lambda_n^2(\pm)\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{T}_R\mathbf{u}_n(\pm) + \mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{T}_L\mathbf{u}_n(\pm) = 0 \quad (\text{B.2})$$

となる。上式の複素共役をとり、 $n$  と  $m$  を入れ替えると

$$\lambda_m^*(\pm)\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)(E\mathbf{1} - \mathcal{H}_0)\mathbf{u}_n(\pm) + (\lambda_m^*(\pm))^2\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{T}_R\mathbf{u}_n(\pm) + \mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{T}_L\mathbf{u}_n(\pm) = 0 \quad (\text{B.3})$$

が得られる。ここで  $\mathbf{T}_L^\dagger = \mathbf{T}_R$  を用いた。式 (B.2) に  $\lambda_m^*(\pm)$ , 式 (B.3) に  $\lambda_n(\pm)$  をかけて 2 式の差をとると

$$\begin{aligned} -[\lambda_n(\pm)\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{T}_R\mathbf{u}_n(\pm) - \lambda_m^*(\pm)\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{T}_L\mathbf{u}_n(\pm)](1 - \lambda_m^*(\pm)\lambda_n(\pm)) &= 0 \\ \iff -i\mathbf{V}(\pm)_{m,n}(1 - \lambda_m^*(\pm)\lambda_n(\pm)) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

ここで  $\mathbf{V}(\pm)_{m,n}$  は以下のように定義されている。

$$\mathbf{V}(\pm)_{m,n} \equiv -i[\lambda_n(\pm)\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{T}_R\mathbf{u}_n(\pm) - \lambda_m^*(\pm)\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{T}_L\mathbf{u}_n(\pm)] \quad (\text{B.5})$$

したがって  $\lambda_m^*(\pm)\lambda_n(\pm) \neq 1$  であるならば  $\mathbf{V}(\pm)_{m,n} = 0$  となる。以下で  $\mathbf{V}(\pm)_{m,n}$  を求める。

$m$  と  $n$  のいずれか一方またはその両方が減衰波モードを表しているならば  $|\lambda(+)| < 1$ ,  $|\lambda(-)| > 1$  なので、 $\lambda_m^*(\pm)\lambda_n(\pm) \neq 1$  となり、 $\mathbf{V}(\pm)_{m,n} = 0$  となる。また、 $m$  と  $n$  の両方が進行波を表している場合 ( $|\lambda_m(\pm)| = |\lambda_n(\pm)| = 1$ ) には、 $\lambda_m(\pm) = \exp(ik_m a)$  とかけるので、その固有値が縮退していなければ、すなわち  $k_m \neq k_n$  の場合、非対角成分 ( $m \neq n$ ) はゼロになる。

$m$  と  $n$  の両方が進行波を表しておりその固有値が縮退している場合、または進行波状態の対角成分については、以下のように求められる。式 (B.2) を  $E$  で微分し、関係式  $\lambda_n^*(\pm) = 1/\lambda_n(\pm)$  を用いると

$$\frac{d\lambda_n(\pm)}{dE} [\lambda_n(\pm)\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{T}_R\mathbf{u}_n(\pm) - \lambda_n^*(\pm)\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{T}_L\mathbf{u}_n(\pm)] + \lambda_n(\pm)\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{u}_n(\pm) = 0 \quad (\text{B.6})$$

が得られる。 $m$  と  $n$  の両方が進行波を表しているため、その固有値が縮退している場合もしくは対角成分では  $\lambda_n^*(\pm) = \lambda_m^*(\pm)$  なので、上の式は

$$i\frac{d\lambda_n(\pm)}{dE}\mathbf{V}(\pm)_{m,n} + \lambda_n(\pm)\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{u}_n(\pm) = 0 \quad (\text{B.7})$$

となる。一般的に、縮退した状態は  $m \neq n$  に対して  $\mathbf{u}_m^\dagger(\pm)\mathbf{u}_n(\pm) = 0$  を満たすように選ぶことができるので、 $\mathbf{V}(\pm)_{m,n}$  とできる。進行波状態の対角成分は以下のように計算される。 $\mathbf{u}_n^\dagger(\pm)\mathbf{u}_n(\pm) = 1$  より、

$$\mathbf{V}(\pm)_{n,n} = i\lambda_n(\pm)\frac{dE}{d\lambda_n(\pm)} \quad (\text{B.8})$$

とかける。進行波の速度は  $v_n = \hbar^{-1}dE/dk$  と表され、 $\lambda_n(\pm) = \exp(ik_n a)$  とかけることを用いると、

$$v_n(\pm) = \frac{a}{\hbar}\mathbf{V}(\pm)_{n,n} \quad (\text{B.9})$$

$$= -i\frac{a}{\hbar} [\lambda_n(\pm)\mathbf{u}_n^\dagger(\pm)\mathbf{T}_R\mathbf{u}_n(\pm) - \lambda_n^*(\pm)\mathbf{u}_n^\dagger(\pm)\mathbf{T}_L\mathbf{u}_n(\pm)] \quad (\text{B.10})$$

が得られる。実際は式 (4.46) の  $|\lambda| = 1$  を満たす固有値、固有ベクトルに対して (B.10) を計算し、得られた速度が正になれば右向き、負になれば左向きと判断する。

## 付録 C

# 1次元連続体模型に磁性不純物が存在するときの透過率の導出

互いに逆向きのスピンの系が反対方向に流れている系に、スピン反転させる磁性不純物が  $x = 0$  に存在する場合のハミルトニアンは以下のように書ける。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}} \quad (\text{C.1})$$

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} -iv_F \partial_x & 0 \\ 0 & iv_F \partial_x \end{pmatrix} \quad (\text{C.2})$$

$$\mathcal{H}_{\text{imp}} = V \delta(x) \begin{pmatrix} 0 & e^{+i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.3})$$

ここで、 $V$  はスピン反転散乱の強さを表し、 $v_F$  はフェルミ速度である。上のハミルトニアンの散乱問題を解く際、 $\delta(x)$  を幅  $a$  ( $a \rightarrow 0$ ) の矩形関数として近似する。

$$\delta(x) = \begin{cases} a^{-1} & 0 \leq x \leq a \text{ のとき} \\ 0 & x < 0 \text{ および } a < x \text{ のとき} \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

以下では  $V/a = \tilde{V}$  とする。 $a \rightarrow 0$  の極限を取る際、 $V$  を一定に保たねばならないので  $\tilde{V}$  は十分に大きいものとする。

$\tilde{V} > E$  の場合のそれぞれの領域の解は以下のように与えられる。

$$\varphi(x) = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikx} + B \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-ikx} \quad (x < 0) \quad (\text{C.5})$$

$$\varphi(x) = C_+ \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ 1 \end{pmatrix} e^{-\kappa_+ x} + C_- \begin{pmatrix} \alpha_- \\ 1 \end{pmatrix} e^{-\kappa_- x} \quad (0 < x < a) \quad (\text{C.6})$$

$$\varphi(x) = D \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik(x-a)} \quad (x > a) \quad (\text{C.7})$$

ここで

$$k = \frac{E}{v_F} \quad (\text{C.8})$$

$$\kappa_{\pm} = \pm \frac{\sqrt{\tilde{V}^2 - E^2}}{v_F} \quad (\text{C.9})$$

$$\alpha_{\pm} = \frac{\tilde{V}e^{i\phi}}{E \mp i\sqrt{\tilde{V}^2 - E^2}} \quad (\text{C.10})$$

である。 $x = 0$  と  $x = a$  で波動関数が連続という条件を課し、 $\tilde{V}a = \text{一定}$  の元で  $a \rightarrow 0$  とすると、

$$B = \frac{A \tanh \frac{|V|}{v_F}}{i\beta} \quad (\text{C.11})$$

$$D = \frac{A}{\cosh \frac{|V|}{v_F}} \quad (\text{C.12})$$

が得られる。ここで、

$$\beta = \text{sgn}(V)e^{i\phi} \quad (\text{C.13})$$

である。反射確率  $R$  と透過確率  $T$  は以下のように得られる。

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \tanh^2 \frac{|V|}{v_F} \quad (\text{C.14})$$

$$T = \left| \frac{D}{A} \right|^2 = \cosh^2 \frac{|V|}{v_F} \quad (\text{C.15})$$

## 付録 D

# 1次元格子模型に磁性不純物が存在するときの透過率の導出

ヘリカルエッジ状態のみを取り出したバンド構造は図 D.1 によって与えられる。ここで赤線は上向きスピンの分散関係を表す。上向きスピンの電子が入射した場合、このバンド構造で許される散乱過程はスピン  $s'$  からスピン  $s$  への透過係数を  $t_{ss'}$ 、反射係数を  $r_{ss'}$  とすると、 $t_{\uparrow\uparrow}$  および  $r_{\downarrow\uparrow}$  である (図 D.1 の (a) および (b))。このバンド構造を表すハミルトニアン  $\mathcal{H}_0$  は

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{k,s} sv_F k c_{k,s}^\dagger c_{k,s} \quad (\text{D.1})$$

で与えられる。このハミルトニアンを格子模型で記述することを考える。まず、エネルギー

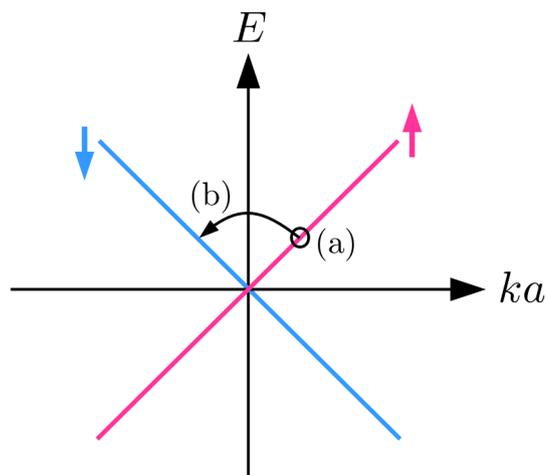


図 D.1: 式 (D.1) のハミルトニアンを持つようなバンド構造。赤線は上向きスピン、青線は下向きスピン。(a), (b) はそれぞれ  $t_{\uparrow\uparrow}$ ,  $r_{\downarrow\uparrow}$  を表す。

ギー  $E$  が小さい範囲に着目し  $k \simeq \sin ka/a$  と置き換える。すると式 (D.2) のようになる。

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{k,s} sv_F \sin ka/a c_{k,s}^\dagger c_{k,s} \quad (\text{D.2})$$

このハミルトニアンに対してフーリエ変換を行ない、サイト表示を行なうと以下のようになる。

$$\mathcal{H}_0 = -it \sum_{j,s} s \left( c_{j,s}^\dagger c_{j+1,s} - c_{j+1,s}^\dagger c_{j,s} \right) \quad (\text{D.3})$$

ただし、 $t = v_F/(2a)$  である。式 (D.3) がヘリカルエッジ状態を格子模型で表した場合のハミルトニアンである。しかしながら、以下に示すような注意が必要である。式 (D.2) のバンド構造は図 D.2 のように与えられる。図 D.1 の場合には起こりえなかった散乱過程

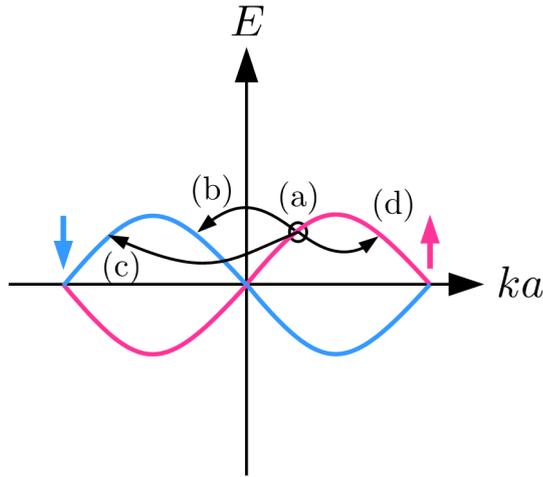


図 D.2: 式 (D.2) のハミルトニアンを持つようなバンド構造。赤線は上向きスピン、青線は下向きスピン。(a), (b), (c), (d) はそれぞれ  $t_{\uparrow\uparrow}$ ,  $r_{\uparrow\downarrow}$ ,  $t_{\downarrow\downarrow}$ ,  $r_{\downarrow\uparrow}$  を表す。

(c)  $t_{\downarrow\uparrow}$ , (d)  $r_{\uparrow\uparrow}$  が出現している。入射電子のエネルギーが  $E \simeq 0$  の場合、これらの散乱過程は  $\pi/a$  程度の大きな波数の変化が伴う。したがって、そのような過程が起こらないようにするためには、デルタ関数型の短距離ポテンシャルではなく長距離ポテンシャルを考慮せねばならない。そのようなポテンシャルとして以下のような関数を採用する。

$$\mathcal{H}_{\text{imp}} = \sum_{i,s} V_{js} c_{j,-s}^\dagger c_{j,s} \quad (\text{D.4})$$

$$V_{js} = isK \sqrt{\frac{\sigma}{\pi}} \exp \left[ -\sigma \left( j - \frac{L}{2} \right)^2 \right] \quad (\text{D.5})$$

以下では4章と同様の方法を用いてこの系の散乱問題を定式化する。

1番目から $L$ 番目の格子を試料とし、両側に理想的なリード線がつながっているとす。  $j$ 番目の格子の運動方程式は以下のように書ける。

$$(E\mathbf{1} - \mathcal{H}_j)\mathbf{C}_j + \mathbf{T}_R\mathbf{C}_{j+1} + \mathbf{T}_L\mathbf{C}_{j-1} = \mathbf{0} \quad (\text{D.6})$$

ここで $\mathbf{0}$ は零ベクトル、 $\mathbf{1}$ は単位行列、 $E$ はエネルギーである。 $\mathbf{C}_j$ は $j$ 番目のセルの振幅を表すベクトル、 $\mathbf{T}_R, \mathbf{T}_L$ はそれぞれ右側、左側の格子からの寄与であり、以下のように定義される。

$$\mathbf{C}_j = \begin{pmatrix} C_{j\uparrow} \\ C_{j\downarrow} \end{pmatrix} \quad (\text{D.7})$$

$$\mathbf{T}_R = \begin{pmatrix} it & 0 \\ 0 & -it \end{pmatrix} \quad (\text{D.8})$$

$$\mathbf{T}_L = \begin{pmatrix} -it & 0 \\ 0 & it \end{pmatrix} \quad (\text{D.9})$$

$\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_{L+1}$ は理想的なリード線を考えているため

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_{L+1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.10})$$

となり、 $\mathcal{H}_j$  ( $j = 1, \dots, L$ )においては長距離ポテンシャルの影響が存在するため

$$\mathcal{H}_j = \begin{pmatrix} 0 & V_{j-} \\ V_{j+} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.11})$$

となる。式(D.6)を変形することにより

$$\mathbf{C}_{j+1} = \mathbf{T}_R^{-1} [-E\mathbf{C}_j - \mathbf{T}_L\mathbf{C}_{j-1}] \quad (\text{D.12})$$

が得られる。また

$$\mathbf{C}_j = \lambda\mathbf{C}_{j-1} \quad (\text{D.13})$$

と定義すると、

$$\lambda \begin{pmatrix} \mathbf{C}_j \\ \mathbf{C}_{j-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -E\mathbf{T}_R^{-1} & -\mathbf{T}_R^{-1}\mathbf{T}_L \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_j \\ \mathbf{C}_{j-1} \end{pmatrix} \quad (\text{D.14})$$

が得られる。これを上向きスピン、下向きスピンについての固有値方程式に分けると

$$\lambda_{\uparrow} \begin{pmatrix} C_{j\uparrow} \\ C_{j-1\uparrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\epsilon & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{j\uparrow} \\ C_{j-1\uparrow} \end{pmatrix} \quad (\text{D.15})$$

$$\lambda_{\downarrow} \begin{pmatrix} C_{j\downarrow} \\ C_{j-1\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\epsilon & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{j\downarrow} \\ C_{j-1\downarrow} \end{pmatrix} \quad (\text{D.16})$$

となる。ここで  $\epsilon = E/t$  である。これらの固有値方程式を解くと

$$\lambda_{\uparrow\pm} = \frac{i\epsilon \pm \sqrt{-\epsilon^2 + 4}}{2} \quad (\text{D.17})$$

$$\lambda_{\downarrow\pm} = \frac{-i\epsilon \pm \sqrt{-\epsilon^2 + 4}}{2} \quad (\text{D.18})$$

が得られる。 $\mathbf{\Lambda}(\pm)$  を次のように定義する。

$$\mathbf{\Lambda}(+) = \begin{pmatrix} \lambda_{\uparrow+} & 0 \\ 0 & \lambda_{\downarrow-} \end{pmatrix} \quad (\text{D.19})$$

$$\mathbf{\Lambda}(-) = \begin{pmatrix} \lambda_{\uparrow-} & 0 \\ 0 & \lambda_{\downarrow+} \end{pmatrix} \quad (\text{D.20})$$

また規格化されているため、 $\mathbf{U}(\pm)$  は次のように書ける。

$$\mathbf{U}(+) = \mathbf{U}(-) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{D.21})$$

以上のことから  $\mathbf{F}(\pm)$  を次のように定義する。

$$\mathbf{F}(\pm) = \mathbf{U}(\pm)\mathbf{\Lambda}(\pm)\mathbf{U}(\pm)^{-1} = \mathbf{\Lambda}(\pm) \quad (\text{D.22})$$

4.4 節以降と同様の計算を行なうことにより、ヘリカルエッジ状態のスピン  $s$  からスピン  $s'$  への透過係数  $t_{ss'}$ , 反射係数  $r_{ss'}$  は以下で得られる。

$$t_{ss'} = \sqrt{\frac{v_s}{v_{s'}}} \left\{ -\mathbf{U}^{-1}(+)(L+1|G^{(L+1)}|0)\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] \mathbf{U}(+) \right\}_{ss'} \quad (\text{D.23})$$

$$r_{ss'} = \sqrt{-\frac{v_s}{v_{s'}}} \left\{ \mathbf{U}^{-1}(-) \left\{ -(0|G^{(L+1)}|0)\mathbf{T}_L [\mathbf{F}^{-1}(+) - \mathbf{F}^{-1}(-)] - \mathbf{1} \right\} \mathbf{U}(+) \right\}_{ss'} \quad (\text{D.24})$$

ここで  $v_s$  はそれぞれスピン  $s$  を持つチャネルの速度である。確率の保存は

$$|t_{\uparrow\uparrow}|^2 + |t_{\downarrow\uparrow}|^2 + |r_{\uparrow\uparrow}|^2 + |r_{\downarrow\uparrow}|^2 = 1 \quad (\text{D.25})$$

によって与えられる。

## 付録 E

# T-matrix を用いた有効ポテンシャル $V_{\text{eff}}$ の導出

T-matrix 近似を用いて有効ポテンシャル  $V_{\text{eff}}$  を計算する。T-matrix  $\tilde{T}$  は磁性不純物によるポテンシャルのハミルトニアン  $\mathcal{H}_{\text{imp}}$  とグリーン関数  $G_0$  を用いて以下のように定義される。

$$\tilde{T} = \mathcal{H}_{\text{imp}} + \mathcal{H}_{\text{imp}}G_0\mathcal{H}_{\text{imp}} + \mathcal{H}_{\text{imp}}G_0\mathcal{H}_{\text{imp}}G_0\mathcal{H}_{\text{imp}} + \cdots \quad (\text{E.1})$$

磁性不純物が単位格子 0 の位置  $p$  に存在するとき、ブラケットの表示で  $\mathcal{H}_{\text{imp}}$  は

$$\mathcal{H}_{\text{imp}} = K e^{is\phi_p} \sum_s |0, p, s\rangle \langle 0, p, -s| \quad (\text{E.2})$$

と書ける。一方、グリーン関数  $G_0$  は以下のように与えられる。

$$G_0 = \sum_{k,s,l} \frac{|k, s, l\rangle \langle k, s, l|}{E - E_{sl}(k)} \quad (\text{E.3})$$

ここで、 $E_{sl}(k)$  と  $|k, s, l\rangle$  は、波数  $k$ 、スピン  $s$  で指定されるリボン状の Kane-Mele 模型の  $l$  番目の固有値と対応する固有状態である。コンダクタンスに現れるのはスピンを反転させる後方散乱であるから、有効ポテンシャル  $V_{\text{eff}}$  はこの T-matrix から、

$$V_{\text{eff}}/a = \langle 0, p, s | \tilde{T} | 0, p, -s \rangle \quad (\text{E.4})$$

ように得られる。ここで注意すべきことは、バルクの状態を介した有効相互作用を求めているため中間状態に現れるグリーン関数はバルクの状態のみで構成させなければならないことである。また、スピン反転を起こす過程のみを考慮するので不純物散乱の奇数次の過程しか寄与しない。有効ポテンシャルは、図 E.1 のダイアグラムによって表され、以下のように計算される。

$$V_{\text{eff}}/a = \begin{array}{c} \times \\ | \\ \text{---} \\ s \quad -s \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ / \quad \backslash \\ \text{---} \\ s \quad -s \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ / \quad \backslash \\ / \quad \backslash \\ \text{---} \\ s \quad -s \end{array} + \dots$$

図 E.1: 有効ポテンシャル  $V_{\text{eff}}$  を表すダイアグラム。実線はバルク状態のグリーン関数を表し、破線は不純物ポテンシャル、点線はヘリカルエッジ状態を表している。

$$V_{\text{eff}} = \frac{K e^{is\phi_p}}{1 - K^2 \langle 0, p, s | G_0 | 0, p, s \rangle \langle 0, p, -s | G_0 | 0, p, -s \rangle} \quad (\text{E.5})$$

ここで

$$\langle 0, p, s | G_0 | 0, p, s \rangle = \frac{1}{N_L} \sum_k \sum_{l=1}^{2N} \frac{|u_{sl}^p(k)|^2}{E - E_{sl}(k)} \theta(|E_{sl}(k)| - \Delta) \quad (\text{E.6})$$

である。 $\theta(|E_{sl}(k)| - \Delta)$  はグリーン関数がバルクの状態で構成されることを保証している。また、以下の関係式を用いた。

$$\langle I, p, s | k, s', l \rangle = \frac{1}{\sqrt{N_L}} u_{sl}^p(k) e^{ikx_I} \delta_{ss'} \quad (\text{E.7})$$

ここで、 $x_I = Ia$ 、 $N_L$  は単位格子の数を表す。

## 参考文献

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] T. Ando and Y. Uemura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **36**, 1521 (1974).
- [3] T. Ando, Y. Matsumoto and Y. Uemura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **39**, 279 (1975).
- [4] S. Kawaji and J. Wakabayashi, *Physics in High Magnetic Field*, edited by S. Chikazumi and N. Miura (Springer, Berlin, 1981), p.284.
- [5] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- [6] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
- [7] M. Kohmoto, *Ann. Phys.* **160**, 355 (1985).
- [8] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. B* **78**, 195125 (2008).
- [9] A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *New J. Phys.* **12**, 065010 (2010).
- [10] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
- [11] K. Takeda and K. Shiraishi, *Phys. Rev. B* **50**, 14916 (1994).
- [12] Y. Xu, B. Yan, H.-J. Zhang, J. Wang, G. Xu, P. Tang, W. Duan and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 136804 (2013).
- [13] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
- [14] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
- [15] M. Ezawa, *Phys. Rev. B* **88**, 161406 (2013).
- [16] L. Matthes, O. Pulci and F. Bechstedt, *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 395305 (2015).
- [17] C. Grazianetti and A. Molle, *Research*, **2019**, 8494606 (2019).

- [18] P. Vogt, P. de Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet, and G. Le Lay., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 155501 (2012).
- [19] P. Vogt, P. Capiod, M. Berthe, A. Resta, P. de Padova, T. Bruhn, G. Le Lay and B. Grandidier, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 021602 (2014).
- [20] L. Meng, Y. Wang, L. Zhang, S. Du, R. Wu, L. Li, Y. Zhang, G. Li, H. Zhou, W. A. Hofer and H.-J. Gao, *Nano Lett.* **13**, 685 (2013).
- [21] S. Sadeddine, H. Enriquez, A. Bendounan, P. K. Das, I. Vobornik, A. Kara, A. J. Mayne, F. Sirotti, G. Dujardin and H. Oughaddou, *Scientific Reports*, **7**, 44400 (2017).
- [22] A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, H. Kawai, Y. Wang, and Y. Yamada-Takamura, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 245501 (2012).
- [23] D. Chiappe, E. Scalise, E. Cinquanta, C. Grazianetti, B. van den Broek, M. Fanciulli, M. Houssa and A. Molle, *Advanced Materials* **26**, 2096 (2014).
- [24] M. De Crescenzi, I. Berbezier, M. Scarselli, P. Castrucci, M. Abbarchi, A. Ronda, F. Jardali, J. Park and H. Vach, *ACS Nano* **10**, 11163 (2016).
- [25] A. M. Tokmachev, D. V. Averyanov, O. E. Parfenov, A. N. Taldenkov, I. A. Karateev, I. S. Sokolov, O. A. Kondratev and V. G. Storchak, *Nature Communications* **9**, 1672 (2018).
- [26] M. Derivaz, D. Dentel, R. Stephan, M. C. Hanf, A. Mehdaoui, P. Sonnet and C. Pirri, *Nano Lett.* **15**, 2510 (2015).
- [27] J. Gou, Q. Zhong, S. Sheng, W. Li, P. Cheng, H. Li, L. Chen and K. Wu, *2D Mater.* **3**, 045005 (2016).
- [28] M. E. Dávila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio and G. Le Lay, *New J. Phys.* **16**, 095002 (2014).
- [29] L. Li, S. Lu, J. Pan, Z. Qin, Y. Wang, Y. Wang, G. Cao, S. Du and H.-J. Gao, *Adv. Mater.* **26**, 4820 (2014).
- [30] Z. Qin, J. Pan, S. Lu, Y. Shao, Y. Wang, S. Du, H.-J. Gao and G. Cao, *Adv. Mater.* **29**, 1606046 (2017).
- [31] L. Zhang, P. Bampoulis, A. N. Rudenko, Q. Yao, A. van Houselt, B. Poelsema, M. I. Katsnelson and H. J. W. Zandvliet, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 256804 (2016).
- [32] F. d'Acapito, S. Torrenco, E. Xenogiannopoulou, P. Tsipas, J. Marquez Velasco, D. Tsoutsou and A. Dimoulas, *J. Phys.:Condens. Matter* **28**, 045002 (2016).
- [33] F. Zhu, W. Chen, Y. Xu, C. Gao, D. Guan, C. Liu, D. Qian, S.-C. Zhang and J. Jia, *Nat. Mater.* **14**, 1020 (2015).
- [34] C.-Z. Xu, Y.-H. Chan, P. Chen, X. Wang, D. Flötotto, J. A. Hlevyack, G. Bian,

- 
- S.-K. Mo, M.-Y. Chou and T.-C. Chiang, *Phys. Rev. B* **97**, 035122 (2018).
- [35] J. Yuhara, Y. Fujii, K. Nishino, N. Isobe, M. Nakatake, L. Xian, A. Rubio and G. Le Lay, *2D Mater.* **5**, 025002 (2018).
- [36] M. Ezawa, *Appl. Phys. Lett.* **102**, 172103 (2013).
- [37] L. Ming, H. Hongpei, Z.-B. Feng, Z. Zhengyin, *Physica E* **111**, 172 (2019).
- [38] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988).
- [39] C.-C. Liu, H. Jiang and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
- [40] J.-H. Zheng and M. A. Cazalilla, *Phys. Rev. B* **97**, 235402 (2018).
- [41] T. Ando, *Phys. Rev. B* **44**, 8017 (1991).
- [42] K. Wakabayashi and M. Sigrist, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3390 (2000).
- [43] K. Wakabayashi, Y. Takane, M. Yamamoto, and M. Sigrist, *New. J. Phys.* **11**, 095016 (2009).
- [44] Y. Mochizuki and H. Yoshioka, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 123701 (2009).
- [45] H. Yoshioka and Y. Mochizuki, *J. Phys. Conf. Ser.* **400**, 042077 (2012).
- [46] 望月よね子, 奈良女子大学大学院修士学位論文 (2009 年度)
- [47] K. Slevin, P. Markoš and T. Ohtsuki, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3594 (2001).
- [48] P. Markoš, *acta physica slovacica* **56**, 561 (2006).
- [49] P. A. Khomyakov, G. Brocks, V. Karpan, M. Zwierzycki, and P. J. Kelly, *Phys. Rev. B* **72**, 035450 (2005).



# 謝辞

本論文に研究成果をまとめるにあたり、研究室配属時から現在に至るまで、根気よく私を指導してくださいました吉岡英生教授に深く感謝します。研究に行き詰まったときには相談に乗ってもらい、一緒に解決策を考えてくださいました。国際会議や学会などにも積極的に参加させてくださったことで、たくさんの研究者と交流することができました。秋田大学の林正彦教授にも長きにわたり研究内容を議論することで、たくさんの学びと気づきを得ることができました。上江洲達也教授、高橋智彦教授には研究についてご指摘をいただいたり、土射津昌久准教授にはアイデアを出していただいたりと様々な場面で助けていただきました。秋田大学の小野田勝教授、田沼慶忠准教授にも議論の中で多くの助言をしてくださったおかげで、研究内容をより深めることができました。共同研究はできませんでしたが、岩渕修一名誉教授には物理学について熱心に指導していただきました。また、金井友希美特任助教や友人たちには普段の生活のなかで話を聞いていただいたり、励ましていただきましたりとたくさんお世話になりました。私を支えてくださった多くの研究者の方々に感謝いたします。

そして、ここまで私を支えてくださった家族に感謝いたします。