

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年5月24日現在

機関番号：12101

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2009～2011

課題番号：21540378

研究課題名（和文）量子スピンホール効果の微視的研究：
時間反転対称性とトポロジカル不変量研究課題名（英文）Microscopic study of quantum spin Hall effect:
Time-reversal symmetry and topological invariants

研究代表者

福井 隆裕 (FUKUI Takahiro)

茨城大学・理学部・教授

研究者番号：10322009

研究成果の概要(和文):量子スピンホール効果は新しく発見されたトポロジカル物質であるが、この概念を一般化した「トポロジカル絶縁体・超伝導体」の研究が最近活発となっている。その中でもトポロジカル絶縁体・超伝導体に導入された欠陥とゼロモード出現の関係に関する研究を主として行った。具体的には、指数定理と呼ばれる数学的に厳密な定理を時間反転対称な系に拡張したり、ディラック粒子による超伝導体の欠陥の周りのゼロ状態に適用した。

研究成果の概要(英文): The spin Hall effect is a newly-discovered topological matter. The concept of topological matter has quite recently been generalized to “topological insulators and superconductors”, and attracting much current interest. In particular, I study the relationship between the defects and emergence of zero modes, using so-called index theorems. To be concrete, I extend the index theorem to time-reversal invariant systems, and also apply the index theorem to superconductors of Dirac fermions with various kinds of defects.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2010年度	600,000	180,000	780,000
2011年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	2,100,000	630,000	2,730,000

研究分野：物性理論

科研費の分科・細目：数理物理・物性基礎

キーワード：量子ホール効果、量子スピンホール効果、トポロジカル絶縁体・超伝導体、ディラック演算子、Z₂トポロジカル不変量、マヨラナ・フェルミオン、渦糸、カラー超伝導

1. 研究開始当初の背景

(1) 当初の世界的な動向：研究成果報告書を執筆中の現在(2012年5月)から考えてみると、本研究の申請時・研究開始時は、新しい研究分野「トポロジカル絶縁体・超伝導体」がまさに始まろうとしている状況であった。

① グラファイトの1層シートであるグラフ

エン(2010年ノーベル賞)における量子ホール効果が観測され(2005,6年)、研究者の興味を集めつつあった。グラフェンの素励起は、ディラック・フェルミオンで記述されるため、通常の半導体とは違った興味深い現象が見られる。

② Murakami と Nagaosa らによりスピンホール効果が理論的に予言されていたが、

その量子版である量子スピンホール効果が Kane と Mele により理論的に提案され(2005年)、グラフェンでの観測可能性について議論された。この量子スピン・ホール効果は、簡単に言うとこれまでの量子ホール効果と同じ現象が電荷ではなくスピンの自由度に関して起こることを意味している。しかし、大きく異なるのが系の持つ対称性である。量子ホール効果は強磁場のために時間反転対称性は破れているが、量子スピン・ホール効果は外部磁場が必要ないために時間反転対称性は保たれている。この差が両現象を特徴付けるトポロジカル量子数に大きな差をもたらすことが認識されつつあった。

③これらの現象が主に理論研究者の興味を引きつつあったが、Fu と Kane らによって「3次元トポロジカル絶縁体」と題する論文が発表された(2007年)。私の知る限りではこれがトポロジカル絶縁体の最初の論文である。

④以上のような状況の中で Ryu と Furusaki らによってトポロジカル絶縁体のアイデアが超伝導体にも拡張され、トポロジカルに分類された(2008年)。この論文によって研究者の興味は一気に高まり、実験的な検証も行われるようになっていった。

本研究の申請時の状況は以上の通りで、今日では多くの実験もなされているトポロジカル絶縁体・超伝導体の研究の黎明期であったと考えられる。

(2)本研究の報告者の状況：量子ホール状態を特徴付けるチャーン数というトポロジカル不変量を、その特徴(整数性、ゲージ不変性)を保って数値計算する方法を開発し(2005年)、私はこの分野の研究を開始しつつあった。この成果をグラフェンの量子ホール効果や量子スピンホール効果に応用を行った(2006,7年)。その後、量子スピン・ホール効果を特徴付ける Z_2 不変量の数学的基礎付けに非常に興味を持ち、本研究を申請するに至った。

当時はまだ「トポロジカル絶縁体・超伝導体」の一般論の重要性にはあまり気がついておらず、量子スピンホール効果の不思議なトポロジカル不変量、すなわち時間反転対称性な系の Z_2 トポロジカル不変量を、如何に数学的にきっちりと体系立てられるかに興味集中していた。

2. 研究の目的

量子ホール効果の研究の歴史は古く、多くの研究が既になされている。量子化された伝導率は各バンドから計算されるチャーン数の和として表され、チャーン数の数学的意味

もはっきりしてる。これに対して、量子スピン・ホール効果の特徴づける Z_2 不変数は、現象論としては有効であるが、その明確な数学的意味は良く分かっていない。この Z_2 数は物理量とは直接関係ないことも問題を難しくしている。

一方、我々はこの Z_2 数を格子に切ったブリルアン・ゾーン上(離散化運動量)で簡単に計算する方法を開発してある。この方法は特に反転対称性のない系に対しては極めて有効で、実際に計算可能な唯一の方法である。この方法を、例えばバンド計算などと組み合わせることによって、多くの物質で量子スピン・ホール効果を示す物質を探索することも興味深い。

以上のように、主に2つの方向性、すなわち、 Z_2 数の数学的・物理的意味を明確にするとともに、我々が既に開発している Z_2 数の簡便な数値計算法を駆使して、大規模な計算を行い新たな量子スピンホール効果物質の探索を行う、ことが当初の研究の目的である。

3. 研究の方法

研究目的に述べたように、主に2つの方向から研究を行って行くことが当初の研究方法であった。

- (1) Z_2 理論の基礎付けと一般化： Z_2 不変量の数学的基礎付けとその一般化に取り組む。
- (2) 物質探索・物性解析：我々の離散化運動量による簡便な Z_2 数の計算方法を駆使して大規模な計算を行って行く。

ところが、研究開始当初の背景でも述べた通り、研究開始時は「トポロジカル絶縁体・超伝導体」の研究の黎明期で、その後爆発的な勢いでこの分野は発展して行った。この流れで重要で新しい課題が次々と現れてきた。その中でも「トポロジカル絶縁体・超伝導体における欠陥とゼロモード、特に超伝導体におけるマヨラナ・ゼロモード」は極めて重要かつ緊急の課題として浮上してきた。したがって第3番目の課題として

- (3) トポロジカル絶縁体・超伝導体における欠陥とゼロモード：指数定理を用いて欠陥とゼロモードの関係を調べて行く。そのためには、指数定理自体も一般化して行く。

4. 研究成果

(1) 一般の次元で時間反転対称なディラック演算子を考え、その Z_2 不変量を与えた。Kane らが与えた Z_2 数は2次元であるが、我々はそれを任意の次元で与え、具体例を示した。 Z_2 数の一般化という観点からの成果である。

この研究は2009年に行われたドレスデンの国際会議でポスター発表を行い、特に Kane と議論を行って一定の評価を得た。また、こ

の時の議論で、トポロジカル欠陥とマヨラナ・ゼロモードの間の重要な関係性について知見を得て、その後の研究につながって行くことになった(論文⑦参照)。

(2)トポロジカル超伝導体における点欠陥とマヨラナ型のゼロ・エネルギー状態との関係を指数定理の観点から調べた。

Kaneらは、特に3次元における点欠陥の場合に、ベリーの位相を用いたトポロジカル不変量の計算を行って、それが非自明な場合ゼロ・エネルギー状態が現れると主張していた。確かに欠陥がトポロジカルに非自明な場合にゼロ・エネルギー状態が現れるであろうことは予測は出来るが、それが本当に数学的に正しくゼロ状態を予言しているかは決して自明ではない。

我々は、数学や物理の素粒子論(場の理論)で1960~1970年代に盛んに研究された指数定理を用いて、ゼロ状態とトポロジカル不変量との関係を求めた。まず、Kaneらはベリーの位相といういわば断熱近似に基づいた議論を行うが、指数定理はそうした近似は一切行わない。最初に、ゼロ状態を勘定する式から出発し、それを変形することによって自然とトポロジカル不変量を導いていく。これまで「トポロジカル絶縁体・超伝導体」では、各次元に応じて計算していたベリーの位相を、次元を問わずに簡便に計算できることを示した。

ある程度の評価は得られたと思うが、今にして思えば指数定理の有用性の再発見という位置づけであろう。しかし、この研究が後の非自明な研究につながっていく(論文⑥参照)。

(3)上記(2)の業績では0次元である点欠陥を考察したが、1次元の渦糸の線欠陥の場合に、どのようにゼロモードが現れるかを明らかにした(論文⑤参照)。

(4)指数定理が応用できるのは、系がカイラル対称性を持っている場合のみである。したがって、これまで考えてきた系は全てカイラル対称性を仮定してきた。しかし、素粒子論と異なり、物性系を考える上でこの対称性は必ずしも自明ではなく、むしろかなり特殊な対称性であると言えよう。

したがって、カイラル対称性を持たない系での指数定理は重要である。実際にRyuとFurusakiによるトポロジカル絶縁体・超伝導体の分類においては、時間反転対称性、粒子空孔対称性、カイラル対称性の3つの離散的対称性の有無により物質のトポロジカル相を分類しているが、カイラル対称性を持たない相ももちろん多く存在する。

我々は、その中でクラスDと分類される、トポロジカル超伝導体の最も一般的な相(粒子空孔対称性のみ持つ)に属するディラック・フェルミオン模型に対して、これまでの

指数定理を拡張して適用し、Z₂不変量を計算した。

アイディアは単純だが、計算は極めて煩雑・複雑で、現実的に有用かどうかは判断が難しいが、我々にとってはこういった計算の訓練を積むことによって、次のより非自明な系への適用に道が開けた(論文④参照)。

(5)カラー超伝導中の非可換渦糸の周りのマヨラナ・ゼロモードを指数定理を用いて解析した。

この問題は新田・安井らによって調べられていたが、問題がかなり複雑なため、どのようなゼロモードが存在するかは明確には分かっていたいなかった。

我々は、指数定理を用いることによって、ゼロモードに関して、トポロジカル不変量の観点から正しいと思われるきれいな結果を導くことが出来た。その結果に基づき、今度は実際にゼロモードの微分方程式を解析して、トポロジカル不変量の結果を再現できることを示した。

本研究は、物性・素粒子・原子核と分野の異なる研究者が集まり互いに知恵を絞り、非常に複雑な計算の背後に存在した、単純かつ美しい結果にたどり着いたもので、自分ではインパクトのある結果であると信じている。ごく最近の研究成果であるので、他の研究者の評価を判断するには、もう少し時間をかけねばならないと考えている(論文③参照)。

(6)既に(2)でも述べたように、Kaneらによるベリーの位相に基づいたトポロジカル不変量と、指数定理によって計算されたトポロジカル不変量は、本来は関係のないものである。しかし、多くの場合、両者は一致する。

何故そのようなことが起こるのかを考えるために、点欠陥のある任意の次元のディラック型のハミルトニアンを提案し、厳密なゼロ・エネルギー状態の解、指数定理の応用、そして、Kaneらのベリーの位相に基づくトポロジカル不変量を計算した。その結果、厳密解と指数定理はきっちりと対応しているが、Kaneらのトポロジカル不変量は必ずしも指数には一致せず、符号のミスマッチがあることを示した(論文②参照)。

(7)これまでに見てきたように、トポロジカル超伝導体に欠陥が存在すると、マヨラナ型のゼロモードが現れ、多くの興味を引いている。このゼロモードが沢山存在すると、非可換統計に従う粒子が現れ、例えば量子計算等への応用が考えられている。

このような状況を考えて、マヨラナ粒子のみからなる多体系を考えて、その性質を議論することは興味深い。実際、Kitaevらはマヨラナ・フェルミオンと等価なスピン模型などを提案して多大な興味を引いている。

Kitaev模型は蜂の巣格子上で定義されているが、我々はより単純な正方格子上で定義

されたマヨラナ・フェルミオン模型を提案し、特に Z2 渦糸を導入した際のゼロ状態などを詳細に調べた(論文①参照)。

(8)以上述べた成果は既に論文として発表されている。これ以外に、投稿中の論文であるが、興味深い成果もある。

①トポロジカル絶縁体と超伝導体、磁性体のヘテロ構造からなる系に対して、指数定理を応用して、ゼロ状態を議論する。この系は Kane らのトポロジカル不変量は計算できないが、我々の指数定理は問題なく機能する。この系には、1次元のキルク性に起因したトポロジカルな起源を有するゼロ状態が1つ存在するが、場合によってはトポロジカルでない有限質量のモードがゼロ状態として機能しうることが分かった。これは全く非自明で大変興味深い結果である。

②これまで、様々な欠陥を考える上で外部磁場の影響は全て無視してきた。欠陥の周りのゼロ状態がトポロジカルならば、その性質は無限遠方の場の配位で決まるはずで有り、そこでは磁場の影響を無視できる、という事実が磁場を最初から無視する物理的な理由である。確かに2次元の指数定理でも、磁場を入れてもその影響はうまくキャンセルして指数には影響しないことが示されている。

しかし、2次元の指数定理を見れば分かるように、このキャンセレーションはかなり偶然に思え、本当に高次元でもこのようなことが起こるのかは決して自明ではない。

我々は、磁場を入れた欠陥を持つディラック模型に対して指数を計算し、上記のことが事実であることを確かめた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計7件)

① “Majorana fermions and Z₂ vortices on a square lattice”, K. Ejima and T. Fukui, J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) 123708 (1-4). 査読有

② “Majorana bound state of a Bogoliubov-de Gennes-Dirac Hamiltonian in arbitrary dimensions”, K.-I. Imura, T. Fukui, and T. Fujiwara, Nucl. Phys. B854 (2012) 306-320. 査読有

③ “Index theorem and Majorana zero modes along a non-Abelian vortex in a color superconductor” T. Fujiwara, T. Fukui, M. Nitta, and S. Yasui, Phys. Rev. D84 (2011) 076002 (1-18). 査読有

④ “Z2 index theorem for Majorana zero

modes in a class D topological superconductor” T. Fukui and T. Fujiwara, Phys. Rev. B82 (2010) 184536 (1-5). 査読有

⑤ “Majorana zero modes bound to a vortex line in a topological superconductor” T. Fukui, Phys. Rev. B81 (2010) 214516 (1-7). 査読有

⑥ “Topological stability of Majorana zero-modes in superconductor-topological insulator systems” T. Fukui and T. Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn. 79 (2010) 033701 (1-4). 査読有

⑦ “A Z2 index of Dirac operator with time reversal symmetry” T. Fukui and T. Fujiwara, J. Phys. A42 (2009) 362003 (1-7). 査読有

[学会発表] (計5件)

①「カラー超伝導の非可換渦糸中におけるゼロモード」藤原高德, 福井隆裕, 新田宗土, 安井繁宏, 日本物理学会 第67回年次大会 (2012年3/24-3/27, 関西学院大学)

②「Majorana Fermions and Z2 Vortices on a Square Lattice」江島恒太, 福井隆裕, 日本物理学会 第67回年次大会 (2012年3/24-3/27, 関西学院大学)

③「トポロジカル超伝導体に現れるマヨラナ・ゼロモードの安定性」福井隆裕, 藤原高德, 日本物理学会 2010年秋季大会 (2010年9/23-9/26, 大阪府立大学)

④「非可換ベリー接続と時間反転対称性」初貝安弘, 福井隆裕, 日本物理学会 第64回年次大会 (2009年3/27-3/30, 立教大)

⑤「時間反転対称なディラック演算子の Z2 指数とトポロジカル不変量」福井隆裕, 藤原高德, 日本物理学会 2009年秋季大会 (2009年9/25-9/28, 熊本大学)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

福井 隆裕 (FUKUI TAKAHIRO)

茨城大学・理学部・教授

研究者番号: 10322009