

トポロジカル絶縁体とスピンホール効果

Topological insulators and spin Hall effect

村上 修一

Shuichi Murakami

東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻

152-8551 東京都目黒区大岡山 2-1-2-1

Department of Physics, Tokyo Institute of Technology,

2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo 152-8551, Japan

E-mail : murakami@stat.phys.titech.ac.jp

上向きスピンの電子と下向きスピンの電子が互いに逆向きに流れている流れを「純粋スピン流」と呼ぶ。非磁性の物質で純粋スピン流に着目することで、今まで考えられていなかったような物性現象が次々と発見されてきていて、一つがスピンホール効果、またそれから派生して出てきた分野がトポロジカル絶縁体である。ここではトポロジカル絶縁体およびスピンホール効果の基礎的な物性について理論・実験の両面から解説を行う。

1. はじめに

本稿のテーマであるスピンホール効果やトポロジカル絶縁体は、「純粋スピン流」の物理の一つである。「純粋スピン流」とは聞きなれない人もあるかもしれないが、電流を伴わない純粋なスピンの流れのことである。これを説明するため、電流とスピン流の関係を図1に示した。電子のスピンは上向き・下向きの2つの向きを持ち、上向き・下向きの電子の流れの大きさは一般に異なってもよい。図1 (i) では上向きと下向きスピンの流れが等しく、この場合は(スピン流を伴わない)電流である。一方、図1 (ii) では上向きと下向きとの流れに違

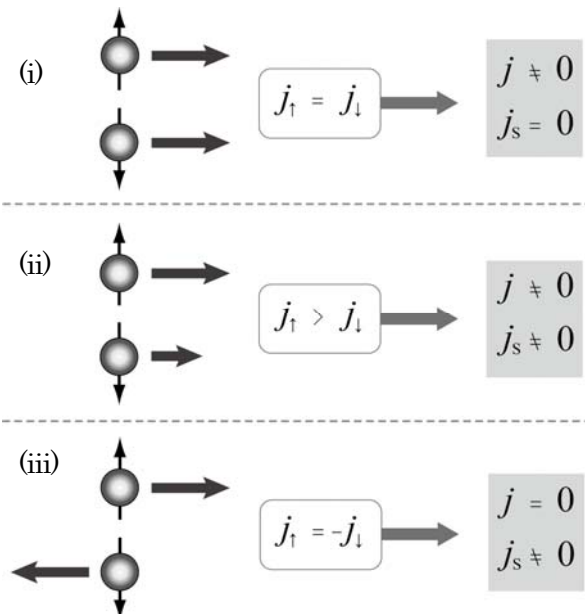


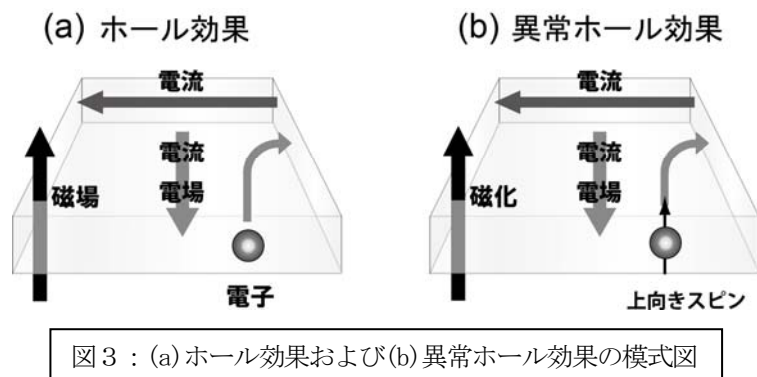
図1 : (i) 電流。(ii) スピン偏極電流 (電流を伴うスピン流)。(iii) 純粋スピン流。 j , j_s は電流およびスピン流を表わす。

いが生じており、この場合はスピン流を伴う電流（スピン偏極した電流）であり、これは例えば強磁性体中の電流で実現される。最後に今注目している純粋スピン流は図1 (iii)のように、上向きスピンと下向きスピンとが互いに反対向きに流れているものである。この場合電荷の流れ（電流）を伴わないことから**純粋スピン流(pure spin current)**と呼ばれている。この大きな特徴は時間反転対称性を破らないことである。すなわち図1 (iii)のような純粋スピン流に時間反転操作を行うと、スピンの向きと流れの向きがともに反転するため、純粋スピン流自身は不変である。この性質により、時間反転不変な系（すなわち非磁性ゼロ磁場の系）でもスピン流が存在しうる。つまり非磁性の系では「スピン」は偏極しておらず全体ではゼロであるが、「スピン流」は存在していることになる。

スピンホール効果[1, 2, 3]とは、試料に電場をかけるとそれに垂直に純粋スピン流が誘起される効果であり、種々の金属や半導体で実際に観測されている。図2にその模式図を示した。ここで想定しているのは非磁性の物質であり、物質中には上向きと下向きスピンの電子が同数存在している。電場を印加すると電子はそれと逆向きに加速されるわけであるが、その際に図2のように上向きスピンと下向きスピンとは逆向きに左右にそれていくような運動をする。つまり印加電場に垂直な方向の流れは電流を伴わないスピンの流れ、つまり純粋スピン流である。このようにして印加電場に垂直に純粋スピン流が発生し、これを**スピンホール効果(spin Hall effect)**という。

このような純粋スピン流を引き起こす方法であるが、その鍵になるのが固体中の電子に働く**スピン軌道相互作用(spin-orbit coupling)**である。これは相対論的な効果であり、特に重い元素（周期律表で下の方の元素）においては、電子は原子核の周りを光速に近い速さで回っているために、相対論的な効果が現れる。これはスピン軌道相互作用と呼ばれるスピンと軌道との相互作用を生み出し、バンド構造もそれを反映したものとなる。このスピン軌道相互作用によって、電子の軌道運動がスピンに依存するようになり、それを用いて電子のスピンの運動を（磁場を使わない）電氣的に制御できる。こうした手段の一つが上に示したスピンホール効果である。

図2を見て、なぜスピンの向きによってこのような動きを起こすのか疑問に思うかもしれない。これには例えばホール効果や異常ホール効果からの類推を行ってみると理解しやすい。例えばホール効果（図3 (a)）を考える。金属板に垂直に磁場をかけて板に沿った方向に電場をかけると、



磁場中で電子がローレンツ力を受けて曲がり、横向きの電流、すなわちホール効果が生じる。ここで磁場中の金属の代わりに、垂直に磁化した強磁性体を考えると、図3 (b)のような異常ホール効果が現れる。磁場を磁化に置き換えるという類推を行えば、このような現象が起こることは想像しやすい。ここでこの強磁性体中では上向きスピンの多いので、これは上向きスピンの図中で右向きの方に軌道が曲がっていくことに他ならない。

次に強磁性体の代わりに非磁性体（常磁性体）を用いたのがスピホール効果である。上向きスピンの右に曲がるなら、もし下向きスピンのいたればそれは左に曲がるはずである。従って、常磁性体のように上向きと下向きスピンの同数存在する場合でも、それぞれのスピンの向きに応じて右ないし左に軌道がずれていくと予想される。これがスピホール効果である。

ただし、どのような機構でこうした効果が起こるかを考えると、磁場中でのホール効果と、異常ホール効果・スピホール効果とはかなり異なる。磁場中では電子の受けるローレンツ力がホール効果を起こすが、異常ホール効果やスピホール効果においては電子がローレンツ力を受けないので、別の機構を考える必要がある。それについては次章で議論する。

2. スピホール効果

2.1 スピホール効果の性質

通常のホール効果は、磁場下において電場を印加するとそれに垂直向きの電流が流れるというものであるが、一方でスピホール効果では磁場がゼロの状態を考えていることを注意しておく。前述のように、スピホール効果においては、時間反転対称性が破れていない（非磁性物質・ゼロ磁場で電場印加する）状況であってもスピ流は誘起される。スピ流はスピンの向きと流れる向きと2つの向きを持つので、 $j_j^i (\approx s^i v_j)$ というテンソルで表される。ここでは、 i はスピンの向き、 j は流れる向きである。例えば (Si や GaAs などのように) 立方晶で時間反転対称性があるとすると、電場に対するスピ流の応答は対称性より $j_j^i = \sigma_s \sum_k \epsilon_{ijk} E_k$ と表わせる (ϵ_{ijk} は完全反対称テンソル)。すなわちこの場合、誘起される純粋スピ流のスピンの向き i 、流れの向き j 、外部電場の向き k は全て互いに垂直である。またこの係数 σ_s をスピホール伝導率と呼ぶ。こうしたスピ流が試料端にぶつかると、そこでスピンは蓄積し、スピ拡散とスピ緩和とつりあって定常状態に達する。また他の物質を接合しておくと、その物質にスピンを注入することもできる。

このスピホール効果の原理は外因性と内因性に大きく分けられるが、いずれの機構にも必要なのがスピ軌道相互作用である。外因性(extrinsic)スピホール効果[4]は固体中の不純物に由来する。不純物が固体中にあると、母物質や不純物のスピ軌道相互作用に由来して、不純物による電子散乱のされ方が、電子スピンの方向に依存して異なってくる。その結果スピホール

効果が現れる。これは1970年代から知られていたが、最近まであまり注目されていなかった。これは、当時はスピン流の測定手段がなかったことや、不純物効果の見積もりの難しさや制御のしにくさのためであろう。次章で述べるように、現在ではスピン流の測定手段が確立してきている。

一方、**内因性(intrinsic)**スピンホール効果は固体自身のバンド構造に起因する効果であり、不純物散乱がなくても起こる。2003年に同時に2つのグループによって独立に提唱された。村上・永長・Zhang[1]がp型半導体について、またSinovaら[2]が2次元n型半導体ヘテロ構造について、内因性スピンホール効果が起こることを理論的に予言した。これらの提案の後、さまざまな半導体や金属でスピンホール効果が実際に観測された。以下ではこの内因性スピンホール効果の原理について簡単に説明する。

2.2 内因性スピンホール効果の原理

この内因性スピンホール効果の原理はいくつか説明の方法があるが、半古典論においてベリー位相(Berry phase) [5]を考慮にいれた理論で解釈するのが最も直観的に理解しやすい。以下にその概略を説明する[1, 3, 6, 7]。電子のプロッホ波動関数は $\varphi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r})$ (n : バンド指標) のような形を持ち試料全体に広がっている。これを重ね合わせて波束を作ると、この波束は実空間でも波数空間でもともにある範囲に局在して分布している。その波束の分布の中心の \vec{x} と \vec{k} を考え、これらの時間発展を記述するのが半古典的運動方程式である。電場 \vec{E} の下での半古典的運動方程式[6]は

$$\dot{\vec{x}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}} + \dot{\vec{k}} \times \vec{\Omega}_n(\vec{k}) \quad (1)$$

$$\dot{\vec{k}} = -e\vec{E} \quad (2)$$

となる。式(1)の第2項がなければ、これは教科書にも載っているボルツマンの輸送方程式である。このボルツマンの輸送方程式は、バンドが一つだけの場合は非常によい記述を与えている。ここでもし電子のバンドが複数ある場合を考えると(1)の第2項のような補正項が加わるというのが、ここでの新しい点である。(1)式右辺第1項は通常現れる項であり群速度を表す。(1)式の右辺第2項は「異常速度」と呼ばれる。ここに現れる $\vec{\Omega}_n(\vec{k})$ はベリー曲率(Berry curvature)と呼ばれ

$$\vec{A}_n(\vec{k}) = -i \left\langle n\vec{k} \left| \frac{\partial}{\partial k_i} \right| n\vec{k} \right\rangle = -i \int_{\text{unit cell}} u_{n\vec{k}}^* \frac{\partial u_{n\vec{k}}}{\partial k_i} d^d x, \quad \vec{\Omega}_n(\vec{k}) = \nabla_{\vec{k}} \times \vec{A}_n(\vec{k}) \quad (3)$$

で定義される。 $\vec{A}_n(\vec{k})$ と $\vec{\Omega}_n(\vec{k})$ とはそれぞれ \vec{k} 空間内のゲージ場(接続)と場の強さ(曲率)であり、電磁気学におけるベクトルポテンシャルおよび磁束密度と同様の数学的性質をもっている。なおこのベリー曲率はベリー位相と関係している。「ベリー位相」[5]とはある系のパラメタ

が断熱的に変化して元に戻った場合に波動関数が得る位相であるが、ここでのベリー曲率 $\vec{\Omega}_n(\vec{k})$ とは、波数空間で無限小のループを描いて波数が変化した場合に波動関数が得る位相に対応している。このベリー曲率 $\vec{\Omega}_n(\vec{k})$ は多少抽象的な概念であるが、以下ではこれが重要な役割を果たす。その性質については後述する。

式(1)に戻ると、この異常速度は電場 \vec{E} に垂直であるため、ホール効果、特に強磁性体の異常ホール効果や非磁性体でのスピンホール効果を生み出すこととなる。この章の「内因性スピンホール効果」はまさにこの項から来ている。この異常速度の起源[3, 7]は、波束が n 番目のバンドに拘束されて運動する際に、そのバンドの「曲率」(ベリー曲率)を感じて運動することである。

このことを別の言葉で述べると次のようになる。波束はある波数 \vec{k}_c に近い波数の波を重ね合わせで作られ、それらの干渉により波束の中心位置が決まる。ベリー曲率 $\vec{\Omega}_n(\vec{k})$ がゼロでない場合は、波数空間が曲がっているため、電場下で波数が変化する際それらの波の干渉に影響を及ぼし、波束の中心の座標の変化を生み出す。つまりこれは電子の位相、すなわち電子の波動性に起因している。こういったベリー位相の物理は波動現象一般に普遍的に見られる。例えば光ビームについても同様の効果が現れ「光のホール効果」[8, 9]と呼んでいる。また磁性体中のマグノン(スピン波)についても例えば温度勾配の印加によりホール効果が現れる[10, 11]。

内因性スピンホール効果の研究での代表的な模型の一つは、文献[2]で扱われた Rashba 模型[12, 13]

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda(\vec{\sigma} \times \vec{k})_z, \quad \vec{k} = (k_x, k_y) \quad (4)$$

である。これは xy 面内に形成されたヘテロ構造 2次元 n 型半導体の模型であり、式(4)第2項が、 λ に比例する Rashba スピン軌道相互作用項である。ヘテロ構造により電子は xy 面内に束縛されているが、その束縛ポテンシャルが $z \leftrightarrow -z$ に関して非対称で空間反転対称性が破れている場合に、この項が現れる。この系でゲート電圧を変化させると束縛ポテンシャルの形が変わるため、 λ の値が変わる。この項はスピン軌道相互作用の項であり、もしヘテロ構造でない対称量子井戸 ($z \leftrightarrow -z$ に関して対称) の場合は(閃亜鉛型結晶構造に起因するバルクの空間反転対称性の破れを無視すると)、Rashba スピン軌道相互作用が現れないため、スピンホール効果はゼロになる。これは伝導バンドが主に s 軌道からなっておりスピン軌道相互作用が弱いことに起因する。

もう一つの代表的な模型としては文献[1]で扱われた Luttinger 模型がある。これは3次元の立方晶の半導体の価電子バンドを近似的に表す4バンド模型であり、

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) k^2 - 2\gamma_2 (\vec{k} \cdot \vec{S})^2 \right], \quad \vec{k} = (k_x, k_y, k_z) \quad (5)$$

という形である。ただし \vec{S} はスピン $\frac{3}{2}$ 行列であり、 γ_1, γ_2 は定数である。この場合はバルクの結晶においてもスピン軌道相互作用の項が存在するため、p 型半導体においてはスピンホール効果が有限に出る。これは言い換えると、半導体の価電子バンドは主に p 軌道から構成されていてスピン軌道相互作用が強いためである。

なおこの半古典論では、スピンの量子性、不純物散乱等のスピン緩和機構などが無視されており、そうした要因を考慮した線型応答理論の計算や有限系での数値計算などが行われている。一方で、上記の半古典論にも意義があり、他の方法（線型応答理論、有限系での数値計算など）に比べて直観的理解が容易で、どんな系で内因性スピンホール効果が大きくなるかを考える際に便利な方法である。

もし注目している n 番目のバンドのエネルギーが他のバンドのエネルギーと近接していると、その波数 \vec{k} 付近では、一般にベリー曲率

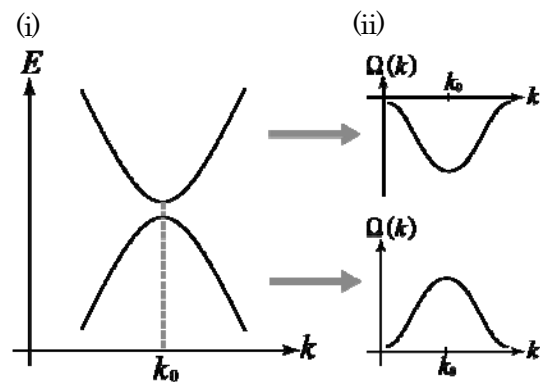


図4: (i) バンド交差と (ii) ベリー曲率の模式図。上のバンドと下のバンドでベリー曲率が逆符号となる。

$\vec{\Omega}_n(\vec{k})$ が増大する。これを考えるために、図4 (i) のように2つのバンドが波数 $\vec{k} = \vec{k}_0$ において互いに近接するような系を考えよう。2次元系を考え、モデルとしては例えば

$$H = \lambda (\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{\sigma} + m\sigma_z, \quad \vec{k} = (k_x, k_y), \quad \vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y) \quad (6)$$

などを考えてベリー曲率を計算すると図4 (ii) のようになり、上のバンド、下のバンドともにベリー曲率の大きさが $\vec{k} = \vec{k}_0$ で極大になることが分かる。もっと複雑な場合も同様であり、例えば p 型半導体では $\vec{k} = \mathbf{0}$ で重い正孔バンドと軽い正孔バンドが縮退しているため、その付近でベリー曲率が発散的に大きくなっており、スピンホール効果が大きくなることが理解できる。

なお詳しい議論をする際には、スピン流の定義が一意的でないという問題に注意する必要がある。電荷は保存するため電流は一意的に定義されるが、スピンは保存しない（スピン軌道相互作用により歳差を起こし緩和する）ため、スピン流を、スピンとの間に連続の方程式が成り立つように定義することはできない。これは言い換えると、スピン流の値はどのように観測するかにも依存し、スピン蓄積で観測するかスピン流注入で観測するかなどで一般に変わってくると考えら

れるが、半定量的なレベルでは実験方法によってそれほど区別せず「スピン流」という物理量があると考えて差し支えないと思われる。

2.2 スピンホール効果の実験とスピントロニクスへの応用

スピンホール効果の実験は、(a) 光学的観測[14, 15, 16]と(b) 電氣的観測[17, 18, 19]の2つに大きく分けられる。まず(a) 光学的観測については、(a-1) スピン蓄積量のカー効果による光学的観測と、(a-2) spin-LED による円偏光の測定、が挙げられる。(a-1) スピン蓄積量のカー効果による光学的観測[14, 15]では、半導体に電場を印加して、試料の各部分でのスピン蓄積の量をカー効果で光学的に測定している。スピンホール効果がある場合は、電場をかけるとスピン流が流れ、それが試料端にぶつかるるとスピン蓄積となることは前述のとおりである。実験の結果、試料の端に沿って一様にスピン蓄積が現れ、これはスピンホール効果によるスピン流が試料端で蓄積したものと解釈できる。

また、(a-2) spin-LED による円偏光の測定[16]においては、p 型半導体と n 型半導体とを組み合わせて発光ダイオード(LED)をつくり、p 型半導体に横向きに電場をかけてスピンホール効果でスピン偏極した正孔の流れを作る。それを n 型半導体内の電子と再結合させて、出てきた光の円偏光度を測定するというものである。発光が円偏光していれば、正孔の流れはスピン偏極している、すなわちスピンホール効果の証拠となる。結果として出てきた発光は1%程度の円偏光度を持っており、スピンホール効果の結果であると解釈される。

一方(b) 電氣的観測としては、スピンホール効果に加えて、その逆効果の測定、すなわちスピン流を系に注入した際に垂直方向に生じる電場の測定が行われている。物質としてはAl[18], Pt[17], Au[19]など種々の金属で行われている。特にPt ではシグナルが大きく室温でも測定されており[17, 19]、その効果は主に内因性であるという理論的計算がある[20]。

このスピンホール効果は、スピントロニクスへの応用の観点からも興味を持たれている。スピントロニクスとは電子のスピンを利用した高機能・高性能のデバイスを設計するエレクトロニクス分野のことである。電子スピンはいろいろな方向を向くことができ、しかもその挙動は量子力学で支配される非自明なものであるため、その利用は大きな可能性を秘めている。特に半導体を用いるスピントロニクスについては、Datta-Das スピントランジスタ[21]に代表される多様なスピントロニクスデバイスの理論的提案があり、高機能なデバイスが期待される。こうしたスピントロニクス応用においては、試料中へのスピン注入および試料内でのスピン操作を行う必要があるが、そのためには磁性体や磁場を用いてスピンを操作することが最も直接的な方法である。しかし単純に例えば強磁性を半導体に接合して電流を送り込むと、スピン偏極の大半が接合界面で失われることが多く、スピン注入効率は低い。

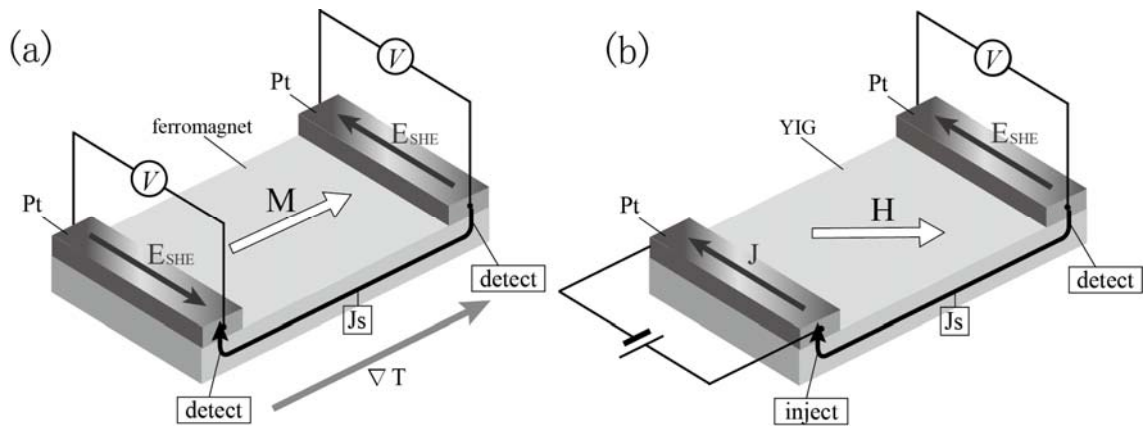


図5：スピンホール効果を用いたスピン流の注入および検出の例。(a) スピンゼーベック効果の測定[22]。(b) 強磁性絶縁体中のスピン波スピン流の伝導[23]。

このスピン注入効率向上のための方向性の一つが、スピン軌道相互作用を利用して磁性体や磁場を使わずに電氣的にスピンを制御するという方法であり、スピンホール効果はその一つに当たる。電場を使って電子の軌道運動を制御することで、スピン軌道相互作用からスピンの制御できるというのがスピンホール効果の精神であり、磁場や磁性体を使わない点が有利であると考えられる。またこの点を生かして、図5に挙げるように例えばスピン流の注入源やスピン流のプロブとして実験で使われている[22, 23]。

3. トポロジカル絶縁体

トポロジカル絶縁体(topological insulator) [24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31]は 2005 年に理論的に提唱された、非磁性絶縁体での新しい量子相であり、その後さまざまな物質において実験で観測されている。この相は2次元及び3次元系で実現されており模式図は図6のようになる。バルク(試料内部)が非磁性絶縁体でエネルギー分散にはギャップが開いているに対して、そのエッジ(2次元の場合) [24, 25, 26]や表面(3次元の場合) [28]にギャップレス、すなわち金属的な状態があるという性質を持つ。このエッジ/表面状態は純粹スピン流を運んでおり、この状態をヘリカルエッジ状態/表面状態(helical edge/surface state)と呼ぶ。このエッジ/表面状態は非磁性不純物等による散乱からトポロジカルに保護されていて、ギャップレスな性質を保つという特異な性質を持つ。このトポロジカル絶縁体は、通常の絶縁体と異なりその系の境界にギャップレス状態[32, 33]が存在するため、全体としては絶縁体ではなくエッジ・表面に起因した伝導を示す。

このエッジや表面では平衡状態でもスピン流が常に流れていて、そこにもし試料に端子を付けて電場をかけると、このエッジ/表面スピン流によって、印加電場に垂直向きにスピン流が流れる。このことから、トポロジカル絶縁体は前述のスピンホール効果の絶縁体版と考えることができ、量子スピンホール系(quantum spin Hall system)ともよばれている。スピンホール効果と量子ス

ピンホール効果の関係はちょうど、ホール効果と量子ホール効果の関係と類似している。

3.1 2次元トポロジカル絶縁体

2次元トポロジカル絶縁体の一番簡単な例として、試料のエッジに沿って上向きスピン・下向きスピンの互いに逆向きに等量流れている状

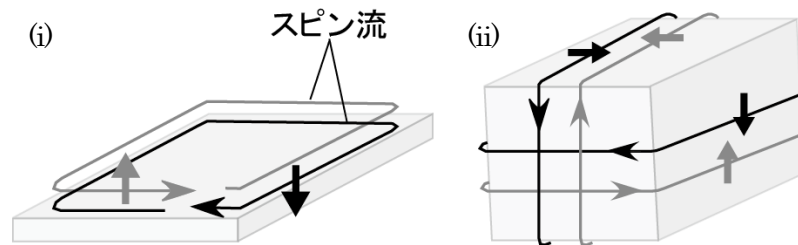


図6 : (i) 2次元および(ii) 3次元トポロジカル絶縁体の模式図

態を挙げることができる (図6 (i))。純粹スピン流は時間反転対称であるため、2次元トポロジカル絶縁体は**時間反転対称性(time-reversal symmetry)**を破っていないことが確認できる。ここで上向き・下向きスピンと述べたがこれは最も簡単な場合であって、一般には面に対するスピンの向きは物質により、またエッジ・表面の方位によって様々である。一方で全ての2次元トポロジカル絶縁体に普遍的な性質は、時計回りと反時計回りに流れているスピンが互いに逆向きであることであり、これは時間反転対称性による。すなわち、時間反転対称操作で時計回りのエッジ状態と反時計回りのエッジ状態は互いに移り合うため、これらの持つスピンの向きは互いに逆向きである。これらの2つのエッジ状態は時間反転対称性よりクラマース縮退しているため、これを**クラマース対(Kramers pair)**と呼ぶ。なお時間反転対称性が保たれていること (外部磁場ゼロ) がトポロジカル絶縁体に必要であるため、もし外部磁場を印加すると時間反転対称性を破り、トポロジカル絶縁体状態が壊れてしまう。

3.1.1 トポロジカルナンバー

トポロジカル絶縁体の何が「トポロジカル」なのかについて以下で説明をしておきたい。トポロジーというのは、ある条件の下で対象を連続的に変形する際に、互いに移り変わるものを同一のクラスとして分類する数学の分野である。例えばコーヒーカップを考える。コーヒーカップが粘土のように自由に連続的に変形できるとして、切り離したりくっつけたりすることなく変形することを考える。するとコーヒーカップはドーナツに変形させることはできても、ボールに変形することはできない。この変形が可能かどうかを特徴づけるのが穴の数 (genus とよばれる) g である。コーヒーカップとドーナツは同じ $g=1$ を持つが、ボールは $g=0$ である。この g は連続変形によって変わらない整数値をとるので、これをトポロジカル不変量ないしトポロジカルナンバーと呼ぶ。穴の数 g が異なる物体同士は、(連続変形では g が保存されるため) 互いに連続変形できないことはすぐに分かる。

トポロジカル絶縁体も同様である。トポロジカル絶縁体の場合は、バルクのギャップを閉じず

に時間反転対称性も保ったままで (つまり非磁性絶縁体のままで) ハミルトニアンを連続変形させ、互いに移り変わるかを考える。こうした変形による分類を特徴づけるのが、 Z_2 トポロジカル不変量 (topological invariant) ないし Z_2 トポロジカルナンバー (topological number) ν [25, 29, 30] である。これは2次元では $\nu = 0$ と $\nu = 1$ の2つの値をとり、 $\nu = 0$ が通常非磁性絶縁体、 $\nu = 1$ が2次元トポロジカル絶縁体に対応する。詳しい研究によると、 $\nu = 1$ の場合は少なくとも一個ギャップレスエッジ状態の対があることが分かっている、一方 $\nu = 0$ の場合はギャップレスエッジ状態が存在しないか、もしくはギャップレスエッジ状態が偶数対ある場合がある。しかし $\nu = 0$ の場合はギャップレスエッジ状態があっても、非磁性の摂動が加わるとこのエッジ状態もギャップを開ける [29, 30]。このように Z_2 トポロジカルナンバー ν はエッジ状態の情報を表している。重要な点はこれがバルクの波動関数から決まることであり、つまりこの「トポロジカル秩序」はバルクの性質である。すなわちエッジの詳細によらずバルクの性質によって、トポロジカル絶縁体か通常の絶縁体かが決まる。これらは異なる相であって、これらの相の間は非磁性絶縁体状態を保ったままでは連続変形できない。

3.1.2 例: Kane-Mele 模型

例として、Kane-Mele 模型と呼ばれる、蜂の巣格子上の tight-binding 模型を用いて、トポロジカル絶縁体相のエッジ状態の計算をした結果を示す。この模型のハミルトニアンは

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + i\lambda_{\text{SO}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} v_{ij} c_i^\dagger s_z c_j + i\lambda_{\text{R}} \sum_{\langle i,j \rangle} v_{ij} c_i^\dagger (\vec{s} \times \hat{d}_{ij}) c_j + \lambda_{\text{v}} \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i$$

という形である。 $t, \lambda_{\text{SO}}, \lambda_{\text{R}}, \lambda_{\text{v}}$ は実数のパラメタであり、 c_i, c_i^\dagger はそれぞれ i 番目のサイトの電子の消滅および生成演算子で、 $c_i^\dagger = (c_{i\uparrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger)$ のように2成分のスピンからなる。 ξ_i は蜂の巣格子のA, B副格子点でそれぞれ+1, -1という値をとる。また、 $\langle i, j \rangle$ は i と j とが最近接の格子点同士の組について和をとり、 $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ は i と j とが次近接の格子点同士の組について和をとることを意味する。また、 \hat{d}_{ij} は、 i サイトから j サイトへ向かうベクトルを単位ベクトルとしたものである。

初めてみると複雑な模型に見えるが、これは常磁性状態でスピン軌道相互作用があるという系を蜂の巣格子上で実現する場合に最も簡単な tight-binding 模型であり、パラメタを変えることでトポロジカル絶縁体相と通常の絶縁体相との両方を記述できる便利な模型であるため、理論計算によく使われる。この模型に適当なパラメタを入れて無限に大きな系でバンド構造を計算すると、例えば $\lambda_{\text{SO}} = 0.06t, \lambda_{\text{R}} = 0.05t, \lambda_{\text{v}} = 0.1t$ に対して図7(a)、 $\lambda_{\text{SO}} = 0.06t, \lambda_{\text{R}} = 0.05t, \lambda_{\text{v}} = 0.4t$ に対して図8(a)のような形のバンドが得られる。A, B副格子がありしかもスピンの向き

があるため、 2×2 で4バンド模型となっている。以下では電子数が単位胞あたり2つあるとすると、ちょうど2つのバンドを埋めるため、図7(a), 図8(a)についてはフェルミエネルギーがゼロでありバンドギャップ中にある。つまり、バンド絶縁体となっている。

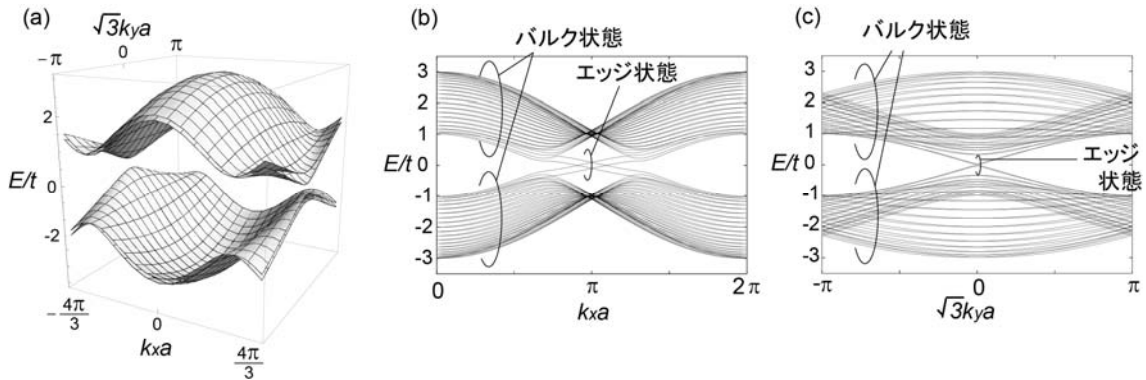


図7：リボン状の Kane-Mele 模型でのバンド構造の計算結果。パラメタ値は $\lambda_{\text{SO}} = 0.06t$, $\lambda_{\text{R}} = 0.05t$, $\lambda_{\text{V}} = 0.1t$ で、トポロジカル絶縁体相である。(a)無限系、(b) zigzag エッジを持つリボン、(c) armchair エッジを持つリボンでの計算。

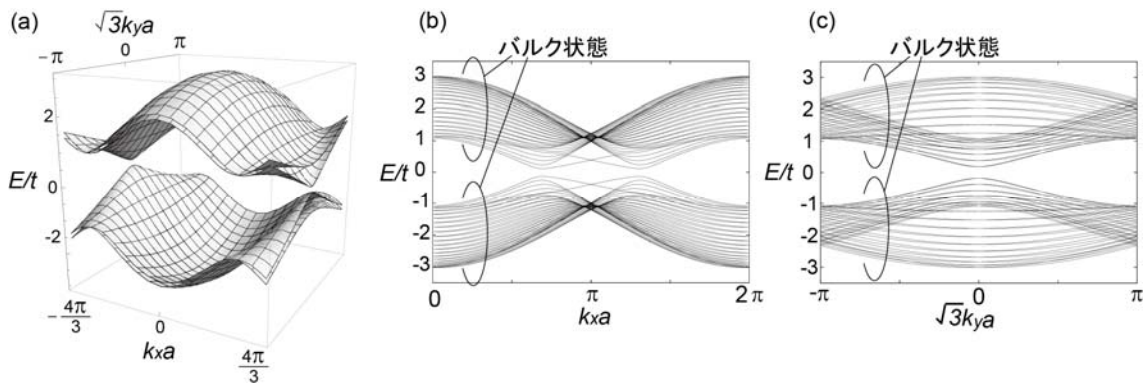


図8：リボン状の Kane-Mele 模型でのバンド構造の計算結果。パラメタ値は $\lambda_{\text{SO}} = 0.06t$, $\lambda_{\text{R}} = 0.05t$, $\lambda_{\text{V}} = 0.4t$ で、通常の絶縁体相である。(a)無限系、(b) zigzag エッジを持つリボン、(c) armchair エッジを持つリボンでの計算。

しかし実はトポロジカル絶縁体という観点で見ると両者は違っている。実は図7はトポロジカル絶縁体、図8は通常の絶縁体に相当する。例えばこの系をリボン状の形状とする。すなわちある方向には無限に長い、それと直交する方向には有限の幅をもつような系を考えてバンド計算をしてみる。どの方向に無限に長く取るかは自由度があるが、ここでは zigzag エッジと呼ばれる場合と、armchair エッジと呼ばれる場合の2種類についてプロットしてみる。図7(b)(c)ではフェルミエネルギーを横切るようなバンドが現れているのに対して、図8(b)(c)ではそのようなものは現れていない。しかも図7(b)(c)で現れた、エネルギーがゼロ付近の新しいバンドは図7(a)の計算には出てきていない。これは実は、リボン状の系のエッジ（系の端）付近に局在している

状態であり、エッジ状態であるため、図7 (a)の無限系の計算には出てきていないのである。図7 (b) (c)で分かるように、エッジの取り方(zigzag か armchair か)によらず、エッジ状態がフェルミエネルギーを横切るように存在しているのが分る。一方で通常の絶縁体相では、フェルミエネルギーを横切るようなバンドはなく、系のエッジも絶縁体であることが分る。

3.1.3 Z_2 トポロジカルナンバーの計算

以下ではトポロジカルナンバー ν はどのように計算するのかを説明する。それには大きく分けて2つの方法がある。第一の方法は、上で Kane-Mele 模型で行ったように、リボン状の系などエッジや表面を持つ形状の系(有限系)でバンド計算を行い、エッジ状態や表面状態がどのように出るかを確かめる方法である。この方法は直観的に分かりやすいが、簡単な模型についても解析計算は難しく、数値計算に頼らなければいけない部分がある。

第二の方法として、バルクの固有状態から計算する方法がある。バルクの系(無限系)の電子のバンド構造から、後述する方法でトポロジカルナンバーを計算できる。その際注意すべきことは、図7 (a)のようなバルクの系(無限系)の計算においては、系の形状にエッジや表面がないため、エッジ状態・表面状態が現れないことである。すなわち通常の絶縁体もトポロジカル絶縁体も、バルクの電子状態計算をすると同じようにギャップを開けたバンド構造が出てくるため、バルクのバンド構造を見ただけでは両者の区別がつかない。

実はトポロジカルナンバーは、バルクのシュレディンガー方程式の固有エネルギーではなく、むしろ固有状態(波動関数)の情報に反映されている。これを以下に説明する。まず準備として $\vec{k} \equiv -\vec{k} \pmod{\vec{G}}$ を満たす波数を **time-reversal invariant momenta (TRIM)** と呼ぶことにする。ここで \vec{G} は逆格子ベクトルである。2次元ブリルアンゾーンの中には TRIM が4つ $\vec{k} = 0, \vec{G}_1/2, \vec{G}_2/2, (\vec{G}_1 + \vec{G}_2)/2$ 存在する(図9 (a))。ただし、 \vec{G}_1, \vec{G}_2 は逆格子基本ベクトルで

ある。これらの TRIM を $\vec{k} = \Gamma_i$ ($i = 1, 2, 3, 4$) と書くことにしよう。トポロジカルナンバーの計算

は結晶の空間反転対称性の有無で異なるが、ここでは簡単のため空間反転対称性がある場合に話を限る(空間反転対称性がない場合でも計算はできるが、かなり話は複雑になる)。空間反転対称性がある場合は、各

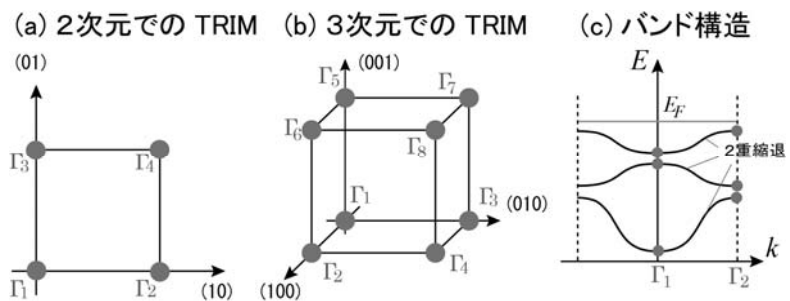


図9: (a) 2次元での TRIM、(b) 3次元での TRIM、(c) バンド構造の模式図。

TRIM は空間反転操作 ($\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$) に対して不変であるため、TRIM の波数における波動関数は

$\psi_k(-\vec{r}) = \pm \psi_k(\vec{r})$ を満たす。この±の符号を**パリティ固有値 (parity eigenvalue)**とよび、これは+1 または−1 となる。そしてエネルギーが低い状態からフェルミエネルギーまでの状態を順に $m = 1, 2, \dots, 2n$ と番号付けをし、 m 番目の状態の、TRIM $\vec{k} = \Gamma_i$ でのパリティ固有値を $\xi_m(\Gamma_i)$ と書く。 $(2m-1)$ 番目の状態と $2m$ 番目の状態は図 9 (c) に示すようにクラマース縮退しており、これらのパリティは共通である。それらを各組から 1 つずつ重複しないように (つまり $2m$ 番目の状態のみとって) パリティの積を計算する: $\delta_i = \prod_{m=1}^n \xi_{2m}(\Gamma_i)$ 。これらを 4 個の TRIM で積をとって $(-1)^\nu = \prod_{i=1}^4 \delta_i$ とする。この ν が上で述べたトポロジカルナンバーとなる。

このようにバルクの電子状態からトポロジカルナンバーが計算されてどちらの相にあるかが分かると、それによりエッジ状態の現れ方にも違いが出る。エッジ状態を調べるためにはエッジを持つような系の形状、例えば半平面状の系を考えて電子状態計算を行う。そうした半平面の系での、通常の絶縁体とトポロジカル絶縁体でのバンド構造の模式図は図 10 のようになる (なお、リボン状の形状の系では、エッジが左側・右側の 2 本あるため、エッジ状態の本数は図 10 の 2 倍現れる。これは図 7 (b) (c) に対応する)。フェルミエネルギーはバルクギャップ、つまり図 10 で伝導帯と価電子帯の間にあるとする。まず通常の絶縁体の場合 (図 10 (1))、エッジ状態がない場合も多いが、場合によってはエッジ状態を持つことも可能である。今スピン軌道相互作用がある場合はエッジの存在により空間反転対称性が破れるため、エッジ状態が図 10 (1) のようにスピン分裂する (Rashba 効果)。一方、トポロジカル絶縁体のエッジ状態は図 10 (2) のように、伝導帯と価電子帯とをつなぐようにエッジ状態が存在することである。なお今は非磁性の系を考えていて、時間反転対称性により、エッジ状態の分散は $k=0$ に関して互いに対称になっており、対応する点同士は互いに逆向きのスピン状態を示すことに注

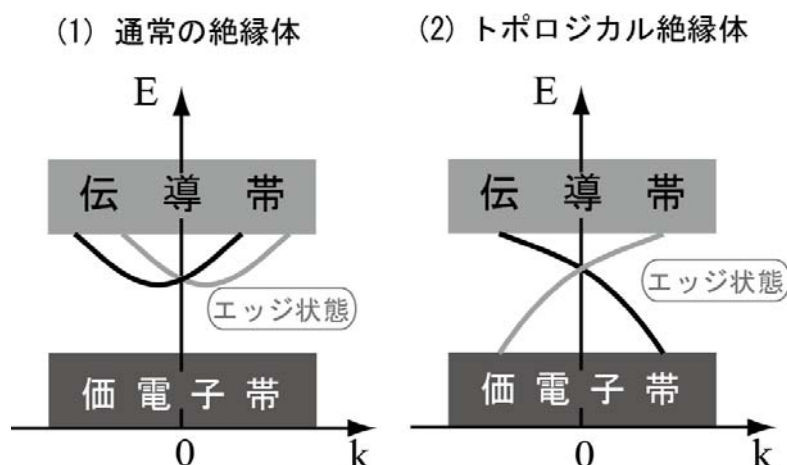


図 10 : 2次元系の場合の(1) 通常の絶縁体と(2) トポロジカル絶縁体のエッジ状態の比較。3次元系の表面状態も同様である。 $k=0$ に関して互いに対称な状態は逆向きのスピンを持つ。

意しておく。通常の絶縁体 (図 1 0 (1)) と、トポロジカル絶縁体 (図 1 0 (2)) とは、バルクのギャップが一旦閉じない限りは連続変形によって互いに移り変われない。このためこの2つは異なる相である。図 1 0 (2) では $k = 0$ でエッジ状態の分散が交差しているが、この交差は時間反転対称な摂動があっても、交差がなくなってエッジ状態のギャップが開くことはない。これは $k = 0$ ではクラマースの定理により全ての状態は2重縮退であることが要請されることによる。

(1) 2次元量子スピンホール系の半平面

(2) 3次元量子スピンホール系の表面

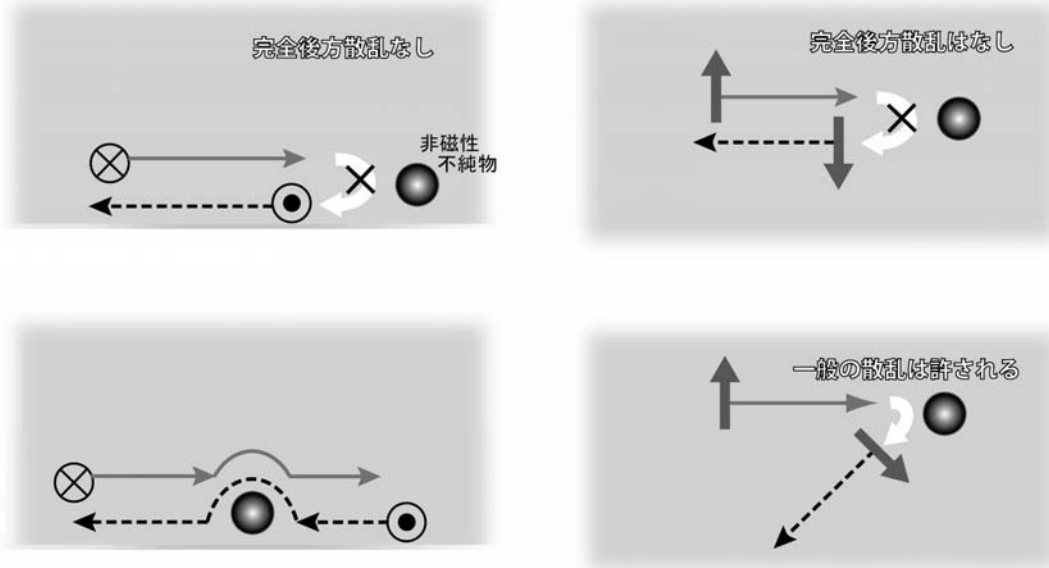


図 1 1 (1) 2次元トポロジカル絶縁体のエッジ状態と(2) 3次元トポロジカル絶縁体表面状態での非磁性不純物による散乱の比較。

もう少し正確に述べると、トポロジカル絶縁体($\nu = 1$)では、フェルミエネルギー上にあるクラマース対の数が奇数個、通常の絶縁体($\nu = 0$)では、フェルミエネルギー上にあるクラマース対の数が偶数個となり、図 1 0 ではそれが成り立っていることが分かる。図 1 0 (1) ではフェルミエネルギーの位置がギャップ内で変化すると、エッジ状態のクラマース対の数が0個になったり2個になったりするが、偶数であることには変わりがない。トポロジカル絶縁体ではクラマース対の数が奇数 (図 1 0 (2) では1個) であり、0は奇数でないことからこの場合は必ずギャップレスエッジ状態が存在することがいえる。実験では光電子分光や輸送現象の測定などで表面状態・エッジ状態のバンド構造が分かれば、そこから上の基準によりトポロジカルかどうかの区別ができる。

なお、エネルギー分散の傾きは速度を表わしている：

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (7)$$

そのため、図 1 0 (2) において、フェルミエネルギー上の状態は、逆向きに伝搬する逆向きのスピ

ンからなっており、純粋スピン流を運んでいることになる。このエッジ状態は、**非磁性不純物による後方散乱を受けない**という性質がある[32, 33] (図1 1 (1))。エッジ状態は互いに逆向きのスピンの逆向きに伝播する状態の対であるため、後方散乱にはスピン反転が必要であるが、非磁性不純物はスピン反転を起こせない。これを図1 0 (2)に対応させて述べると、不純物は弾性散乱を引き起こすため、ある状態から、同じエネルギーを持つ別の状態への散乱を引き起こす。一方でトポロジカル絶縁体の場合同じエネルギーを持つエッジ状態は互いにスピンの逆であり、これらの間の非磁性不純物による散乱は禁止される。このようにエッジ状態は非磁性摂動に対して安定で、後方散乱が起こらずギャップレスのままである。これはエッジ状態の**トポロジカル保護 (topological protection)**と呼ばれる。こうした散乱に対する性質は HgTe 量子井戸系で実際に観測されている[34, 35]。ここでもエッジに強磁性体が近接すると、エッジ状態の時間反転対称性が破れるためエッジ状態にギャップが開く。そこで、エッジに沿って2つの強磁性体を少し離して接合すると、その2つの強磁性体の磁化の向きに依存して分数電荷 (1個の電子の電荷に満たない電荷量) がその間にトラップされるという理論予言があり、これはトポロジカル絶縁体固有の特徴の一つである[36]。

トポロジカル絶縁体を実現するための必要条件を挙げると、(i)時間反転対称性を持つこと、(ii)強いスピン軌道相互作用、の2つである。(i)の条件は、ゼロ磁場で非磁性であると言い換えてもよい。(ii)の条件に関して、スピン軌道相互作用がゼロである絶縁体は、トポロジカルでない通常の絶縁体である。しかしスピン軌道相互作用が強いからといって必ずしもトポロジカル絶縁体ではなく、ある物質がトポロジカル絶縁体かどうかは、 Z_2 トポロジカルナンバーを実際に計算して初めて分かる。こうした理論的予言に基づいて、Bi 超薄膜がトポロジカル絶縁体となることが理論的に提案された[37]。この提案は第一原理計算でも確かめられたが、実際のBi 超薄膜では提案されている構造とは別の構造の方が実験上はわずかにエネルギー的に安定なようであり、合成はされていない。他方、後述するように HgTe 量子井戸系における2次元トポロジカル絶縁体の予言がなされ、実験でも確かめられている。

3.2 3次元トポロジカル絶縁体

3次元トポロジカル絶縁体[28, 30, 31]の場合には TRIM は図9 (b)に示すように

$$\Gamma_i = \frac{1}{2}(n_1\vec{G}_1 + n_2\vec{G}_2 + n_3\vec{G}_3), i = (n_1n_2n_3), n_i = 0,1 \quad (8)$$

の計8個存在する。これらでの指数が2次元と同様に、

$$\delta_i = \prod_{m=1}^n \xi_{2m}(\Gamma_i) \quad (9)$$

と定義される。この指数から Z_2 トポロジカルナンバーを $\nu_0, \nu_1, \nu_2, \nu_3$ の4つを定義する。 $\nu_0, \nu_1, \nu_2, \nu_3$ は0ないし1の値をとり、まとめて $\nu_0; (\nu_1\nu_2\nu_3)$ と書かれる。その定義は以下のとおりである。

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{i=1}^8 \delta_i \quad (-1)^{\nu_j} = \prod_{i=(n_1 n_2 n_3), n_j=1} \delta_i \quad (10)$$

すなわち、 ν_0 は全ての指数 δ_i の積から、他の ν_1, ν_2, ν_3 は逆格子空間でのある面上の TRIM に関する δ_i の積から定義される。その結果として $\nu_0; (\nu_1 \nu_2 \nu_3)$ は 16 通りの可能性があるため、16 個の異なる相があることになる。これは任意の方向の結晶表面に関する表面状態のフェルミ面のトポロジーの情報を与える。トポロジカルナンバー ν_0 が 1 の場合には、どの方向の表面にも必ず一枚は表面フェルミ面が存在する。すなわちどの表面にもギャップレスな表面状態が必ず存在する。一方トポロジカルナンバー ν_0 が 0 の場合には、特定の表面方向については表面フェルミ面が一枚もなく、表面状態がギャップを開けている可能性がある。これより $\nu_0 = 1$ の場合を**強いトポロジカル絶縁体 (strong topological insulator, STI)**、 $\nu_0 = 0$ の場合を**弱いトポロジカル絶縁体 (weak topological insulator, WTI)** と呼ぶ。また、 ν_1, ν_2, ν_3 は結晶の各結晶面に対してどのようにフェルミ面が現れるかという情報を持っている量である。このことを詳しく述べると以下ようになる。ある結晶表面上の表面状態を知りたい場合は、バルクのブリルアンゾーンからその面に対応する表面ブリルアンゾーンへと射影を行う。するとバルクの TRIM は表面での TRIM へと射影され、その際に同じ表面 TRIM へと射影される TRIM の指数 δ_i 同士を掛け合わせる。そうしてできた指数の積は、各表面 TRIM に対し ± 1 となる。そこから表面状態のフェルミ面に関する情報が

- 指数の積が同じ点同士の間には偶数枚の表面フェルミ面。
- 指数の積が異なる点同士の間には奇数枚の表面フェルミ面、

となることが知られている。これにより表面フェルミ面に関する情報が得られる。このことから、 $\nu_0 = 1$ の場合はどの表面でも必ず表面フェルミ面が 1 枚以上あることがいえる。

例えば Bi_2Se_3 や Bi_2Te_3 の場合には、バルクのバンド計算からトポロジカルナンバーは 1; (000) と計算されている。この場合 (111) 表面の表面 TRIM は Γ 点 1 個と M 点 3 個からなるが、この面へ射影された指数の積は Γ 点のみマイナスで他はプラスとなる (なおゲージの取り方を変えるとプラス・マイナスが入れ替わるが、以下の結論は変わらない)。そのため、最も簡単な可能性としては、 $k = 0$ (Γ 点) のみを囲む一枚の表面フェルミ面があることが考えられる。実際実験や第一原理計算で得られた表面状態は、図 1 2 にあるように近似的に線形な分散を持つディラックコー

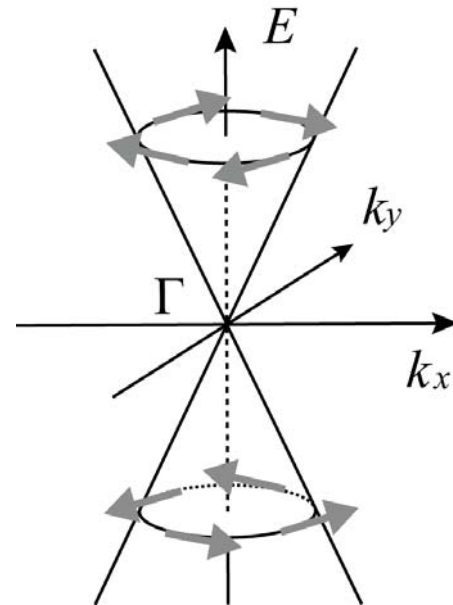


図 1 2 : 3次元トポロジカル絶縁体の表面状態の一例であるディラックコーン型分散。

ンとなっていて、確かに $k = 0$ (Γ 点) のみを囲む一枚の表面フェルミ面があり、トポロジカルナンバからの計算結果と合致している。波数 \vec{k} の1次までで書くと、ハミルトニアンは

$$H = \lambda (\vec{\sigma} \times \vec{k})_z = \lambda \begin{pmatrix} 0 & k_y + ik_x \\ k_y - ik_x & 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

と書ける。ここで $\vec{k} = (k_x, k_y)$ は表面方向の波数であり、 z は表面の法線方向を表わす。これを対角化すると、エネルギーは $E = s\lambda k$, $s = \pm 1$ でディラックコーンを形成していて、その固有状態は

$$\psi_{s\vec{k}} \propto \begin{pmatrix} 1 \\ -is(k_x + ik_y)/k \end{pmatrix} \quad (12)$$

となる。これから $\langle \psi | \vec{\sigma} | \psi \rangle = s \left(\frac{k_y}{k}, -\frac{k_x}{k}, 0 \right)$ となり、スピンの向きは図9のように、波数 \vec{k} に垂直な向きに巻いている。なおディラックコーン状の分散はグラフェンでも見られるが、グラフェンの場合は

(a) スピン縮退している、

(b) ブリルアンゾーン内に2か所 (K, K' 点) ディラックコーンがある、

という2点でトポロジカル絶縁体と異なっており、これがさまざまな物性の違いを生み出す。特にトポロジカル絶縁体のディラックコーンはスピン縮退がなく、各状態が決まったスピン状態を持つことから、スピンに関係した特異な物性現象が期待される。またディラックコーンがブリルアンゾーン内に1個のみという状態は、純粋な2次元系では実現されないことが示されており、トポロジカル絶縁体表面でのみ実現される特異な状態である。

3.3 表面状態の特異な性質

3次元トポロジカル絶縁体の輸送特性の模式図は図11(2)のようになる。前述のように、2次元トポロジカル絶縁体(図11(1))では互いに逆向きスピンの状態が逆向きに伝播していて、非磁性不純物は一切後方散乱を起こさない。他方3次元トポロジカル絶縁体(図11(2))では、完全後方散乱(180度向きを変える散乱)は時間反転対称性で禁止されるが、他の後方散乱(180度でない角度の散乱)は禁止されないため、結果として伝導は拡散的になる。なおディラックコーンが1個という特異性により、不純物が増えてもアンダーソン局在を起こさないと理論的に提唱されている[38, 39, 40]ため、拡散的であっても伝導の特異性は残っている。

ディラックコーンの円錐の頂点での縮退は時間反転対称性によるクラマース縮退であるため、例えばこの表面に磁場印加や磁性膜付加を行うと時間反転対称性が破れて、ディラックコーンの頂点にギャップが開く。それを見るため例えば式(10)で表面に垂直な磁場をZeeman分裂として入

れると

$$H = \lambda (\vec{\sigma} \times \vec{k})_z - B \sigma_z \quad (13)$$

となり、このエネルギー固有値は

$$E = \pm \sqrt{\lambda^2 k^2 + B^2} \quad (14)$$

で確かにエネルギーには $2|B|$ のギャップが開くことになる。

この状態でギャップ中にフェルミエネルギーが有る場合には、

表面のホール伝導率は $\sigma_{xy} = \pm e^2/(2h)$ となり、(通常の量子

化値の半分の) 量子ホール状態が実現することが分かる

[41, 42]。またこれを用いると、ME 効果 (電気磁気効果) を

生み出すことができる [41, 42]。その例として図 1 3 のように、

円筒状のトポジカル絶縁体に強磁性体膜を貼り付け、その

磁化は放射状外向きである場合を考えよう。このとき、トポ

ロジカル絶縁体の円筒側面の表面状態は、もともとはギャップレスだったものが、磁性膜により

ギャップが開いている。ここで電場 E を軸方向にかけると、円筒側面でのホール効果により電流

が円筒側面を周回する方向に流れ、これは円筒軸方向に磁化を生み出す。ホール伝導率の値から

磁化を計算するとそれは $\frac{e^2}{2h} E$ となり、普遍定数のみで ME 効果が表わされることが分かる。

また別の興味深い理論的予想として、トポジカル絶縁体中の結晶転位 (らせん転位や刃状転

位など) にはギャップレス (金属的) な 1 次元状態ができるという予想がある [43]。この状態は

スピン流を担い、互いに逆向きのスピンの逆向きに伝播する状態対からなる。結晶転位に沿った

一次元的ギャップレス状態が存在する条件とは、その転位のバーガースベクトル \vec{B} と Z_2 トポジ

カルナンバーが次の式を満たすことである。

$$\vec{B} \cdot \vec{M} \equiv \pi \pmod{2\pi}, \quad \vec{M} = \frac{1}{2} (\nu_1 \vec{G}_1 + \nu_2 \vec{G}_2 + \nu_3 \vec{G}_3) \quad (15)$$

具体的に述べると、例えば $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ ($0.07 < x < 0.22$) では $\vec{M} = \frac{1}{2} (\vec{G}_1 + \vec{G}_2 + \vec{G}_3)$ であるため、

転位によっては 1 次元ギャップレス状態が付随する。一方、 Bi_2Se_3 や Bi_2Te_3 では $\vec{M} = 0$ なので転位には 1 次元ギャップレス状態が付随しない。

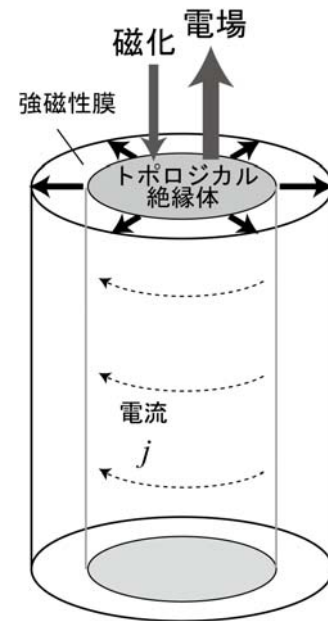


図 1 3 : 3 次元トポジカル絶縁体による電気磁気効果。

3.4 トポロジカル絶縁体に関する実験

3.4.1 2次元トポロジカル絶縁体：HgTe 量子井戸

トポロジカル絶縁体の初めての実験的検証はCdTe/HgTe/CdTe 量子井戸[44, 34, 35, 45]におけるものであり、理論的予言[44]の後、コンダクタンス測定[34, 35]で実証された。CdTe はGaAs などと同じく通常の立方晶の半導体であるが、HgTe は強いスピン軌道相互作用のために、通常の半導体と比べるとバルクの伝導帯と価電子帯の対称性が逆転している反転ギャップ半導体である。そのバンド構造は、 $\vec{k}=0$ においてギャップが閉じているゼロギャップ半導体となっていて、この $\vec{k}=0$ での価電子帯と伝導帯との縮退は立方対称性に起因する。このためHgTeの層をCdTeで挟んだ量子井戸構造をつくと立方対称性がなくなり、ギャップが開く。このとき、HgTe層の厚さ d が $d_c=60\text{\AA}$ 以上になるとHgTeに類似したバンド構造になって、 $d_c=60\text{\AA}$ 以下だとCdTeに類似したバンド構造になることが計算で分かっている。その結果を用いて、トポロジカルナンバを計算した結果、 $d > d_c$ と $d < d_c$ がそれぞれ2次元トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体であることが理論的に提唱された[44]。

この系ではゲート電圧を変化させてフェルミエネルギーを変化させることができ、フェルミエネルギーがバルクギャップ中にあるようにしたとき、2次元トポロジカル絶縁体となる。このとき両側のエッジ状態からの寄与により2チャンネル分(図14) $2e^2/h$ の電気伝導度を示すと予想される。実験結果はその通りになり、確かに後方散乱を受けないエッジ状態が存在することが実証された[34]。なお、磁場をかけると後方散乱が許されるようになるため、コンダクタンスは急速に小さくなると理論的に予想され、実験結果もそれと合致している[34]。またエッジ状態の非局所伝導、すなわち電流端子・電圧端子をさまざまに変えて実験した測定が行われた。理論的にはエッジでの伝導が弾道的伝導と仮定するとLandauer-Büttiker公式を用いて、任意の端子の配置に対して非局所コンダクタンスの値を計算でき、その値は端子の配置に応じて e^2/h に簡単な分数をかけたものになる。実験結果[35]はそれと一致していて、エッジ状態では逆向きのスピが互いに逆向きに弾道的に伝搬していることが確認された。

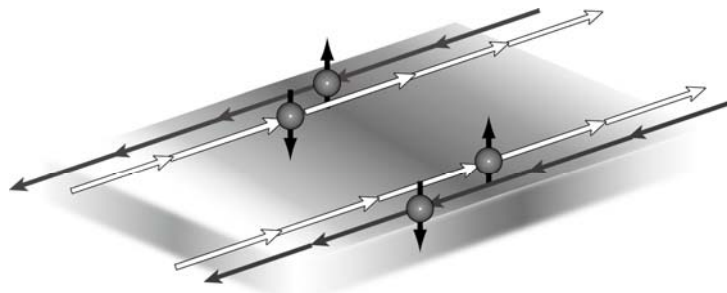


図14：2次元トポロジカル絶縁体のエッジ伝導。両側のエッジで合計2チャンネル分の量子伝導となる。

3.4.2 3次元トポロジカル絶縁体：Bi_{1-x}Sb_x合金

ビスマス(Bi)はスピン軌道相互作用が大きい半金属であり、非常に小さな電子ポケットとホールポケットを持つ。キャリアがあるので絶縁体ではないがキャリア密度が非常に小さく絶縁体に

非常に近いので、何らかの操作で絶縁体化できればトポロジカル絶縁体になる可能性があると思われる。その一つの方法は薄膜にすることであり、前述のように **Bi 超薄膜**が2次元トポロジカル絶縁体になると理論的に予想された[37]。別の方法はBiにSbをドーピングして $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ とすることである。するとキャリアポケットが消失し、 $0.07 < x < 0.22$ において3次元トポロジカル絶縁体になることが予想されている[46]。この場合はTRIMのうち、L点で指数が+1、他のTRIMでは-1となっている。 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ は(111)面でへき開するため(111)表面を考えると、表面TRIMでの指数は Γ 点で+1、3個のM点で-1となる。そのため表面ブリルアンゾーンにおいては、 Γ 点とM点の間で奇数枚のフェルミ面があると予想される。**角度分解光電子分光(ARPES)**による表面状態のバンド構造測定実験では確かにこの間に5枚[47]ないし3枚[48]のフェルミ面が観測され、これが3次元トポロジカル絶縁体の最初の実験的報告となった。**スピン分解角度分解光電子分光**[48]も行われ、表面のスピン状態がトポロジカル絶縁体であることを保証している。

またトポロジカル絶縁体のエッジ・表面状態は時間反転対称性がある限り、後方散乱を受けないと予測され、これも**STM/STS**によって確認されている。STSイメージのフーリエ変換をとることで表面の不純物などによる散乱がどのような波数の状態間で起こるか解析できて、その実験結果は、表面状態がスピン分裂していると考えて初めて説明できる結果となっている[49]。

なお、輸送現象の実験も行われていて[50, 51, 52]、表面キャリアの輸送を測定する試みが行われているが、 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ では試料の均一性など外的な要因により、まだバルクが完全に絶縁体になっておらず一部導体となってしまっており、このバルクキャリアも輸送現象に関与しているため、表面のみの伝導の測定には至っていない。

3.4.3 3次元トポロジカル絶縁体： Bi_2Se_3 、 Bi_2Te_3

3次元トポロジカル絶縁体として Bi_2Se_3 および Bi_2Te_3 が近年盛んに研究されている[53, 54, 55, 56]。これらの物質は $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ に比べてバンドギャップが大きく(最大の Bi_2Se_3 で0.3eV)、室温でもトポロジカルな性質が残ることが予想されている。表面状態のフェルミ面は図12に示したように、 $k=0$ 点を囲む円となり、これは各点で決まったスピン方向(図12矢印で示す)を持っている。分散はディラックコーンを形成し、光子のように一定の速さで表面を運動する。なおこの場合の Z_2 トポロジカルナンバーは1;(000)[53]であり、これは前述のように、実際の表面状態である Γ 点を囲む円状のフェルミ面と一致している。

これらの物質の表面状態は角度分解光電子分光[54, 55, 56]で検証されている。スピン方向についてもスピン分解角度分解光電子分光で測定されており[54]、理論的に予想されるものと一致している。さらにSTS測定によりその表面状態がトポロジカルに保護された形での散乱しか受けないことも示される[57]など、多くの実験上の発展がある。なお Bi_2Se_3 については、フェルミエネルギーがディラック点から離れると、フェルミ面は円からずれて、雪の結晶の形のような6個の角がある形になり[58]、これはフェルミ面のワーピングと呼ばれ、理論的な対称性の議論とも合

致している [59]。

そして最近では三元ホイスラー合金 (LuPtSb 等) [60, 61]、 TlBiSe_2 などが新しくトポロジカル絶縁体として提唱され、後者は(111)面でのディラックコーンが実験で実証される[62, 63, 64]など、次第に物質の幅が広がってきており今後の発展が楽しみである。

3.5 3次元トポロジカル絶縁体とマヨラナフェルミオン

2次元トポロジカル絶縁体の場合と同様に、3次元トポロジカル絶縁体の表面に強磁性体をつけると、表面状態にギャップが開く。このディラックコーン状態はスピン縮退していないため、そのギャップの開き方には、スピンの性質を反映した特異な現象がみられる。例えば表面を xy 平面としたとき、 $+z$ 向きの磁化の強磁性体と $-z$ 向きの磁化の強磁性体を隣接してつけると、その間にはギャップレスカイラル状態、すなわち一つの向きのみに進むギャップレス状態が形成されると予想されている。

一方、超伝導体をつけると超伝導体からの近接効果によって、やはり同様に表面状態にギャップが開く。こうした超伝導体との接合はマヨラナフェルミオン (Majorana fermion) と呼ばれる特異な状態を生み出すことが知られている。例えば超伝導を接合した場合の磁束渦や、もしくは表面に強磁性体と超伝導体を隣接して接合した際の隙間などに、このマヨラナフェルミオンが現れる [65, 66, 67, 68, 69, 42]。このマヨラナフェルミオンは1個のフェルミオンの半分に対応する自由度を持ち、これは、元の表面ディラック電子がスピン縮退しておらず通常の電子ガスなどと比べて状態数が半減していることによる。マヨラナフェルミオンはフェルミオン1個を非局所的に2個に引き離れたものにあたり、デコヒーレンスに強い量子計算への可能性などから注目されている。

こうした現象を実現するためには、例えば Bi_2Se_3 との相性が良い超伝導体・強磁性体、言い換えると接合によってトポロジカル絶縁体表面状態に大きなギャップを開けるような超伝導体・強磁性体が必要である。そういった目的のために、 Bi_2Se_3 に Cu をインターカレートして超伝導体にしたり [70, 71]、また磁性元素のドーピングにより強磁性を発現させたり [72, 73] という試みがあり、今後のマヨラナフェルミオンの実験的観測が期待される。

3.6 トポロジカル絶縁体の物質探索に向けて

例えばバルクギャップが開いた通常の (非磁性) 絶縁体を考えて、仮想的にスピン軌道相互作用を強くしていく過程を考える。場合によっては元のバンドギャップがスピン軌道相互作用によって徐々に閉じていき、一旦閉じてまた次第に開くということが起こる。この過程においては伝導バンドと価電子バンドの状態の対称性が入れ替わることになる。こうした過程をバンド反転と呼び、多くの場合においてこれはトポロジカルナンバールの変化を伴う。例えば HgTe 量子井戸で HgTe 層の厚さを変化させた場合はこのようなことが起こっている。これを理解するためには、ト

ポロジカルナンバーの計算方法を思い出せばよい。前述のように、2次元系での Z_2 トポロジカルナンバー ν の計算方法では、フェルミエネルギー以下の状態のTRIMでのパリティ固有値の積が $(-1)^\nu$ ということであった。HgTe量子井戸では、価電子バンドと伝導バンドの Γ 点でのパリティが逆である。ここでHgTe層の厚さを変化させると両バンドのエネルギーの大小関係が入れ替わり、その際にギャップが一旦閉じるため、それに付随してパリティ固有値の入れ替わりが起こり、 Z_2 トポロジカルナンバー ν が変化することになる。

このように元のギャップの大きさよりスピン軌道相互作用が大きくなれば、トポロジカル絶縁体になる可能性がある。結果としてできたトポロジカル絶縁体のギャップのサイズは基本的にそれらの差で与えられると予想される。スピン軌道相互作用のエネルギースケールが最大で数百meVであることを考えると、結果としてできるトポロジカル絶縁体のギャップはせいぜい数百meV程度で、ナローギャップ半導体に属するものと考えられる。なおトポロジカル保護の強さはバルクギャップの大きさサイズで決まり、例えば温度や不純物によるエネルギースケールがそれより小さければトポロジカル絶縁体としての性質は保持されるため、ギャップサイズは大きい方がよいといえる。

なおナローギャップ半導体という点では高効率の熱電変換材料物質と性質が重なるため、それらの物質群はかなり重複しており、それらの間の物理的性質の関係も議論されている[74]。

4. まとめ

純粹スピン流という単純なアイデアから、スピンホール効果・トポロジカル絶縁体など新しい分野が生まれて実験・理論両面にブレイクスルーが生まれてきているのは意外である。特に非磁性絶縁体というあまり普段注目されない物質にこういった新物質相が見出されたのは、物質科学の深遠さを示す一例と思われる。スピンホール効果・トポロジカル絶縁体ともにまだ分野が始まったばかりであり、まだまだ多くの興味深い問題が残っていて、今後の理論・実験両面での発展が多いに期待される。

参考文献

- [1] S. Murakami, N. Nagaosa and S. C. Zhang, *Science* 301 (2003) 1348.
- [2] J. Sinova et al., *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004) 126603.
- [3] 村上修一、*日本物理学会誌* 62 (2007) 2; 村上修一、永長直人：*固体物理* 39(2004)27; *応用物理* 75 (2006) 342.
- [4] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, *JETP Lett.* 13 (1971) 467; *Phys. Lett. A* 35 (1971) 459.
- [5] M. V. Berry : *Proc. R. Soc. London A* 392 (1984) 45.

- [6] G. Sundaram, Q. Niu: *Phys. Rev. B* 59 (1999) 14915.
- [7] 永長直人: *日本物理学会誌* 59 (2004) 520; N. Nagaosa, *J. Phys. Soc. Jpn.* 75 (2006) 042001.
- [8] M. Onoda, S. Murakami, and N. Nagaosa: *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004) 083901.
- [9] O. Hosten, P. Kwiat, *Science* 319 (2008) 787.
- [10] H. Katsura, N. Nagaosa, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010) 066403; Y. Onose et al., *Science* 329 (2010) 297.
- [11] R. Matsumoto and S. Murakami, *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 197202; R. Matsumoto and S. Murakami, *Phys. Rev. B* 84 (2011) 184406.
- [12] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba: *JETP Lett.* 39 (1984) 78.
- [13] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki: *Phys. Rev. Lett.* 78 (1997) 1335.
- [14] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard and D. D. Awschalom, *Science* 306 (2004) 1910.
- [15] V. Sih et al., *Nat. Phys.* 1 (2005) 31.
- [16] J. Wunderlich, B. Kästner, J. Sinova and T. Jungwirth, *Phys. Rev. Lett.* 94 (2005) 047204.
- [17] E. Saitoh, M. Ueda, H. Miyajima, G. Tatara, *Appl. Phys. Lett.* 88 (2006) 182509; T. Kimura et al., *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007) 156601.
- [18] S. O. Valenzuela, M. Tinkham, *Nature* 442 (2006) 176.
- [19] T. Seki et al., *Nat. Mater.* 7 (2008) 125.
- [20] G. Y. Guo, S. Murakami, T.-W. Chen, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 096401.
- [21] S. Datta, B. Das, *Appl. Phys. Lett.* 56 (1990) 665.
- [22] K. Uchida et al., *Nature* 455 (2008) 778.
- [23] Y. Kajiwara et al., *Nature* 464 (2008) 262.
- [24] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* 95 (2005) 226801.
- [25] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* 95 (2005) 146802.
- [26] B. A. Bernevig and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* 96 (2006) 106802.
- [27] 村上修一、平原 徹、松田 巖、*日本物理学会誌* 65 (2010) 840; 村上修一、*固体物理* 45 (2010) 477.
- [28] L. Fu, C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007) 106803; J. E. Moore and L. Balents, *Phys. Rev. B* 75 (2007) 121306; R. Roy, *Phys. Rev. B* 79 (2009) 195322.
- [29] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* 74 (2006) 195312.
- [30] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 045302.
- [31] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* 82 (2010) 3045.
- [32] C. Wu, B. A. Bernevig, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* 96 (2006) 106401.
- [33] C. Xu and J. E. Moore, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 045322.

- [34] M. König et al., *Science* 318 (2007) 766
- [35] A. Roth et al., *Science* 325 (2009) 294.
- [36] X. L. Qi, T. L. Hughes, S. C. Zhang, *Nat. Phys.* 4 (2008) 273.
- [37] S. Murakami, *Phys. Rev. Lett.* 97 (2006) 236805.
- [38] P. M. Ostrovsky, I. V. Gornyi, A. D. Mirlin, *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007) 256801.
- [39] S. Ryu, C. Mudry, H. Obuse, A. Furusaki, *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007) 116601.
- [40] K. Nomura, M. Koshino, S. Ryu, *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007) 146806.
- [41] X. L. Qi et al., *Science* 323 (2009) 1184.
- [42] X. L. Qi, T. L. Hughes, S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* 78 (2008) 195424.
- [43] Y. Ran, Y. Zhang and A. Vishwanath, *Nat. Phys.* 5 (2009) 298.
- [44] B. A. Bernevig, T. L. Hughes and S.-C. Zhang, *Science* 314 (2006) 1757.
- [45] M. König, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, T. Hughes, C. X. Liu, X. L. Qi, and S. C. Zhang, *J. Phys. Soc. Jpn* 77, (2008) 031007.
- [46] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* 79 (2009) 161408.
- [47] D. Hsieh et al., *Nature* 452 (2008) 970; *Science* 323 (2009) 919.
- [48] A. Nishide, A. A. Taskin, Y. Takeichi, T. Okuda, A. Kakizaki, T. Hirahara, K. Nakatsuji, F. Komori, Y. Ando, and I. Matsuda, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 041309.
- [49] P. Roushan, et al., *Nature* 460 (2009) 1106.
- [50] A. A. Taskin and Y. Ando, *Phys. Rev. B* 80 (2009) 085303.
- [51] A. A. Taskin, K. Segawa, and Y. Ando, *Phys. Rev. B* 82 (2010) 121302.
- [52] J. G. Checkelsky et al., *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009) 246601.
- [53] H. Zhang et al., *Nat. Phys.* 5 (2009) 438.
- [54] D. Hsieh et al., *Nature* 460 (2009) 1101.
- [55] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, F. Meier, J. H. Dil, J. Osterwalder, L. Patthey, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009) 146401.
- [56] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Nat. Phys.* 5, (2009) 398.
- [57] T. Zhang et al., *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009) 266803.
- [58] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, Z.-X. Shen, *Science* 325 (2010) 178.
- [59] L. Fu, *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009) 266801.
- [60] S. Chadov et al., *Nature Mat.* 9 (2010) 541.

- [61] H. Lin et al., *Nature Mat.* 9 (2010) 546.
- [62] H. Lin, R. S. Markiewicz, L. A. Wray, L. Fu, M. Z. Hasan, and A. Bansil, *Phys. Rev. Lett.* 105 (2010) 036404.
- [63] T. Sato, K. Segawa, H. Guo, K. Sugawara, S. Souma, T. Takahashi, and Y. Ando, *Phys. Rev. Lett.* 105 (2010) 136802.
- [64] K. Kuroda, M. Ye, A. Kimura, S. V. Ereemeev, E. E. Krasovskii, E. V. Chulkov, Y. Ueda, K. Miyamoto, T. Okuda, K. Shimada, H. Namatame, and M. Taniguchi, *Phys. Rev. Lett.* 105 (2010) 146801.
- [65] A. R. Akhmerov, J. Nilsson and C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009) 216404.
- [66] L. Fu, *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010) 056402.
- [67] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 096407.
- [68] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* 79 (2009) 161408(R).
- [69] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009) 216403.
- [70] Y. S. Hor, A. J. Williams, J. G. Checkelsky, P. Roushan, J. Seo, Q. Xu, H. W. Zandbergen, A. Yazdani, N. P. Ong, and R. J. Cava, *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010) 057001.
- [71] L. A. Wray, S-Y. Xu, Y. Xia, Y. S. Hor, D. Qian, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Nat. Phys.* 6 (2010) 855-859.
- [72] Y. S. Hor et al., *Phys. Rev. B* 81 (2010) 195203.
- [73] Y. L. Chen, J.-H. Chu, J. G. Analytis, Z. K. Liu, K. Igarashi, H.-H. Kuo, X. L. Qi, S. K. Mo, R. G. Moore, D. H. Lu, M. Hashimoto, T. Sasagawa, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z. X. Shen, *Science* 329 (2010) 659.
- [74] R. Takahashi, and S. Murakami, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 161302(R).