



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	メゾスコピックリング配列構造におけるスピン回転を伴う弱反局在の実空間シミュレーション手法の開発
Author(s)	澤田, 淳
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第12852号
Issue Date	2017-09-25
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k12852
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/67453
Type	doctoral thesis
File Information	Atsushi_Sawada.pdf



北海道大学大学院情報科学研究科

情報エレクトロニクス専攻

平成 29 年度 博士論文

メゾスコピックリング配列構造におけるスピン回転を伴う 弱反局在の実空間シミュレーション手法の開発

Real space simulation of weak antilocalization
with the spin precession in mesoscopic ring array

学生番号: 79145017

澤田 淳

目次

第 1 章	序論	1
1.1	背景	1
1.2	研究目的	4
1.3	論文構成	4
第 2 章	電子トランスポート概論	6
2.1	電気伝導率	6
2.1.1	ドルーデ (Drude) モデル	6
2.1.2	久保公式	7
2.2	スピン物性	8
2.2.1	スピン状態の記述	8
2.2.2	ゼーマン (Zeeman) 効果	11
2.2.3	スピン軌道相互作用	11
2.3	弱局在/弱反局在	14
2.3.1	バルク二次元電子系における弱局在/弱反局在	14
2.3.2	開放系量子ドットにおける弱局在/弱反局在	18
第 3 章	再帰経路の実空間シミュレーションとスピン干渉効果	20
3.1	“再帰” とは?	20
3.1.1	Brownian 描像と Boltzmannian 描像における再帰	20
3.2	再帰確率に基づく弱局在/弱反局在	24
3.3	ランダムウォークを用いた Monte Carlo シミュレーション	25
3.3.1	ランダムウォーク・シミュレーション	25
3.3.2	再帰判定	27

3.4	再帰経路での干渉効果	29
3.4.1	一電子の伝播関数	29
3.4.2	時間反転対称経路間の干渉	31
第 4 章	バルク二次元電子系における弱局在/弱反局在の実空間シミュレーション	34
4.1	概要	34
4.2	シミュレーション	34
4.2.1	理論	34
4.2.2	数値計算の効率化	38
4.2.3	シミュレーション条件	39
4.3	既存の弱局在/弱反局在モデルとの比較	40
4.3.1	Dmitriev モデルとの比較	40
4.3.2	Golub モデルとの比較	43
4.4	数値誤差の評価	46
4.5	Persistent spin helix 状態の解析	49
4.6	小括	51
第 5 章	メゾスコピックリング配列構造中のカオス軌道解析による電子パラメータの抽出	52
5.1	概要	52
5.2	測定試料・環境	52
5.3	微細リング配列構造中の電気伝導率の量子補正項のゲート電圧依存性	55
5.3.1	測定結果	55
5.3.2	Rashba SOI に関する Onsager の対称性	58
5.4	シミュレーション	59
5.4.1	理論	59
5.4.2	ビリヤード・シミュレーションを用いた再帰経路の計算	61
5.5	量子補正項の磁気振動のゲート電圧依存性のフィッティング解析	64
5.5.1	chaos only モデルを用いた Rashba 効果によるスピン回転角の決定	64
5.5.2	chaos+impurity モデルを用いた物性値の決定	70
5.6	chaos+impurity モデルを用いた高磁場フィッティング	75

5.7 電気伝導率の温度依存性のフィッティング解析	78
5.7.1 測定結果	78
5.7.2 位相緩和時間の温度依存性の決定	78
5.7.3 フェルミ液体論による考察	80
5.8 小括	82
第 6 章 総括	83
謝辞	85
付 録 A バルク 2DES における位相緩和時間の温度依存性	86
付 録 B 決定係数	88
付 録 C 微細リング配列構造における古典項の解析	89
付 録 D 各ゲート電圧における chaos impurity モデルでのフィッティング結果	92
参考文献	95

第1章 序論

1.1 背景

電子が持つ磁氣的自由度であるスピンを利用したデバイスの実現を目指すスピントロニクスと呼ばれる研究分野では、Datta らのスピントランジスタの提案 [1] を契機に、基礎から応用まで幅広い研究が行われている。スピントロニクスに関連する研究では、スピンと電子の軌道角運動量の間相互作用であるスピン軌道相互作用 (SOI: Spin-orbit interaction) が重要な役割を果たしている。実際、SOI はスピンのゲート制御 [2–4]、スピンホール効果 [5]、トポロジカル絶縁体 [6]、マルチフェロイック [7,8]、Edelstein 効果 [9,10]、Persistent spin helix (PSH) 状態 [11–13] などの様々な物理現象の根本を担っている。また、薄膜成長技術の進歩に伴い、IV 族 [14]、III-V 族 [2–4] 及び II-VI 族半導体 [15] だけでなく、トポロジカル絶縁体 [6]、 SrTiO_3 [16]、グラフェン [17]、シリセン [18]、遷移金属ジカルコゲナイド [19]、ワイル半金属 [20]、有機-無機ハイブリッド材料 [21] などの様々な二次元電子系 (2DES: Two-dimensional electron system) における SOI の研究の重要性が増してきている。

SOI の中でも、特に、Ohkawa と Uemura によって初めて導出された半導体のヘテロ界面のような構造反転対称性が破れている系に生じる SOI [22] (通称、Rashba 効果 [23,24]) の研究が盛んに行われている。Rashba 効果によるエネルギー分離の大きさ Δ_R は、Rashba 係数 α とフェルミ波数 k_F を用いることで、 $\Delta_R = 2\alpha k_F$ と表される。ここで、2DES において、 α は閉じ込めポテンシャル方向の内部電場 $\langle E_z \rangle$ [†] に比例し、比例定数を a_{SO} とすることで、

$$\alpha = a_{\text{SO}} \langle E_z \rangle \quad (1.1)$$

と表される [4]。図 1.1 に示すように、量子井戸ポテンシャルにおける $\langle E_z \rangle$ はポテンシャルの傾きに相当し、ゲート電圧によってポテンシャルを変調することで量子井戸内の $\langle E_z \rangle$ の大きさや符号を変調することが可能である。また、Rashba 効果が生じる系では、波数方向と内部電場の両方に垂直な方向をスピン回転軸としたスピンの歳差運動が生じる。こ

[†]量子井戸内部 (井戸外部の波動関数 $\psi(z)$ がしみだしている部分も含む) での電場 $\mathbf{E} = (0, 0, E_z(z))$ とすると $\langle E_z \rangle = \langle \psi(z) | E_z(z) | \psi(z) \rangle$ と定義される。

ここで、長さ L の電子移動に伴う Rashba 効果によるスピン回転角 θ_R の大きさは、

$$\theta_R = \frac{2\alpha m^*}{\hbar^2} L \quad (1.2)$$

となり (m^* は電子の有効質量)、ゲート電圧によって α の制御を可能とすれば、電気的な手法によるスピン制御が可能となる。例えば、Datta らのスピントランジスタでは Rashba 効果を利用したゲート電圧による電子スピン制御を仮定しており [1]、Rashba 効果のゲート制御性に関する研究を広める要因となった。

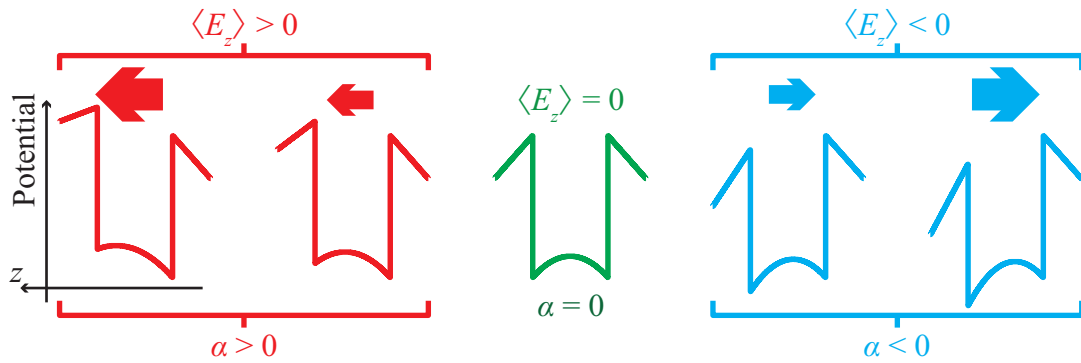


図 1.1: ダブルヘテロ接合量子井戸におけるポテンシャル図。ゲート電圧 V_g によって量子井戸ポテンシャルが変化し、内部電場 $\langle E_z \rangle$ を通して、Rashba 定数 α の大きさの制御が可能である。

Rashba 効果のゲート制御性に関する研究としては、1997 年に Nitta らの Schubnikov de Haas (SdH) 振動のビーティングの解析があげられる [2]。SOI が生じている系では、面直磁場によって生じる Landau 準位がスピン依存のエネルギー分離を起こすため、わずかに周期の異なる二つの SdH 振動が生じ、ビーティングが発生する。そのノードの位置を解析することで Δ_R を決定できる。これにより、 Δ_R のゲート電圧依存性を決定するとともに、SdH 振動から計算されるキャリア濃度からフェルミ波数 k_F を求めることで、 α のゲート電圧依存性を示した。しかしながら、SdH 振動のビーティングは、 Δ_R が Landau 準位の広がりよりも十分大きい時のみ観測可能であり、そのような試料は限られてしまうため、Rashba 効果のゲート制御性の研究にとっておおきな進歩であったが、二次元試料における汎用的な Rashba 効果の解析手法とはなり得なかった。

2002 年に Koga らはバルク 2DES (InGaAs ダブルヘテロ量子井戸) における弱局在 (WL: Weak localization) / 弱反局在 (WAL: Weak antilocalization) の解析から Rashba 効果のゲート制御性を示した [3]。WL/WAL とは、不純物散乱が生じる系において極低温下で

観測されるアンダーソン局在の前駆現象である。WL (SOIが生じる系ではWAL) では、磁場を印加することで負(正)の磁気抵抗が生じる。このようなWL/WALのような量子力学的な現象によって生じる電気伝導率の量子補正の成分を量子補正項と呼び、理論モデルを用いたフィッティング解析によって、SOIの大きさや位相緩和時間などの物性値の決定が可能である。その後、InGaAsだけでなく様々な物質でWL/WALのフィッティング解析によりRashba効果のゲート制御性が確認されている [16,25]。また、2011年にFanielらは改良されたWL/WALモデル [26] とのフィッティング解析によって決定した比例定数 a_{SO} がバンド理論から予測される値を再現することを示したことで、Rashba効果のゲート制御性の理解が大きく進んだ [4]。しかしながら、バルク2DESにおけるWL/WAL解析により決定される物性値は平均自由行程によりスケールされるため、別の測定手法を通じて平均自由行程を決定しなければならない。そのため、間接的にしかRashba効果の大きさを決定することができない。

一般的に、Rashba効果などの物性測定はバルク2DESでのトランスポート測定や光測定によって行われる。一方で、微細構造中におけるWL/WAL [27,28] や普遍的コンダクタンス揺らぎ (UCF: Universal conductance fluctuations) [29,30] は微細構造のサイズや形に依存した振る舞いを示すにも関わらず、バルク2DES本来の物性値の影響も現れるという興味深い性質を持つ。特に、メゾスコピックリング配列構造 (MRA: Mesoscopic ring array) におけるWL/WALではRashba効果によるスピン回転角の大きさによって明瞭な電気伝導率の量子補正項の変化が生じる。2004年にKogaらは、正方形の時間反転対称経路間でのスピン位相差による干渉強度がRashba効果によって変化することを示し [31]、2006年にInGaAsダブルヘテロ量子井戸、特に微細加工によって作製されたMRAでゲート電圧による電気伝導率の磁気振動として上記の干渉効果の観測に成功し、限られた範囲であるがRashba効果によるスピン回転角の大きさの決定を果たした [32]。このようなMRAにおける干渉効果による磁気振動の周期は微細リングのサイズという長さスケールによって決まり、別の測定によって平均自由行程を求める必要がないため、直接的にRashba効果によるスピン回転角の大きさを決定したと言える。さらに、2011年にMineshigeらは、エッチング界面での鏡面反射を仮定したビリヤード・シミュレーションによって干渉経路を求め、それらの干渉強度を積算することで電気伝導率の磁気振動を予測する半古典ビリヤード・シミュレーションをおこなった [33]。これにより、Rashba効果に対する電気伝導率の大きさの変化を定性的に再現することに成功した。また、このこ

とはMRAにおいて単純な正方形の干渉経路だけでなく、複雑な干渉経路が存在することを示唆した。もし、半古典ビリヤード・シミュレーションであらゆる干渉経路を考慮することで電気伝導率を厳密に再現することが可能になれば、より正確なRashba効果の決定が可能とするだけでなく、これまで困難であった位相緩和などの他の物性値の決定も可能となる。さらには、参考文献 [4, 32] や本論文で示したInGaAsだけでなく、様々な2DESにおける新たな物性値の評価方法になることも期待できる。

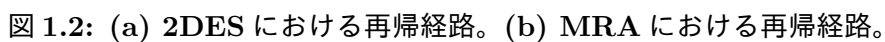
1.2 研究目的

本論文では、MRAにおけるスピン回転を伴う弱反局在の実空間シミュレーション手法を開発し、複雑な電気伝導率の磁気振動の解析を行い、物性値の決定が可能であることを示すことを目的とする。そのために、「半古典ビリヤード・シミュレーション」と「再帰確率密度」を組み合わせた新しい理論モデルを提案する。図 1.2(a) に示すように、バルク 2DES における WL/WAL では黒点から不純物散乱（赤点）を繰り返し元の位置に戻る（再帰する）経路が干渉経路となり、このような再帰経路を描く確率密度（再帰確率密度）と干渉強度から WL/WAL による電気伝導率の量子補正が計算可能である。一方、図 1.2(b) に示すように、MRA では不純物散乱だけでなくエッチング界面での鏡面反射（橙点）も生じると考えれば、同様に再帰確率を計算することで WL/WAL による量子補正として MRA 中で生じる干渉効果による電気伝導率の量子補正を計算できると考えられる。さらに、MRA という微細構造中の再帰確率は幾何学的な要素を含むため解析解の導出は困難であるが、実空間シミュレーションならば、再帰確率と干渉強度の数値計算が可能であると考えられる。また、本手法の有用性を示すために、その理論モデルを用いて MRA における電気伝導率の実験結果のフィッティング解析により、フィッティングパラメータとして物性値の決定を行い、バルク 2DES における物性値と比較を行う。

1.3 論文構成

以下に、本論文の構成を記す。

第2章にて、2DESにおける輸送現象とスピン物性の基礎について解説し、WL/WALの原理について歴史と共に解説する。



第4章にて、不純物散乱のみを考慮した実空間シミュレーションによって再帰経路と干渉強度を計算することで、既存のバルク 2DES における WL/WAL モデルを再現することを示し、実空間シミュレーションを用いた WL/WAL による電気伝導率の量子補正の計算が有用であることを示す。

最後に、第6章にて、本論文の研究内容・成果をまとめる。

第2章 電子トランスポート概論

本章では、電気伝導率の計算の基礎となる古典モデルやスピン軌道相互作用について紹介し、二次元電子系（2DES）において、量子力学に基づく干渉効果によって生じる弱局在/弱反局在（WL/WAL: Weak localization/Weak antilocalization）について解説する。

2.1 電気伝導率

電気伝導率 σ は電場 E と電流密度 j の間の比例定数として定義され、 $j = \sigma E$ となる。本論文では、電気伝導率 σ を $\sigma = \sigma_0 + \Delta\sigma$ のように、古典的な輸送論から導出可能な伝導率の古典項 σ_0 と WL/WAL などによる量子補正項 $\Delta\sigma$ の二項に分けて考える。本節では、古典項 σ_0 を導出する二つのアプローチを紹介する。

2.1.1 ドルード（Drude）モデル

電気伝導率の古典項 σ_0 は、Drude モデルと呼ばれる古典的な電子の運動に基づく理論モデルによって導出することが可能である。伝導に寄与するフェルミ準位近傍の電子は一定のフェルミ速度 v_F を持つ。一方、電子の集団を巨視的にとらえ、 N 個の電子を一つの質点とみなすと、質量 $M = m^*N$ で電荷 $-eN$ の質点とみなすことができ、一つ一つの電子は様々な方向に運動しているが平均速度 $\mathbf{v}_{\text{ave}}(t)$ で質点が運動すると考えられ、運動方程式より、

$$M \frac{d\mathbf{v}_{\text{ave}}(t)}{dt} = N(-e)\mathbf{E} - \frac{M\mathbf{v}_{\text{ave}}(t)}{\tau} \quad (2.1)$$

が成り立つとする。ここで、右辺第二項は不純物散乱によって電子の運動方向に関する情報を失わせる項であり、質点に対しては摩擦力のように働く項である。今、 $t = 0$ で平均速度 $\mathbf{v}_{\text{ave}}(0) = \mathbf{v}_0$ の時に、 $\mathbf{E} = 0$ とすると、式 (2.1) は、

$$M \frac{d\mathbf{v}_{\text{ave}}(t)}{dt} = -\frac{M\mathbf{v}_{\text{ave}}(t)}{\tau} \quad (2.2)$$

となるため、一般解 $\mathbf{v}_{\text{ave}}(t) = \mathbf{v}_0 \exp(-t/\tau)$ を得る。これは、古典的に考えると一つの電子が散乱により運動方向の情報を失う平均時間に相当していることから、 τ は運動量緩和

時間と呼ばれる。また、電場 $\mathbf{E}$ が印加されている時、定常状態 $d\mathbf{v}_{\text{ave}}(t)/dt = 0$ では、

$$\begin{aligned}\frac{M\mathbf{v}_{\text{ave}}(t)}{\tau} &= N(-e)\mathbf{E} \\ \mathbf{v}_{\text{ave}}(t) &= \frac{-e\tau}{m^*}\mathbf{E}\end{aligned}\quad (2.3)$$

となる。電流密度 $\mathbf{j}$ を $\mathbf{v}_{\text{ave}}(t)$ と単位面積当たりのキャリア濃度 $N_S [\text{m}^{-2}]$ を用いて表すことで、

$$\begin{aligned}\mathbf{j} &= -eN_S\mathbf{v}_{\text{ave}}(t) \\ &= \frac{e^2N_S\tau}{m^*}\mathbf{E}\end{aligned}\quad (2.4)$$

となる。よって、

$$\sigma_0 = \frac{e^2N_S\tau}{m^*}\quad (2.5)$$

となり、電気伝導率の古典項 σ_0 を求めることが可能である。式 (2.5) は Drude の公式と呼ばれ、トランスポート測定における重要な関係式の一つである。

2.1.2 久保公式

久保公式とは、時間依存する摂動による物理量の線形応答を表す式であり、電流-電流相関を計算することで電気伝導率 σ が得られるという直感的には理解しがたいものである [34,35]。ここでは、電流-電流相関の代わりに速度-速度相関の不純物平均 $\langle \mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{v}(t) \rangle_{\text{imp}}$ を用いると、

$$\sigma_0 = 2e^2N(0)\frac{1}{2}\int_0^\infty dt \langle \mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{v}(t) \rangle_{\text{imp}}\quad (2.6)$$

と書ける。ここで、 $N(0) = m^*/2\pi\hbar^2$ はスピン縮退がない場合の二次元の状態密度である。ところで、二次元の拡散係数 D は、

$$D = \frac{1}{2}\int_0^\infty dt \langle \mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{v}(t) \rangle_{\text{imp}}\quad (2.7)$$

と書け、これを用いることで Einstein の関係式

$$\sigma_0 = 2e^2N(0)D\quad (2.8)$$

を得る。

量子力学的な干渉を考えなければ、 $t = 0$ でフェルミ速度 v_F で伝導している電子は不純物散乱によって運動方向の情報を失うため、前述のように緩和時間近似を用いて、不純物平均をとると、

$$\langle \mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{v}(t) \rangle_{\text{imp}} = v_F^2 \exp(-t/\tau) \quad (2.9)$$

となる。よって、古典的な電子の拡散係数 D_0 は、

$$D_0 = \frac{1}{2} \int_0^\infty dt v_F^2 \exp(-t/\tau) = \frac{1}{2} v_F^2 \tau \quad (2.10)$$

となる。これを、式 (2.8) に代入し、 $v_F = \hbar k_F / m^*$ 、フェルミ波数 $k_F = \sqrt{2\pi N_S}$ の関係を用いることで、

$$\sigma_0 = 2e^2 N(0) D_0 = \frac{e^2 N_S \tau}{m^*} \quad (2.11)$$

を得る。以上のことから、量子力学的な干渉を考えなければ、久保公式と Drude の公式は同等のものとなることがわかる。

2.2 スピン物性

前節まででは、古典的な電子モデルを扱ってきたが、量子力学的な干渉を取り入れたトランスポートを考える際には電子が持つスピン自由度や電子の位相情報（波動関数）を考慮する必要がある。本節では、スピンを記述するための定義を明記にした後、ゼーマン（Zeeman）効果やスピン軌道相互作用（SOI: Spin-orbit interaction）など、スピン自由度に関するハミルトニアンについて解説する。

2.2.1 スピン状態の記述

スピン $1/2$ 系ではスピン角運動量量子数 s は $\frac{1}{2}$ であり、スピン磁気量子数 m_s は $\pm\frac{1}{2}$ である。 $m_s = \frac{1}{2}$ の状態の磁気モーメントの z 成分は $|\uparrow_z\rangle$ であり、アップスピンの状態と定義する。よって、 $m_s = -\frac{1}{2}$ の状態は、 $|\downarrow_z\rangle$ であり、ダウンスピンの状態と定義する。この定義は、各状態に対するスピン角運動量の z 成分の線形演算子 $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z$ ($\boldsymbol{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ はパウリ行列) の固有値が、

$$\hat{S}_z |\uparrow_z\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow_z\rangle \quad (2.12)$$

$$\hat{S}_z |\downarrow_z\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow_z\rangle \quad (2.13)$$

を満たしているということに等しい。本論文では、 $|\uparrow_z\rangle$ を、

$$|\uparrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

と表現し、アップスピンとダウンスピンが直交することから、ダウンスピンは、

$$|\downarrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

と表現される。また、式 (2.12) 及び式 (2.13) から、 z 方向のパウリ行列は、

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

と定義する。あらゆるスピン $\frac{1}{2}$ 状態は上記の $|\uparrow_z\rangle$ と $|\downarrow_z\rangle$ の線形結合によって表現できる。つまり、任意のスピン状態 $|\xi\rangle$ は、

$$|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a |\uparrow_z\rangle + b |\downarrow_z\rangle) \quad (2.17)$$

と書ける。ここで、 a と b は複素数であり、

$$|a|^2 + |b|^2 = 2 \quad (2.18)$$

を満たす（規格化条件）。

次に、 x 方向のアップスピン $|\uparrow_x\rangle$ 、ダウンスピン $|\downarrow_x\rangle$ を定義する。これらの状態に対する $\hat{\sigma}_z$ の期待値はゼロになるので、

$$\begin{aligned} \langle \uparrow_x | \hat{\sigma}_z | \uparrow_x \rangle &= 0, \\ \langle \downarrow_x | \hat{\sigma}_z | \downarrow_x \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

が成り立つ。つまり、式 (2.17) を用いて $|\uparrow_x\rangle$ 及び $|\downarrow_x\rangle$ を表すことで、

$$|a|^2 - |b|^2 = 0 \quad (2.20)$$

が $\hat{\sigma}_z$ の期待値がゼロになることの十分条件であることが分かる。つまり、式 (2.18) と式 (2.20) で、 $a = 1$ とした時に、実数 c を用いて $b = \exp(-ic)$ となる。本論文では、

$c = 0$ の時を $|\uparrow_x\rangle$ 、 $c = \pi$ の時を $|\downarrow_x\rangle$ と定義する。つまり、

$$\begin{aligned} |\uparrow_x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ |\downarrow_x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle - |\downarrow_z\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.21)$$

とする。また、 x 方向のパウリ行列 $\hat{\sigma}_x$ は、 $\langle\uparrow_x|\hat{\sigma}_x|\uparrow_x\rangle = 1$ 、 $\langle\downarrow_x|\hat{\sigma}_x|\downarrow_x\rangle = -1$ から、

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

となる。

同様に、 y 方向のアップスピン $|\uparrow_y\rangle$ 、ダウンスピン $|\downarrow_y\rangle$ の定義に関しては、これらの状態に対する $\hat{\sigma}_z$ と $\hat{\sigma}_x$ の期待値がゼロになることから、

$$\begin{aligned} |\uparrow_y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle + i|\downarrow_z\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \\ |\downarrow_y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle - i|\downarrow_z\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \\ \hat{\sigma}_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.23)$$

と定義する。

最後に、表 2.1 に x, y, z 座標系におけるスピン状態及びパウリ行列の記述法についてまとめる。

表 2.1: x, y, z 座標系におけるアップ・ダウンスピン状態とパウリのスピン行列の定義

	アップスピン	ダウンスピン	パウリのスピン行列
x	$ \uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$ \downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
y	$ \uparrow_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$	$ \downarrow_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$	$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$
z	$ \uparrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$ \downarrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

2.2.2 ゼーマン（Zeeman）効果

電子スピンは磁気モーメントを持っており、磁場中でスピン状態に依存したエネルギー分離が発生する。このようなエネルギー分離は Zeeman 効果と呼ばれ、Zeeman 効果を表すハミルトニアン $\mathbf{H}_Z$ は、

$$\mathbf{H}_Z = \frac{1}{2} g \mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.24)$$

となる。ここで、 g はランデの g 因子、 $\mu_B = e\hbar/2m$ は Bohr 磁子、 $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ は外部磁場である。自由電子の g 値はほぼ 2 であるが、固体中では電子の g 値は、正負を含む幅広い値を取る。Zeeman 効果を利用することで、磁場によって電子スピンの制御が行えるが、電気的手法によっても電子スピンの制御が行えるようになれば、さらなるスピントロニクス的发展が望める。

2.2.3 スピン軌道相互作用

原子におけるスピン軌道相互作用

はじめに、原子における電子軌道が持つ軌道角運動量とスピンの間での SOI について解説する。図 2.1(a) に示すように、原子番号 Z の電荷 Ze を持つ原子核を中心として半径 r の軌道上を電子が周っている描像を考える。ここで、中心座標を原子ではなく、図 2.1(b)

に示すように、電子の場所と考えると、あたかも原子核が電子の周りを周っているようにとらえることができる。ここで、Biot-Savart の法則により、電子に働く有効磁場 $\mathbf{B}_{\text{SO}}$ は、

$$\mathbf{B}_{\text{SO}} = \frac{\mu_0}{4\pi} Ze \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{v}}{r^3} \quad (2.25)$$

となる。ここで、 μ_0 は透磁率である。軌道角運動量 $\hbar \mathbf{l} = m \mathbf{r} \times \mathbf{v}$ を用いることで、

$$\mathbf{B}_{\text{SO}} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Ze}{m} \frac{\hbar \mathbf{l}}{r^3} \quad (2.26)$$

となる。電子のスピン角運動量 $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z) = (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$ の磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}_s$ は、

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{2\mu_B \mathbf{S}}{\hbar} = -\mu_B \boldsymbol{\sigma} \quad (2.27)$$

となる。よって、有効磁場 $\mathbf{B}_{\text{SO}}$ 中での磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}_s$ の電子スピンのエネルギーは、

$$-\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{\text{SO}} = \frac{\mu_0}{8\pi} \frac{Ze^2}{m^2} \frac{\hbar}{r^3} \mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.28)$$

となる。厳密には、相対的量子力学 (Dirac 方程式) を用いた導出が必要である。それによると、正しい結果は式 (2.28) の $\frac{1}{2}$ である。つまり、SOI ハミルトニアン $\mathbf{H}_{\text{SOI}}$ は、

$$\mathbf{H}_{\text{SOI}} = \frac{\mu_0}{8\pi} \frac{Ze^2}{m^2} \frac{\hbar}{r^3} \mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Ze^2}{2m^2} \frac{\hbar}{r^3} \mathbf{l} \cdot \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (2.29)$$

となる。また、静電ポテンシャル勾配 ∇U (もしくは電場 $\mathbf{E}$) が

$$\nabla U = e\mathbf{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (2.30)$$

と表わされるため、

$$\mathbf{H}_{\text{SOI}} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla U) \quad (2.31)$$

となる。

Dresselhaus SOI

式 (2.31) では、静電ポテンシャル勾配が存在する系において SOI が生じることを示しているが、静電ポテンシャル勾配は原子の束縛ポテンシャル以外にも様々な要因で生じる。その一つが、化合物半導体のような原子間で価数の偏りがある材料である。このよう

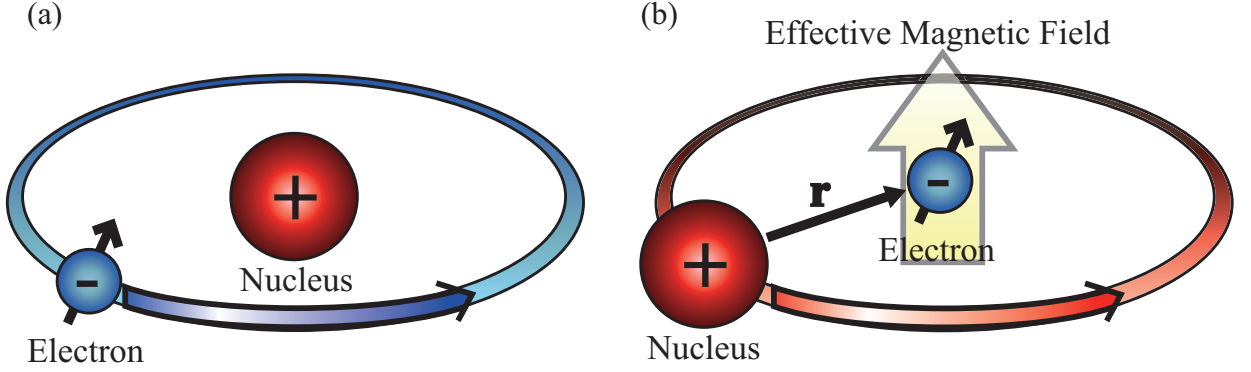


図 2.1: 古典的な描像による原子における SOI の発生メカニズムの模式図。

な系で、且つ、結晶反転対称性がない（BIA: Bulk inversion asymmetry）場合に発生する SOI を特に Dresselhaus SOI（Dresselhaus 効果による SOI）と呼ぶ [36]。二次元材料においては、Dresselhaus SOI は面内の波数に対し一乗（linear）項と三乗（cubic）項に分割される。[†] 本論文ではそれぞれを linear Dresselhaus、cubic Dresselhaus と呼び、それぞれのハミルトニアンを $\mathbf{H}_D^{(1)}$ 、 $\mathbf{H}_D^{(3)}$ とすると、

$$\mathbf{H}_D^{(1)} = \beta_1 k \{ \sigma_x \cos \varphi - \sigma_y \sin \varphi \}, \quad (2.32)$$

$$\mathbf{H}_D^{(3)} = \beta_3 k^3 \{ \sigma_x \cos (3\varphi) + \sigma_y \sin (3\varphi) \} \quad (2.33)$$

となる [4]。ここで、 $\beta_1 = \gamma (\langle k_z^2 \rangle - k^2/4)$ と $\beta_3 = \gamma/4$ は linear Dresselhaus と cubic Dresselhaus の大きさを表す係数であり、内部パラメータ γ は材料に依存した定数であり、電氣的に制御することはできない。

Rashba SOI

量子井戸などの閉じ込めポテンシャルにおける 2DES では、そのポテンシャル勾配によって SOI が生じる。このような構造反転対称性の破れ（SIA: Structural inversion asymmetry）に起因する SOI は Rashba SOI（Rashba 効果による SOI）と呼ばれる [22, 23]。

図 2.2 に示すような古典的描像によって Rashba SOI は理解することができる。まず、図 2.2(a) のような量子井戸ポテンシャル中の電子が、図 2.2(b) のように量子井戸内を x 方向

[†]厳密には波数方向を $(\cos \varphi, \sin \varphi)$ とした場合に $\exp(i\varphi)$ と $\exp(i3\varphi)$ の対称性を持った項 [式 (2.32) と式 (2.33)] に分割される。

に伝導する時を考える。量子井戸内に内部電場 $\langle E_z \rangle$ が生じるということは、図 2.2(b) のように仮想的に電子の周りにプラスやマイナスの電荷が存在すると考えることができる。図 2.2(c) のように電子を中心とした座標系で考えると、あたかも仮想的な電荷が動き、電子の周りに環電流が流れ、面内方向に有効磁場が生じているととらえることができる。このように実際に磁場を印加していなくても生じる有効磁場 B_{SO} によってスピン分離が生じるととらえることで Rashba SOI を古典的描像で説明でき、Rashba SOI によるハミルトニアンを $\mathbf{H}_R$ とすると、

$$\mathbf{H}_R = \alpha k \{ \sigma_x \sin \varphi - \sigma_y \cos \varphi \} \quad (2.34)$$

となる。ここで、 α は Rashba SOI の大きさを表す係数であり、式 (1.1) に示したようにに閉じ込めポテンシャル中の内部電場 $\langle E_z \rangle$ に比例する。そのため、図 1.1 に示すように、ゲート電圧によって内部電場 $\langle E_z \rangle$ を制御することで、スピンを電氣的に制御することが可能である。

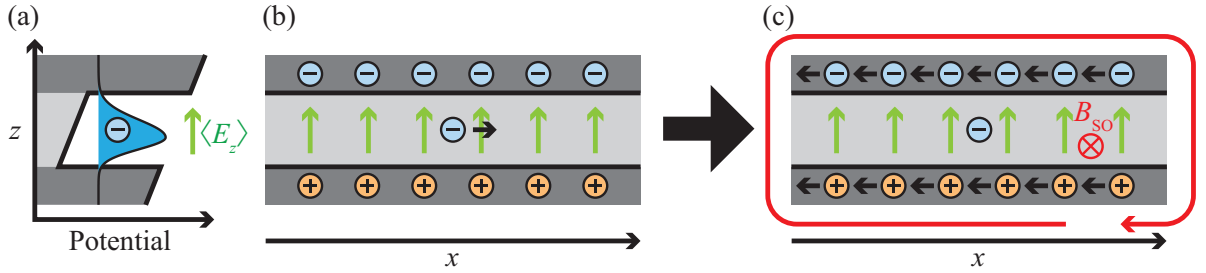


図 2.2: 古典的な描像による Rashba SOI の発生メカニズムの模式図。

2.3 弱局在/弱反局在

2.3.1 バルク二次元電子系における弱局在/弱反局在

本節では、本研究において最も重要となる WL/WAL について、歴史とともに解説する。WL とは、Anderson 局在（強局在）[37] の前駆現象としてとらえられている背景から、その名前がつけられている。一方、Anderson 局在とは異なり、WL では不規則ポテンシャルの効果が弱いため、摂動として WL を取り扱うことで定量的な議論を可能とした。実際に、1979 年に、Gorkov らは、2DES において不規則ポテンシャルの効果を摂動とし

て扱い、拡散係数 D を Feynman ダイアグラムを用いて計算することで、拡散係数 D に古典的な拡散係数 D_0 の $\hbar/2\pi E_F\tau$ 程度の量子補正が WL によって生じることを示した [38]。

さらに、1980 年に Hikami らは、WL による電気伝導率の量子補正項の磁場依存性を理論的に導出した。これにより、トランスポート測定によって電気伝導率の磁場依存性を測定し、理論モデルでフィッティングすることで位相緩和時間 τ_ϕ の決定が可能となった [39]。この理論モデルは著者の頭文字をとり HLN モデルと呼ばれる。このモデルでは、スピン反転を伴う不純物散乱によって電子が局在しにくくなる効果 (WAL 効果) を導入することで、フィッティング解析によりスピン緩和時間 τ_{SO} の決定も可能とした。Hikami らの WL/WAL モデルでは、扱いやすい解析解が与えられており、30 年以上に渡って実験結果の解析に広く使われている。

Kubo 公式を出発点として k 空間での取り扱い、及び拡散近似を施して得られた解析解は数学的には取り扱い易いものであったが、その物理的意味の直感的理解は困難を極めた。1980 年の会議 (論文としては 1982 年 [40]) にて、Khmelnitskii らは Feynman ダイアグラムが示す物理的意味に関して非常にわかりやすい描像を与えた [41]。それは次の通りである。まず、WL は半古典近似 ($\ell \gg \lambda_F$ 、ここで λ_F はフェルミ波数) が成り立つような試料において観測されるため、半古典的に固体中の電子の伝導をとらえると、電子は不純物散乱を繰り返しながら固体中を伝導しているモデルが成立することは前述通りである。しかし、量子力学的な干渉を考えると、例えば図 2.3(a) のように、途中の経路が分岐 (図 2.3(a) の例では、位置 $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_5$ の間で経路が分岐) している緑色と橙色の経路のような干渉を考える必要がある。この干渉の強度は二つの経路の経路差 ΔL によって生じる位相差 $\exp(ik_F\Delta L)$ によって決まる。しかしながら、位置 $\mathbf{r}_1$ と位置 $\mathbf{r}_5$ の間の経路は図中の経路以外にも無数に存在するため、それらの位相差が任意となってしまう、平均として干渉強度をゼロとみなせるため、実際には図 2.3(a) のような経路での伝導率の量子補正は考慮しない。一方、図 2.3(b) のように位置 $\mathbf{r}_1$ にいた電子が再び位置 $\mathbf{r}_1$ に戻るような経路 (再帰経路) では、必ず時間反転対称の経路が存在し、図中のような緑色の時計回りと橙色の反時計回りの二つの経路が干渉を起こす。この干渉経路間には、経路差は存在せず、干渉強度がゼロにならないため、電気伝導率の量子補正が必要となる。

WL/WAL において、図 2.3(d) のような電気伝導率の磁場依存性が生じる理由について説明する。SOI が存在しない系 (正確にはスピン緩和が生じない系) で観測される WL では、再帰経路における干渉は必ず強め合う干渉となる。また、二つの経路間の位相差は磁

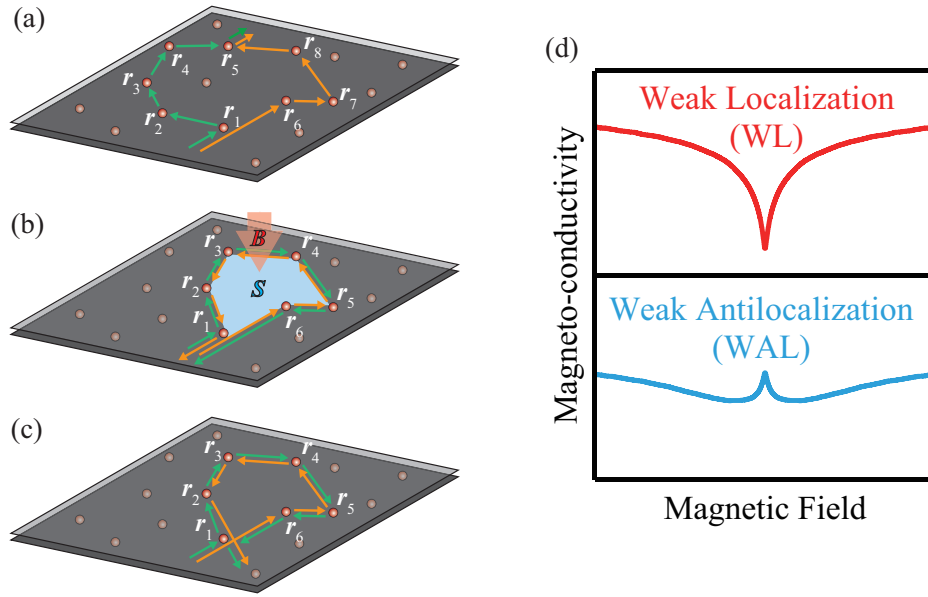


図 2.3: (a,b,c) WL/WAL の概念図。(a) のような経路間の干渉は電気伝導率の量子補正項に寄与しない。(b) は後方散乱、(c) は非後方散乱として電気伝導率の量子補正項に寄与する。(d) WL/WAL による電気伝導率の量子補正項。WL では負の磁気抵抗、WAL では正の磁気抵抗が観測される。

場 B による経路が囲む磁束 $\Phi = BS$ によって変化し、あらゆる経路に対する干渉への影響を考えると、磁場の印加は干渉を抑制する（局在を解く）働きになる。この結果、WL では図 2.3(d) のような電気伝導率の磁場依存性（負の磁気抵抗）が観測される。一方、SOI が存在する系で観測される WAL では、図 2.3(d) のような WAL による電気伝導率の磁場依存性のゼロ磁場ピーク（WAL ピーク）は電子の局在/反局在が解かれる磁場の大きさの違いによって生じる。これについて、参考文献 [42, 43] では、図 2.4 のような WAL による電気伝導率の量子補正項への寄与の模式図によって説明をおこなっている。SOI が生じている系やスピン反転を伴う不純物散乱が生じる系では、再帰経路が長くなるにつれて、時間反転対称経路間のスピン位相差が乱雑になり、スピン位相差によって生じる干渉強度が負の寄与へと変わる（電気伝導率に対しては正の寄与となる）。また、長い再帰経路ほど、広い面積を描く再帰経路になりやすい。そのため、ある面積を境（図中の黒線）に、広い面積では反局在（-）、小さい面積では局在（+）となる。さらに、広い面積を描く再帰経路は囲む磁束も大きく、磁場によって局在/反局在が解かれやすいため、はじめに反局在が解かれた後に局在が解かれる。そのため、図 2.3(d) の SOI が生じる系では電気伝導率の量子補正項で WAL ピークが観測される。

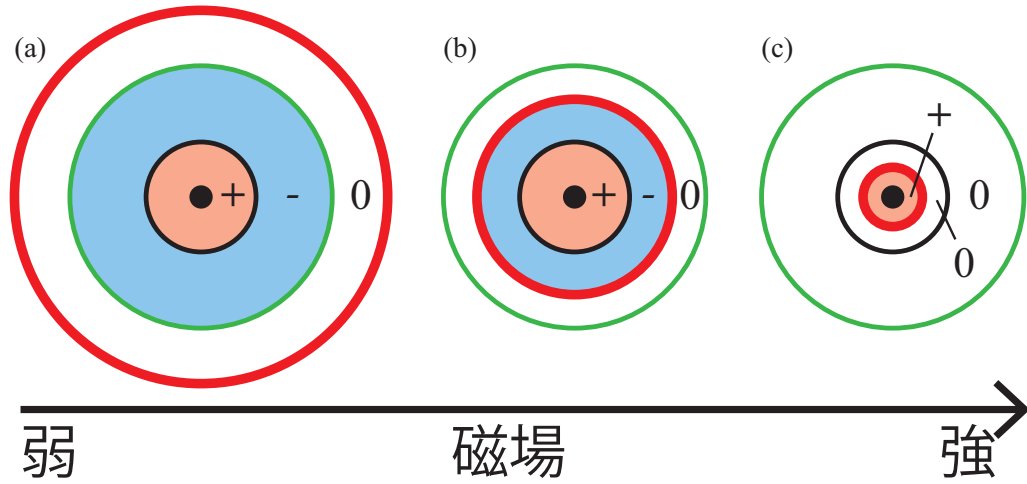


図 2.4: WAL による電気伝導率の量子補正項への寄与を表した模式図。赤線で示す円より広い面積を描く軌道は磁場によって局在/反局在が解かれる。また、磁場を強めるにつれて、小さい面積でも局在/反局在が解かれるため、赤線で示す円は小さくなる。緑線より広い面積を描く再帰経路は、再帰経路が長いため、非弾性散乱などの位相緩和の影響でほとんど干渉に寄与しない。また、SOI が生じているとき、黒線より外側では時間反転対称経路間でのスピン位相差により反局在になるため、マイナスの干渉強度になる。(a) では、磁場による局在/反局在を解く効果より位相緩和によって局在が無くなる効果が強いため、電気伝導率の変化は小さいが、(b) のように磁場を強くすると、磁場によって反局在を解く効果が強くなり、電気伝導率の減少が観測される。さらに、(c) のように磁場を強くすると、局在も解かれていくため、電気伝導率の増加が観測される。

上記の WL/WAL の描像は実験家に分かりやすく説明するという点だけでなく、実空間で WL/WAL を考える際に再帰経路とその時間反転対称経路間の干渉を考えることで伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma$ の計算が可能であることを示した点においても重要である。このような視点は、HLN モデルのような拡散近似を使う WL/WAL モデル (Diffusion モデル、他には ILP モデル [44] や Knap モデル [45] などがあげられる) が $B, B_{\text{SO}} \ll B_{\text{tr}}$ ($B_{\text{tr}} = \hbar/2e\ell^2$ はトランスポート磁場、 B_{SO} は SOI に関わる磁場) の制約を受けるという問題点を解決する一つの手がかりを与えた。

1980 年代に Kawabata は再帰経路が見出される確率、つまり、再帰確率 (Return Probability) を用いて電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma$ を計算する手法を示した [46,47]。不純物散乱を繰り返す電子の運動は二次元ランダムウォークそのものであり、ここでは拡散近似を必要としないため、 $B, B_{\text{SO}} \ll B_{\text{tr}}$ の制約は課せられない。また、このような拡散近似を用いない WL/WAL モデルは Beyond Diffusion モデルと呼ばれる。1997 年に Dmitriev

らは、Diffusion モデルが適用可能な領域では無視することができるような Feynman ダイアグラムの寄与を考慮した Beyond Diffusion モデルを提案するだけでなく、その寄与が図 2.3(c) に示すような非後方散乱であることを実空間の描像で示した [48]。2004 年に McPhile らは、様々な Beyond Diffusion モデルと HLN モデルを用いて実験結果のフィッティングから決定される物性値の比較を行い、不適切に Diffusion モデルを適用してしまうと抽出される物性値（ここでは位相緩和時間）がファクター 2 もずれる恐れがあることを指摘している [49]。2005 年に Golub は、Beyond Diffusion モデルに非後方散乱補正だけでなく SOI によるスピン緩和を取り入れた WAL モデルを提案した [26]。これにより、WL/WAL のフィッティング解析による Rashba SOI などの物性値の決定がより正確に行われるようになった [4]。

2.3.2 開放系量子ドットにおける弱局在/弱反局在

バルク 2DES 中だけでなく、図 2.5 に示すような開放系量子ドット（量子ビリヤード）においても WL/WAL は生じ、ゼロ磁場近傍の電気伝導率の磁場依存性として観測される [27–30, 50–52]。単一サンプルの開放系量子ドットに対する電気伝導率の磁場依存性には UCF [29, 53] も含まれるため、ゲート電圧の微小変化に対する電気伝導率の平均化 [28] やドットの配列化 [27] によって UCF を排除することで WL/WAL のみを測定することが可能である。開放系量子ドットの電気伝導率の磁場依存性は、Landauer 公式を利用して計算でき、計算において必要となる透過率は、直接数値的に量子力学的散乱問題を解く以外に、半古典経路積分理論に基づく半古典理論やハミルトニアンの対称性に基づくランダム行列理論（RMT: Random matrix theory）等によって計算することが可能である [54–59]。開放系量子ドットでは入り口と出口のリードが明確に定義できることから、図 2.5 に示すようなビリヤード・シミュレーションによって透過率を半古典的に計算可能であり、位相緩和時間 [28, 30] やスピン緩和時間 [51] を定量的に決定することが可能である。一方、メゾスコピックリング配列構造（MRA）は無限の周期構造とみなせるため、Landauer 公式を用いた電気伝導率の磁場依存性の計算が困難である。そこで、本研究ではバルク 2DES 中での再帰確率に基づく WL/WAL 理論を応用することで、MRA 中での WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の計算を試み、実験結果と比較する。

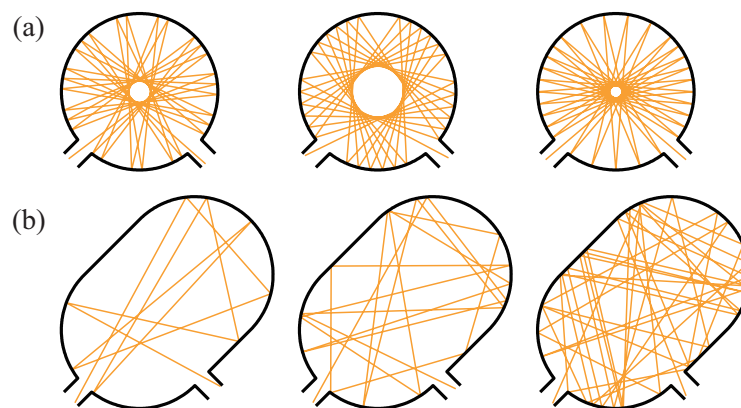


図 2.5: バリスティック量子ドット（量子ビリヤード）中のビリヤード軌道。(a) サークルドット、(b) スタジアムドット。

第3章 再帰経路の実空間シミュレーションとスピン干渉効果

本章では、2DES で定量的に再帰確率に基づく WL/WAL の計算手法を MRA に応用するために、“再帰”や“再帰確率”の扱い方を解説し、再帰経路における時間反転対称経路での干渉について理論背景を整理する。ここで、本論文で用いている“再帰”という言葉は英語の“return”の訳語として用いていることをはじめに断っておく。そのため、プログラム言語などにみられる“再帰”呼び出しのような意味ではなく、元と同じ状態（位置）に戻るという意味で“再帰”を用いる。（このような意味で用いる場合は“回帰”も同じ意味を持つが、本論文では“再帰”を用いる。）

3.1 “再帰”とは？

Beyond diffusion モデルでは、「WL/WAL による電気伝導率の量子補正項は再帰確率によって計算することが可能」である事実を用いて解析解の計算をおこなっている。しかしながら、このような物理的描像をベースとした定量的な実空間シミュレーションのモデルの開発例はほぼない。本節では、初めに、どのような電子描像を仮定しているかによって“再帰”のとらえ方が異なることについて言及する。1986 年に Chackravarty ら [35] は、WL/WAL 理論における電子描像については Brownian 描像と Boltzmannian 描像の二つの電子描像に区別した説明を試みている。Diffusion モデルにおいては Brownian 描像、Beyond diffusion モデルにおいては Boltzmannian 描像を用いている。はじめに、二つの描像の概要を説明し、それぞれの古典的な再帰確率について述べる。

3.1.1 Brownian 描像と Boltzmannian 描像における再帰

Diffusion モデルでは拡散運動による電子描像である Brownian 描像、Beyond diffusion モデルでは酔歩運動（ランダムウォーク）による電子描像である Boltzmannian 描像を用いている。また、Brownian 描像は時間、Boltzmannian 描像は散乱回数に伴って電子の存在確率が変化する描像であるため、Brownian 描像と Boltzmannian 描像では“再帰”に対

するアプローチが異なることに注意する必要がある。

Brownian 描像における電子の再帰

Brownian 描像とは、拡散係数 D を用いて特徴づけられる電子の拡散運動に基づく描像であり、拡散方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} W(\mathbf{r}, t) = D \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) W(\mathbf{r}, t) \quad (3.1)$$

によって電子の存在確率が決まる描像である。ここで、 $W(\mathbf{r}, t) \Delta S$ は時刻 t に位置 $\mathbf{r}$ 周辺の微小面積 ΔS での電子の存在確率であり、 $W(\mathbf{r}, t)$ の次元は $[\text{m}^{-2}]$ となる。また、二次元平面のどこかに必ず電子が存在するため $\int d\mathbf{r} W(\mathbf{r}, t) = 1$ を満たす。初期条件として時刻 $t = 0$ で原点 $\mathbf{r}_1 = (0, 0)$ に局在した状態 $W(\mathbf{r}_1, 0) \Delta S = 1$ ($\Delta S \rightarrow 0$) を与え、式 (3.1) を計算することで、

$$W(\mathbf{r}, t) \Delta S = \frac{\exp(-r^2/4Dt)}{4\pi Dt} \Delta S \quad (3.2)$$

となる。

このような Brownian 描像における“再帰”とは、原点 $\mathbf{r}_1$ にいる電子が時刻 t 秒後に再び原点 $\mathbf{r}_1$ 周辺の微小面積 ΔS に存在することである。その確率 $W_t \Delta S$ は、

$$W_t \Delta S = W(\mathbf{r}_1, t) \Delta S = \frac{1}{4\pi Dt} \Delta S \quad (3.3)$$

となる。ここで、 W_t の次元は $[\text{m}^{-2}]$ となり、再帰確率密度と呼ばれる。

また、電気伝導率の量子補正を計算する際は磁場に対する応答を計算する必要がある。再帰確率を用いた理論の解析解は、磁場の影響を k 空間で考慮するが、それでは物理的な描像が分かりにくくなってしまう。そのため、実空間の Brownian 描像で WL/WAL を考える際は Wiener 過程によって電子の再帰経路を考える [60]。Wiener 過程は微小時間ごとに電子の位置を観測することで、実空間上での電子経路を決定する手法である。これにより、再帰経路が囲む磁束の大きさを決定することで、磁場の影響を取り入れることが可能である。しかしながら、微小時間ごとに電子の位置を観測する際に、電子が一定のフェルミ速度 v_F では到達しえない遥か遠方で観測される可能性があるなど、拡散近似によって現実的な物理的描像とのずれが生じる。

Diffusion モデルは HLN モデル [39]、ILP モデル [44]、Knap モデル [45] など広く用いられている理論モデルである。実際の 2DES 系では一定のフェルミ速度 v_F で不純物散乱

を繰り返しながら伝導しているにもかかわらず、Brownian 描像では電子の運動について拡散近似を用いることで理論的な取り扱いを容易にしている。しかしながら、拡散近似の結果、Diffusion モデルは Brownian 描像にかなった数学表式となり、これをもって電子伝導の本質は Brownian 描像であるというのはおかしい。拡散近似が成り立つのは $t \gg \tau$ の時であるため、原点 $\mathbf{r}_1$ にすぐ再帰するような経路は正確に表現することができないことに相当する。このような短い距離で再帰する軌道は小さい面積しか持たないため、低磁場では影響はほとんどない。しかし、磁場が $B_{tr}/10$ 程度になると、これらの再帰経路の干渉への寄与は無視できなくなるため、実験からの逸脱が観測される [61]。

Boltzmannian 描像における電子の再帰

Boltzmannian 描像は、電子の酔歩運動（ランダムウォーク）による描像である。解りやすい説明は Dyakonov らによって提供されている [62]。ここでは、これに倣って説明を行う。緩和時間近似（ dt/τ 、ここで τ は運動量緩和時間）を用いた Boltzmann 方程式において、一定のフェルミ速度 v_F で移動する電子が不純物散乱を繰り返しながら伝導する描像であり、Brownian 描像よりも実際の 2DES を表している描像であるといえる。この時、ある時刻にある位置 $\mathbf{r}$ に存在する電子（速度方向は不明）が次の最初の散乱を経験する位置が $\mathbf{r}'$ 周辺の微小面積 ΔS 内である確率 $P(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \Delta S$ は、

$$P(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \Delta S = \frac{\exp(-|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|/\ell)}{2\pi\ell} \Delta S \quad (3.4)$$

で与えられる。ここで、 $P(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ の次元は $[\text{m}^{-2}]$ であり、 $\ell = v_F \tau$ は平均自由行程である。

原点 $\mathbf{r}_1$ にいた電子の n 回目の散乱で位置 $\mathbf{r}$ 周辺の微小面積 ΔS に存在する確率 $W^{(n)}(\mathbf{r}) \Delta S$ ($W^{(n)}(\mathbf{r})$ の次元は $[\text{m}^{-2}]$) について考える。まず、図 3.1(a) に示すように、一回目の散乱で位置 $\mathbf{r}_2$ 周辺の微小面積 ΔS に存在する確率 $W^{(1)}(\mathbf{r}_2) \Delta S$ であるが、式 (3.4) と等価であるため、

$$W^{(1)}(\mathbf{r}_2) \Delta S = P(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \Delta S \quad (3.5)$$

となる。次に、図 3.1(b) に示すように、原点 $\mathbf{r}_1$ にいた電子が位置 $\mathbf{r}_2$ 周辺の微小面積 $d\mathbf{r}_2$ で散乱された後、次に位置 $\mathbf{r}$ 周辺の微小面積 ΔS で散乱される確率を考えるが、もちろん $W^{(1)}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 \times P(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \Delta S$ となる。しかし、二回目の散乱が位置 $\mathbf{r}_3$ 周辺の微小面積 ΔS で散乱される確率 $W^{(2)}(\mathbf{r}_3) \Delta S$ を考えると、図 3.1(b) に示す位置 $\mathbf{r}_2$ だけでなく、一回

目の散乱の位置 $\mathbf{r}_2$ はどこにあってもよいため、 $W^{(1)}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 \times P(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \Delta S$ を $\mathbf{r}_2$ に関して積分することで、

$$\begin{aligned} W^{(2)}(\mathbf{r}) \Delta S &= \int (W^{(1)}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 \times P(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \Delta S) \\ &= \left(\int d\mathbf{r}_2 W^{(1)}(\mathbf{r}_2) P(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \right) \Delta S \end{aligned} \quad (3.6)$$

のように、直前の面積当たりの再帰確率 $W^{(1)}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2$ を用いて求められる。 n 回目の散乱に関しても式 (3.6) と同様に、再帰確率 $W^{(n-1)}(\mathbf{r}_n) d\mathbf{r}_n$ を用いて、

$$W^{(n)}(\mathbf{r}) \Delta S = \left(\int d\mathbf{r}_n W^{(n-1)}(\mathbf{r}_n) P(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \right) \Delta S \quad (3.7)$$

となる。また、式 (3.7) を直前の面積当たりの再帰確率 $W^{(n-1)}(\mathbf{r}_n)$ を用いずに記述すると、

$$W^{(n)}(\mathbf{r}) \Delta S = \left(\int \cdots \int d\mathbf{r}_n \cdots d\mathbf{r}_2 P(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \cdots P(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \right) \Delta S \quad (3.8)$$

のような多重積分の形で表される。

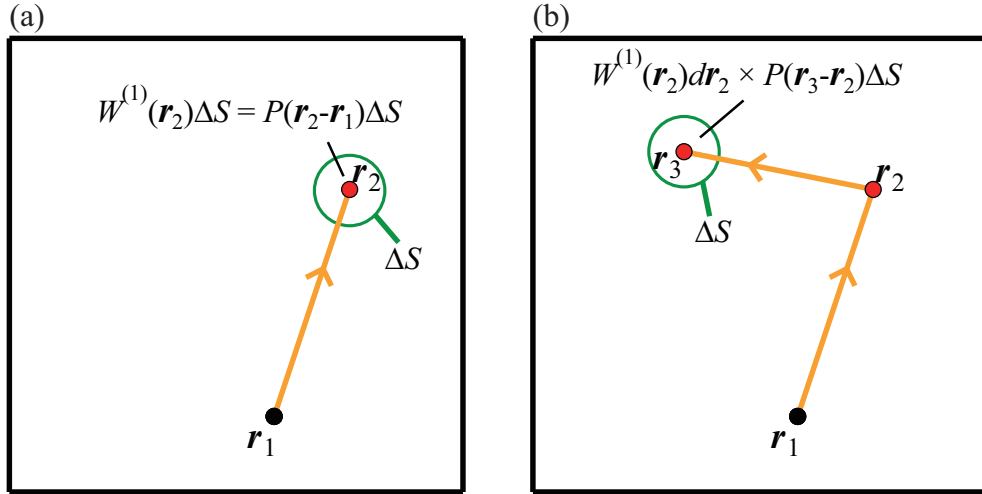


図 3.1: Boltzmannian 描像における電子の存在確率の模式図。

そのため、Boltzmannian 描像における n 回目の散乱で原点 $\mathbf{r}_1$ 周辺の微小面積 ΔS に再帰する確率 $W^{(n)} \Delta S$ は、

$$W^{(n)} \Delta S = W^{(n)}(\mathbf{r}_1) \Delta S \quad (3.9)$$

となり、微小面積 ΔS の“面”による再帰判定によって計算される再帰確率である。ここで、 $W^{(n)}$ は $[\text{m}^{-2}]$ を次元とする再帰確率密度である。また、式 (3.9) は $n \geq 3$ に対して解析的に解くことが可能であり、

$$W^{(n)} \Delta S = \frac{1}{2\pi\ell^2} (n-2)^{-1} \Delta S \quad (3.10)$$

となる。

3.2 再帰確率に基づく弱局在/弱反局在

WL による電気伝導率の量子補正は電子の再帰確率を用いて表される。本節では、先行研究に基づき、Diffusion モデル、Beyond diffusion モデルそれぞれについて、電気伝導率の量子補正と再帰確率密度の関係性を示す。

Diffusion モデル

Diffusion モデルでは、Brownian 描像を仮定しており、時間に依存した再帰確率密度 W_t によって WL による伝導率の量子補正項があらわされ、

$$\Delta\sigma = -\frac{2e^2}{\pi\hbar} D \int_{\tau}^{\infty} dt W_t \exp(-t/\tau_{\phi}) \quad (3.11)$$

となる [35]。ここで、 τ_{ϕ} は位相緩和時間であり、積分の下限を τ としているのは拡散近似を用いることで生じる発散を防ぐためである。

Beyond diffusion モデル

Beyond diffusion モデルでは、Boltzmannian 描像を仮定しており、散乱回数に依存した再帰確率密度 $W^{(n)}$ によって WL による電気伝導率の量子補正項があらわされ、

$$\begin{aligned} \Delta\sigma &= -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} F, \quad F = 2\pi\ell^2 W(0), \\ \text{where } W(0) &= \sum_{n=3}^{\infty} W^{(n)} \exp(-n/n_{\phi}) \end{aligned} \quad (3.12)$$

となる [48,60,62]。式 (3.12)、バリスティックな位相緩和長 $L_\phi = v_F \tau_\phi$ を用い、 $n_\phi = L_\phi / \ell$ に対し散乱回数で緩和することを仮定しているが、本論文では実空間の伝導距離 L とバリスティックな位相緩和長 L_ϕ を用いて $\exp(-L/L_\phi)$ とする位相緩和を仮定する。

Beyond diffusion モデルの中には、いずれも実空間でのランダムウォークにおける再帰確率を解析的に計算する手法を用いている。しかしながら、式 (3.10) のように古典的な再帰確率は容易に計算可能であるが、量子力学的な干渉効果を考えると理論の計算が非常に複雑になる。特に、SOI が生じる系での Beyond diffusion モデルである Golub モデル [26,63] は、限定された条件（一つの SOI しか導入できない）にも関わらず、計算は困難を極める [15]。

3.3 ランダムウォークを用いた Monte Carlo シミュレーション

Boltzmannian 描像による WL/WAL 理論から求められる解析解の数値計算の困難さの解決策の一つとして、ランダムウォークを用いた Monte Carlo シミュレーションによって計算する方法を考えた。WL/WAL におけるランダムウォークを用いた Monte Carlo シミュレーションでは、実空間でのランダムウォーク・シミュレーションによって様々な再帰経路を求め、それぞれの干渉強度を計算し、その平均を計算することで電気伝導率の量子補正を求める。本節では、ランダムウォーク・シミュレーションの方法及び計算された電子の経路の再帰判定方法を示す。

3.3.1 ランダムウォーク・シミュレーション

図 3.2 に示すような Minkov らのランダムウォーク・シミュレーションと本論文で用いる実空間におけるランダムウォーク・シミュレーションの二つの手法を紹介する。

実空間に分布している散乱体によるランダムウォーク・シミュレーション

まず、図 3.2(a) のような実空間に分布している不純物によってランダムウォークを行うモデルを紹介する。この手法では、初めに赤丸で示す散乱体を乱数を用いてランダムに分布させる。次に、ある散乱体に初期位置を設定し、青色で示すように角度を乱数によって

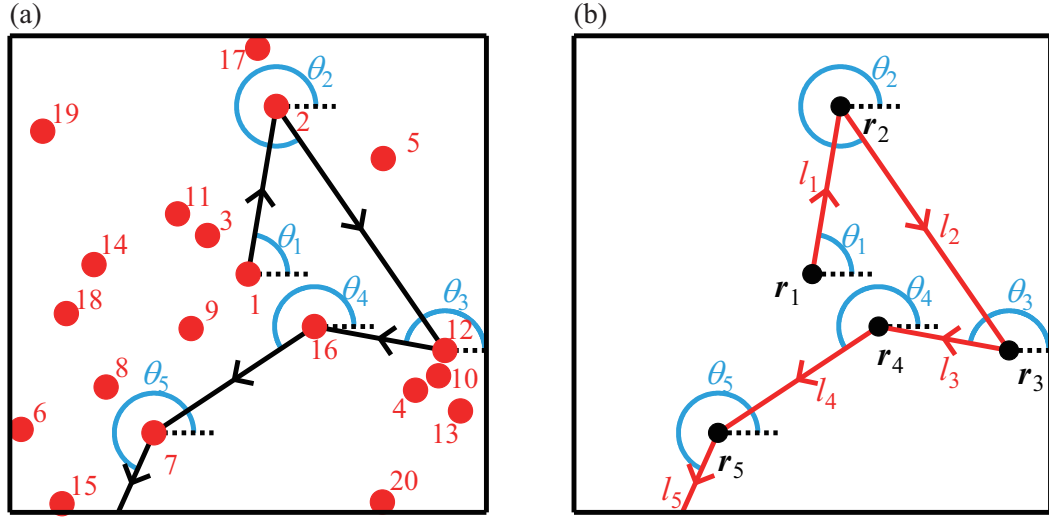


図 3.2: (a) 実空間に不純物を分布させたときのランダムウォーク・シミュレーションの模式図。(b) 散乱確率を用いたランダムウォーク・シミュレーションの模式図。

計算する。次に、すべての散乱体との衝突判定を行い、最も近い散乱体で散乱される。その後、角度の計算と衝突する散乱体の決定を繰り返すことで電子の経路が求められる。

このような手法は、Minkov ら [60] が数値シミュレーションによる WL の計算を行う際に利用している。Minkov らのランダムウォーク・シミュレーションでは、80,000 個の散乱体をランダムに分布させ、一つの軌道当たり 1,000 回の散乱を経験するまでシミュレーションを続けている。しかしながら、電子軌道のこのような計算は一回の散乱のたびにすべての散乱体との衝突判定を行くことや実空間にランダムに分布させる散乱体に対しても平均する必要があるため、計算効率が悪い。さらに、不純物に関して大きさと密度という二つのパラメータを必要とするため、フィッティング解析がより複雑になってしまう。

散乱確率を用いたランダムウォーク・シミュレーション

一方、Beyond diffusion モデルで用いられている式 (3.4) はランダムウォークがベースとなっており、ランダムウォークの統計も当然これに従う。このようなモデルでは、乱数を用いて次の散乱点までの角度と距離の計算を繰り返すことで電子の経路を求める。ここで、次の散乱点までの距離 l と角度 θ を乱数 $\text{ran1}(\text{seed})$ ($0 < \text{ran1}(\text{seed}) < 1$) [64] を用い

て表すと、

$$l = -\ell \times \ln \{\text{ran1}(\text{seed})\} \quad (3.13)$$

$$\theta = 2\pi \times \text{ran1}(\text{seed}) \quad (3.14)$$

となる。式 (3.14) では、等方散乱を仮定している。実空間に分布している散乱体によるランダムウォーク・シミュレーションに比べ、散乱確率を用いたランダムウォーク・シミュレーションは乱数を用いる回数や衝突判定の回数が少なくなるため、計算効率が非常に高くなる。また、Beyond diffusion モデルで仮定している状況そのものを計算していることに相当する。このことは、例えば、Golub モデルのような Beyond diffusion モデルと定量的な一致が得られるのかという点で興味深い（第4章で議論する）。

3.3.2 再帰判定

WL/WAL による電気伝導率の量子補正の計算には、実空間におけるランダムウォーク・シミュレーションから求められた電子経路が再帰経路であるかを判定する必要がある。図 3.3(a) のように、緑色で示した原点 $\mathbf{r}_1$ 周辺の半径 Δr の微小面積 $\Delta S = \pi \Delta r^2$ の“面”で散乱した時に再帰と判定する場合、再帰確率が半径 Δr の二乗に比例するため、より正確に再帰確率を求めるために半径 Δr を十分小さくしたときに再帰経路を見出しにくくなってしまう。そのため、より再帰経路を見出しやすくするために、“面”ではなく“線”による再帰判定を行う手法を提案する。

図 3.3(b) のように、散乱前の位置を中心とする原点を通過する円周上（黒破線）の原点周辺の微小長さ $2\Delta r$ の領域（緑実線）を通過する経路を再帰経路とみなす。図 3.3(a) のような“面”による再帰判定では、図中の1番の青線のように原点周辺で散乱が生じている経路のみが再帰経路と反映されるのに対し、図 3.3(b) のような“線”による再帰判定では、先ほどと同様に1番の青線だけでなく、2番の青線のように原点から離れた位置で散乱される経路であっても微小長さ $2\Delta r$ の領域を通過する経路であるため再帰経路と判定される。このような再帰判定を用いると、再帰確率は微小長さ $2\Delta r$ に比例するため、“面”による再帰判定に比べ再帰確率が高く、再帰経路を見出しやすくなる。

しかしながら、WL/WAL による伝導率の量子補正項を定量的に計算する際に利用する再帰確率は“面”による再帰判定によって求められた再帰確率であり、“線”による再帰判定によって得られた再帰確率を“面”による再帰判定の再帰確率に変換する必要がある。“

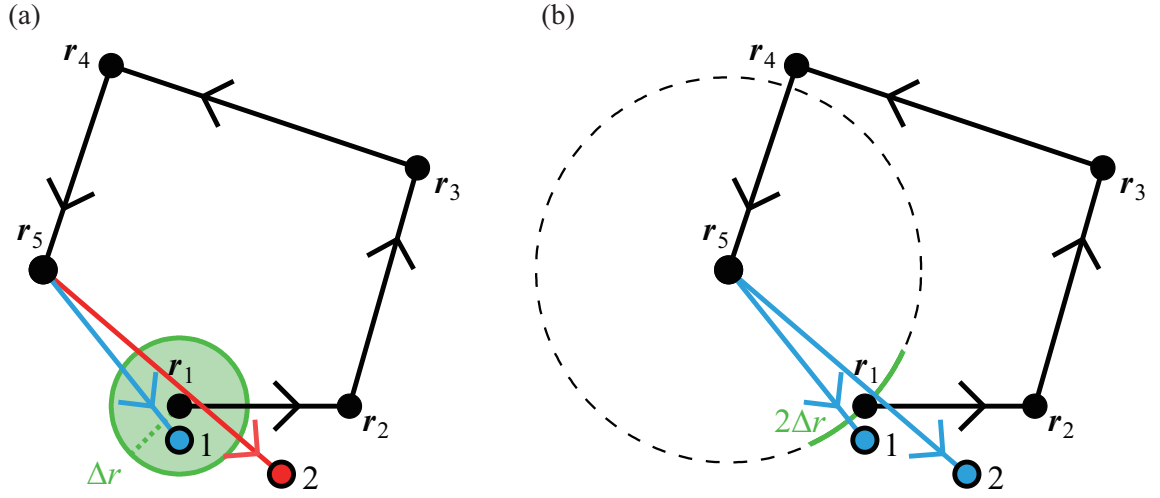


図 3.3: (a) “面”、(b) “線” による再帰判定の模式図。 r_5 の次の散乱が再帰するかを判定すると、半径 Δr の緑色で示した“面”に再帰すると判定される経路は 1 番の経路のみであるが、長さ $2\Delta r$ の“線”による再帰判定では 1 番と 2 番の経路が再帰したと判定される。

“線”による再帰判定を考える際は、距離と方向の二つに分けて考える。距離に関しては $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}| = r$ より遠くで散乱する確率であり、角度に関しては $2\pi r$ の円周のうち $2\Delta r$ の領域に向かう確率である。そのため、位置 $\mathbf{r}$ から原点 $\mathbf{r}_1$ 周辺の長さ $2\Delta r$ に再帰する確率 $P_{\text{line}}(\mathbf{r})$ は、

$$\begin{aligned}
 P_{\text{line}}(\mathbf{r}) &= \int_r^\infty dr' \frac{\exp(-r'/\ell)}{\ell} \times \frac{2\Delta r}{2\pi r} \\
 &= \frac{\Delta r \exp(-r/\ell)}{\pi r} \\
 P(\mathbf{r}) &= \frac{P_{\text{line}}(\mathbf{r})}{2\Delta r \ell}
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

となる。つまり、実空間シミュレーションで“線”による再帰判定をおこなった際に、 N_{seed}

個の電子経路に対し N_{orbit} 回の再帰判定がされたとすると、再帰確率密度 $W(0)$ は、

$$\begin{aligned}
 W(0) &= \sum_{n=3}^{\infty} W^{(n)} = \sum_{n=3}^{\infty} \left\{ \left(\int d\mathbf{r}_n W^{(n-1)}(\mathbf{r}_n) P(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \right) \Delta S \right\} \\
 &= \sum_{n=3}^{\infty} \left\{ \left(\int d\mathbf{r}_n W^{(n-1)}(\mathbf{r}_n) \frac{P_{\text{line}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)}{2\Delta r\ell} \right) \Delta S \right\} \\
 &= \frac{1}{2\Delta r\ell} \sum_{n=3}^{\infty} \left\{ \left(\int d\mathbf{r}_n W^{(n-1)}(\mathbf{r}_n) P_{\text{line}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \right) \Delta S \right\} \\
 &= \frac{1}{2\Delta r\ell} \frac{N_{\text{orbit}}}{N_{\text{seed}}}
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

となる（ここでは、散乱回数による位相緩和は考慮していない）ことから、ファクター $2\Delta r\ell$ を用いることで単位面積あたりの再帰確率に変換することが可能である。

3.4 再帰経路での干渉効果

本節では、上記で求めた再帰経路での一電子の伝播関数を用いて干渉の強度の計算方法について述べ、SOI などの一電子相互作用を考えた際の一電子の伝播関数を示す。

3.4.1 一電子の伝播関数

始状態 $\langle \mathbf{r} | \psi(0) \rangle$ から終状態 $\langle \mathbf{r}' | \psi(t) \rangle$ に至る不純物散乱間の一電子の伝播関数 $\mathbf{U}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ を求める。また、一定のフェルミ速度 v_F を持つフェルミ円状の電子を考えるため、

$$v_F t = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \tag{3.17}$$

が成り立つ。はじめに、時間依存の Schrödinger 方程式による時間発展を考える。その際、SOI や Zeeman 効果などをスピン分離を引き起こす摂動ハミルトニアン $\mathbf{H}'(\mathbf{k}, \mathbf{B}) = \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ として扱うことで、ハミルトニアン $\mathbf{H}$ は $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}'(\mathbf{k}, \mathbf{B})$ となる。ここで、 $\mathbf{H}_0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$ は非摂動ハミルトニアンである。状態 $|\psi(t)\rangle$ の時間発展は、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \mathbf{H} |\psi(t)\rangle \tag{3.18}$$

に従う。本研究で想定している SOI や Zeeman 効果などの摂動ハミルトニアン $\mathbf{H}'(\mathbf{k}, \mathbf{B})$ は時間には依存しないため、式 (3.18) の解は、

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\mathbf{H}t}{\hbar}\right)|\psi(0)\rangle \quad (3.19)$$

となる。始状態 $\langle \mathbf{r}|\psi(0)\rangle$ から終状態 $\langle \mathbf{r}'|\psi(t)\rangle$ に伝播すると考えると、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}'|\psi(t)\rangle &= \langle \mathbf{r}'|\exp\left(-i\frac{\mathbf{H}t}{\hbar}\right)|\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|\psi(0)\rangle \\ &= \mathbf{U}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \langle \mathbf{r}|\psi(0)\rangle \end{aligned} \quad (3.20)$$

と表され、 $\mathbf{U}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}'|\exp\left(-i\frac{\mathbf{H}t}{\hbar}\right)|\mathbf{r}\rangle$ が始状態 $\langle \mathbf{r}|\psi(0)\rangle$ から終状態 $\langle \mathbf{r}'|\psi(t)\rangle$ に至る不純物散乱間の一電子の伝搬関数となる。

実際に $\mathbf{U}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ を計算すると、

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r}'|\exp\left(-i\frac{\mathbf{H}t}{\hbar}\right)|\mathbf{r}\rangle \\ &= \langle \mathbf{r}'|\exp\left(-i\frac{\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}'}{\hbar}t\right)|\mathbf{r}\rangle \\ &= \exp\left(-i\frac{E_F t}{\hbar}\right) \times \langle \mathbf{r}'|\exp\left(-i\frac{1}{\hbar}\mathbf{H}'t\right)|\mathbf{r}\rangle \end{aligned} \quad (3.21)$$

となるが、非摂動ハミルトニアンによる位相ファクターは時間反転経路間ではまったく同じ寄与を示すため、干渉強度の計算という観点においては、非摂動ハミルトニアンによる位相ファクターに関しては無視することが可能であり、式 (3.17) の関係を用いることで、

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}'|\exp\left(-i\frac{\mathbf{H}'|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}{v_F \hbar}\right)|\mathbf{r}\rangle \quad (3.22)$$

を始状態 $\langle \mathbf{r}|\psi(t)\rangle$ から終状態 $\langle \mathbf{r}'|\psi(t')\rangle$ に至る不純物散乱間の一電子の伝搬関数とする。

摂動ハミルトニアン $\mathbf{H}'(\mathbf{k}, \mathbf{B}) = \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ を用いることで、式 (3.22) は、

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r}'|\exp\left(-i\frac{\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\sigma} |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}{v_F \hbar}\right)|\mathbf{r}\rangle \\ &= \langle \mathbf{r}'|\exp\left(-i\frac{1}{2}\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \boldsymbol{\xi}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\sigma}\right)|\mathbf{r}\rangle \\ &= \langle \mathbf{r}'|\{\mathbf{I} \cos[\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})/2] - i\boldsymbol{\xi}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin[\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})/2]\}|\mathbf{r}\rangle \\ &= \langle \mathbf{r}'|\begin{pmatrix} \cos[\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})/2] & -i\xi_- \sin[\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})/2] \\ -i\xi_+ \sin[\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})/2] & \cos[\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})/2] \end{pmatrix}|\mathbf{r}\rangle \end{aligned} \quad (3.23)$$

となる。ここで、 $\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B}) = 2 \left| \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \right| |\mathbf{r}' - \mathbf{r}| / \hbar v_F$ は距離 $|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|$ の間のスピン回転角、 $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) = \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) / \left| \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \right| = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ はスピン回転軸を表す。また、SOI を扱う上では z 軸をスピン回転軸とすることはないので、 $\xi_{\pm} = \xi_x \pm i\xi_y$ と変数変換を行い簡単化している。

3.4.2 時間反転対称経路間の干渉

面積 S の閉ループを囲む再帰経路において、ある経路 CW と逆回りの経路 CCW では、原点 $\mathbf{r}_1$ にいた電子がそれぞれ

$$\begin{aligned} \text{CW} &: \mathbf{r}_1 \xrightarrow{\mathbf{k}_1} \mathbf{r}_2 \xrightarrow{\mathbf{k}_2} \cdots \xrightarrow{\mathbf{k}_{n-1}} \mathbf{r}_n \xrightarrow{\mathbf{k}_n} \mathbf{r}_1 \\ \text{CCW} &: \mathbf{r}_1 \xrightarrow{-\mathbf{k}_n} \mathbf{r}_n \xrightarrow{-\mathbf{k}_{n-1}} \cdots \xrightarrow{-\mathbf{k}_2} \mathbf{r}_2 \xrightarrow{-\mathbf{k}_1} \mathbf{r}_1 \end{aligned}$$

のような経路をたどり、原点 $\mathbf{r}_1$ に再帰する時を考える。経路 CW 及び経路 CCW をたどる間の一電子の伝播関数を U_{CW} 、 U_{CCW} とすると、

$$\begin{aligned} U_{\text{CW}} &= U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_n) \cdots U(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \\ U_{\text{CCW}} &= U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \cdots U(\mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_n) U(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_1) \end{aligned}$$

となる。さらに、波数が $\mathbf{k}$ から $\mathbf{k}'$ に変化する不純物散乱の演算 $\mathbf{S}_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}^{\text{imp}}$ を考慮すると、

$$\begin{aligned} U_{\text{CW}} &= \mathbf{S}_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_{\text{scat}}}^{\text{imp}} U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_n) \cdots \mathbf{S}_{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2}^{\text{imp}} U(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2) \mathbf{S}_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1}^{\text{imp}} U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \\ U_{\text{CCW}} &= \mathbf{S}_{-\mathbf{k}_{\text{scat}}, -\mathbf{k}_1}^{\text{imp}} U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \cdots \mathbf{S}_{-\mathbf{k}_{\text{scat}-2}, -\mathbf{k}_{\text{scat}-1}}^{\text{imp}} U(\mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_n) \mathbf{S}_{-\mathbf{k}_{\text{scat}-1}, -\mathbf{k}_{\text{scat}}}^{\text{imp}} U(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_1) \end{aligned}$$

となる。本論文では、不純物散乱時に生じる位相緩和やスピン緩和に関しては考察を行わないが、上記の効果は $\mathbf{S}_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}^{\text{imp}}$ を導入することで扱える。ここで、時間反転対称の経路であるが、一電子の伝播関数に関しては $U_{\text{CW}} = U_{\text{CCW}}^{-1} = U_{\text{CW}}^{\dagger}$ のような時間反転対称を要請していないことに注意してほしい。また、面直磁場 B が生じている時、AAS 効果 [65] のような位相ファクターが現れることを考慮すると、それぞれの経路をたどり、初期状態 $\langle \mathbf{r}_1 | i \rangle$ が一電子の伝播関数によって $\psi_{\text{CW}} = \exp(2i\pi \frac{BS}{\hbar/e}) U_{\text{CW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle$ 、 $\psi_{\text{CCW}} = \exp(-2i\pi \frac{BS}{\hbar/e}) U_{\text{CCW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle$

になり、二つの状態の重ね合わせ状態の二乗から干渉強度を求めると、

$$\begin{aligned}
 \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\text{CW}} + \psi_{\text{CCW}}) \right|^2 &= \frac{1}{2} \left\{ |\psi_{\text{CW}}|^2 + |\psi_{\text{CCW}}|^2 + \psi_{\text{CCW}}^\dagger \psi_{\text{CW}} + \psi_{\text{CW}}^\dagger \psi_{\text{CCW}} \right\} \\
 &= 1 + \frac{1}{2} \left\{ \left(e^{-2\pi i \frac{BS}{h/e}} \mathbf{U}_{\text{CCW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle \right)^\dagger \left(e^{2\pi i \frac{BS}{h/e}} \mathbf{U}_{\text{CW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle \right) \right. \\
 &\quad \left. + \left(e^{2\pi i \frac{BS}{h/e}} \mathbf{U}_{\text{CW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle \right)^\dagger \left(e^{-2\pi i \frac{BS}{h/e}} \mathbf{U}_{\text{CCW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle \right) \right\} \\
 &= 1 + \frac{1}{2} \left\{ e^{2\pi i \frac{BS}{h/2e}} \langle i | \mathbf{r}_1 \rangle \mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle \right. \\
 &\quad \left. + e^{-2\pi i \frac{BS}{h/2e}} \langle i | \mathbf{r}_1 \rangle \mathbf{U}_{\text{CW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CCW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle \right\} \\
 &= 1 + \text{Re} \left\{ e^{2\pi i \frac{BS}{h/2e}} \langle i | \mathbf{r}_1 \rangle \mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle \right\} \\
 &= 1 + \cos \left(2\pi \frac{BS}{h/2e} \right) \text{Re} \left\{ \langle i | \mathbf{r}_1 \rangle \mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle \right\} \\
 &\quad - \sin \left(2\pi \frac{BS}{h/2e} \right) \text{Im} \left\{ \langle i | \mathbf{r}_1 \rangle \mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle \right\} \quad (3.24)
 \end{aligned}$$

となる。ここで、第三項は面積 S の符号も含めて平均化することで消失する。また、

$$|i\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}_{\text{CW}(\text{CCW})} = \langle \mathbf{r}_1 | \begin{pmatrix} U_{\text{CW}(\text{CCW}),00} & U_{\text{CW}(\text{CCW}),01} \\ U_{\text{CW}(\text{CCW}),10} & U_{\text{CW}(\text{CCW}),11} \end{pmatrix} | \mathbf{r}_1 \rangle$$

とすると（ここではスピン自由度のみを考慮するため、 2×2 の行列としている）、

$$\begin{aligned}
 \langle i | \mathbf{r}_1 \rangle \mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle &= \cos^2 \frac{\theta}{2} (U_{\text{CCW},00}^* U_{\text{CW},00} + U_{\text{CCW},10}^* U_{\text{CW},10}) \\
 &\quad + \frac{1}{2} e^{i\phi/2} \sin \theta (U_{\text{CCW},00}^* U_{\text{CW},01} + U_{\text{CCW},10}^* U_{\text{CW},11}) \\
 &\quad + \sin^2 \frac{\theta}{2} (U_{\text{CCW},01}^* U_{\text{CW},01} + U_{\text{CCW},11}^* U_{\text{CW},11}) \quad (3.25)
 \end{aligned}$$

となるが、あらゆる初期状態 $|i\rangle$ に対する平均値 $\langle i | \mathbf{r}_1 \rangle \mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle_{\text{ave}}$ を計算することで、第二項は消失し、 $\langle \cos^2 \theta/2 \rangle_{\text{ave}}$ 、 $\langle \cos^2 \theta/2 \rangle_{\text{ave}} = 1/2$ となるため、

$$\begin{aligned}
 \langle i | \mathbf{r}_1 \rangle \mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW}} \langle \mathbf{r}_1 | i \rangle_{\text{ave}} &= \frac{1}{2} (U_{\text{CCW},00}^* U_{\text{CW},00} + U_{\text{CCW},10}^* U_{\text{CW},10}) \\
 &\quad + \frac{1}{2} (U_{\text{CCW},01}^* U_{\text{CW},01} + U_{\text{CCW},11}^* U_{\text{CW},11}) \\
 &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW}} \right\} \quad (3.26)
 \end{aligned}$$

となり、あらゆる初期状態 $|i\rangle$ に対して平均化した式 (3.24) は、

$$\left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\text{CW}} + \psi_{\text{CCW}}) \right|_{\text{ave}}^2 = 1 + \frac{1}{2} \text{Re} \left[\text{Tr} \left\{ \mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW}} \right\} \right] \cos \left(2\pi \frac{BS}{h/2e} \right) \quad (3.27)$$

となる。式 (3.27) の第二項が干渉項であるため、干渉強度は、

$$\frac{1}{2} \text{Re} \left[\text{Tr} \left\{ \mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW}} \right\} \right] \cos \left(2\pi \frac{BS}{h/2e} \right) \quad (3.28)$$

となる。

摂動ハミルトニアンとして SOI のみを考えると、時間反転対称性から $\mathbf{U}_{\text{CW}} = \mathbf{U}_{\text{CCW}}^{-1} = \mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger$ が成り立つため、 $\mathbf{U}_{\text{CCW}}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW}} = \mathbf{U}_{\text{CW}}^2$ となる。さらに、 $\mathbf{U}_{\text{CW}}^2$ の対角項は共役の関係となるため、

$$\frac{1}{2} \text{Re} \left[\text{Tr} \left\{ \mathbf{U}_{\text{CW}}^2 \right\} \right] = \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \mathbf{U}_{\text{CW}}^2 \right\} \quad (3.29)$$

となる。 $\mathbf{U}_{\text{CW}}$ は前述のスピン回転行列そのものであるため、再帰経路 CW の全体のスピン回転行列 $\mathbf{R}_{\text{tot}}$ を用いることで、式 (3.29) は、

$$\frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \mathbf{U}_{\text{CW}}^2 \right\} = \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \mathbf{R}_{\text{tot}}^2 \right\} \quad (3.30)$$

となる。

第4章 バルク二次元電子系における弱局在/弱反局在の実空間シミュレーション

4.1 概要

本章では、数値シミュレーションによる再帰確率の計算の有用性を示すために、バルク 2DES での WL/WAL による電気伝導率の量子補正を実空間における電子のランダムウォーク・シミュレーションによって計算する手法を示し、既存の WL/WAL モデルを再現することを示す。本手法は Boltzmannian 描像に基づくため、Beyond diffusion モデル [26, 46–48, 66–68] と等価であるため、Diffusion モデル [39, 44, 45, 69] に課せられる制約を受けない上に、Beyond diffusion モデルのような数値計算の困難さ [15] を必要としない。さらに、本手法は Beyond diffusion モデル（Dmitriev モデル [48] と Golub モデル [26]）を厳密に再現するだけでなく、既存の Beyond diffusion モデルでは解析困難な複数の SOI が共存する系など、あらゆる一電子相互作用であっても容易に計算が可能である。また、本手法では、疑似乱数の再現性を用いることでシミュレーション時間を大幅に削減し、短い計算時間であっても十分なアンサンブルサイズを確保できるため、非常に小さい数値誤差で計算が可能である。

4.2 シミュレーション

4.2.1 理論

Boltzmannian 描像を仮定している Beyond diffusion モデルの WL/WAL による電気伝導率の量子補正項は式 (3.12) によって計算されるが、実空間シミュレーションによって計算する際は、 N_{scat} 回の散乱までに再帰する確率（正確には再帰確率密度に $2\pi\ell^2$ を乗算したもの） F_0 と、 N_{orbit} 個の再帰経路での干渉強度 X_ν の平均値 $\langle X_\nu \rangle_{N_{\text{orbit}}}$ を用いることで、

$$\Delta\sigma = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} F_0 \times \langle X_\nu \rangle_{N_{\text{orbit}}} \quad (4.1)$$

となる [70]。ここで、2DES において、 F_0 は理論値が存在し、

$$F_0 = \sum_{n=3}^{N_{\text{scat}}} (n-2)^{-1} \quad (4.2)$$

となり [62][†]、干渉強度 X_ν は、

$$X_\nu = \exp\left(-\frac{L_\nu}{L_\phi}\right) \times \frac{1}{2} \text{Re} \left[\text{Tr} \left\{ \mathbf{U}_{\text{CCW},\nu}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW},\nu} \right\} \right] \times (1 + \cos \varphi'_\nu) \times \cos \left(2\pi \frac{BS_\nu}{h/2e} \right) \quad (4.3)$$

となり（詳しい説明は後述）、干渉強度 X_ν の平均値 $\langle X_\nu \rangle_{N_{\text{orbit}}}$ はランダムウォーク・シミュレーションによって N_{orbit} 個の再帰経路から計算される干渉強度 X_ν の平均値を用いるため、

$$\langle X_\nu \rangle_{N_{\text{orbit}}} = \frac{1}{N_{\text{orbit}}} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} X_\nu \quad (4.4)$$

となる。よって、様々な再帰経路で式 (4.3) を用いて X_ν を求めることでバルク 2DES における WL/WAL による電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma$ を計算することが可能である。

ランダムウォーク・シミュレーションによる再帰経路の計算

本研究で提案する WL/WAL モデルでは、3.3.1 で示した散乱確率を用いた実空間におけるランダムウォーク・シミュレーションを行い、3.3.2 に示した再帰判定を行うことで再帰経路を得る。図 4.1 に $\mathbf{r}_1$ から始めたランダムウォーク・シミュレーションによって計算された再帰経路の例を示す。3.3.1 に示した通り、散乱点 $\mathbf{r}_n$ の次の散乱点 $\mathbf{r}_{n+1}$ を決定するために、疑似乱数により次の散乱点までの距離 ℓ_n と角度 φ_n を求める。PSH のような異方性が強く影響する効果を導入しない場合は、できるだけ計算回数を少なくするため、 $\mathbf{r}_1$ から $\mathbf{r}_2$ への散乱の際に、角度に関して乱数を用いずに $\varphi_1 = 0$ 、つまり、 x 軸上をプラス方向に移動させる。3.3.2 に示した再帰判定によって再帰と判定された時（図 4.1 では $\mathbf{r}_5$ の次の散乱）、再帰経路としては $\mathbf{r}_1$ を次の散乱点とするため、 n_{scat} 回の散乱で再帰するとした時に $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2 \rightarrow \cdots \rightarrow \mathbf{r}_{n_{\text{scat}}} \rightarrow \mathbf{r}_1$ を再帰経路とする。

[†]実空間シミュレーションによって F_0 を求める場合は、式 (3.12、3.15) から $F_0 = \frac{\pi}{2\Delta r/\ell} \frac{N_{\text{orbit}}}{N_{\text{seed}}}$ となる。 $\Delta r \ll \ell$ の時は式 (4.2) と同等になるため、本章では式 (4.2) を用いる。

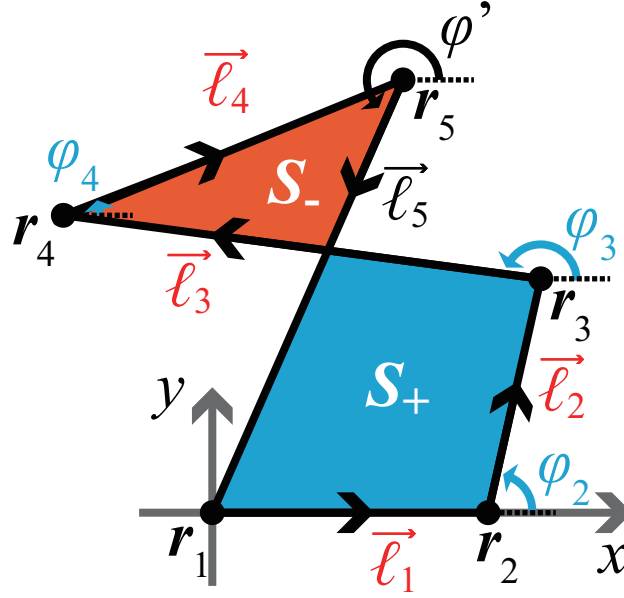


図 4.1: $n_{\text{scat}} = 5$ となるランダムウォーク・シミュレーションによって求められた再帰経路の模式図。赤で示す距離 $\vec{\ell}_n$ と、青で示す角度 φ_n は疑似乱数によって決定される。

再帰経路間で生じる干渉

式 (4.3) に示した再帰経路における干渉強度 X_ν には、式 (3.28) に示した時間反転対称経路間の干渉項だけでなく、位相緩和項 [71] と非後方散乱項 [48] が考慮されている。位相緩和項は指数関数による減衰を考え、位相緩和長 $L_\phi = v_F \tau_\phi$ とすると、位相緩和項は $\exp(-L_\nu/L_\phi)$ となる。ここで、総走行距離 L は n_{scat} 回の散乱で再帰する経路に対し各不純物間の距離 ℓ_n の総和 $L = \sum_n^{n_{\text{scat}}} \ell_n$ として計算される。また、非後方散乱項は参考文献 [60] に従い、 $(1 + \cos \varphi'_\nu)$ とする。ただし、 φ'_ν の定義は図 4.1 に示すとおりであるため、参考文献 [60] と比べると $\cos$ の符号が反転している。再帰経路が描く閉ループの面積 S_ν は囲み方が右回りか左回りかによって磁束が打ち消し合ってしまうため、図 4.1 のように青色で示す面積 S_+ と赤色で示す面積 S_- の差を S_ν とする。

平均自由行程によるパラメータのスケーリング

次に、バルク 2DES での WL/WAL による電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma$ における、平均自由行程 ℓ に対するパラメータのスケーリングを考える。平均自由行程を変化させる

ことは、図4.2のように再帰経路をスケールすることに対応する。前述のように、バルク2DESでのWL/WALは、長さスケールが平均自由行程 ℓ によって決定されるため、すべてのパラメータが平均自由行程 ℓ によってスケーリングされる。そのため、ある平均自由行程（本論文では $\ell = 1$ ）のランダムウォーク・シミュレーションから計算した再帰経路の集合を異なる平均自由行程の計算に適用できる。これにより、あらかじめ計算した一つの再帰経路の集合を用いることで、どのような平均自由行程であっても電気伝導率の量子補正項の計算が行える。今、平均自由行程 ℓ をスケールファクターとするために、総走行距離は $L_\nu \rightarrow \ell \times L_\nu$ 、閉ループの面積は $S_\nu \rightarrow \ell^2 \times S_\nu$ 、各不純物散乱間の距離は $|\mathbf{r}_{n+1} - \mathbf{r}_n| = l_n \rightarrow \ell \times l_n$ と書き直す。

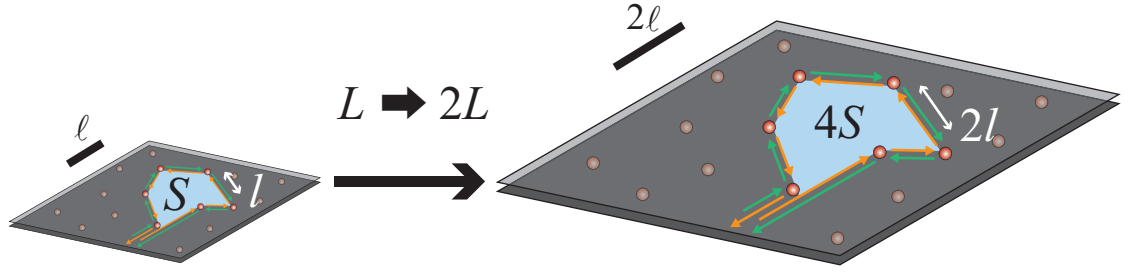


図 4.2: 平均自由行程によるスケールの模式図。ある平均自由行程 ℓ の系の再帰経路に対し、二倍の平均自由行程 2ℓ の系の再帰経路は総走行距離 L を二倍、各不純物間距離 $l_n = |\mathbf{r}_{n+1} - \mathbf{r}_n|$ を二倍、閉ループの面積を四倍にすることに対応する。

まず、位相緩和項は、 $\exp\left(-\frac{L_\nu}{L_\phi}\right) \rightarrow \exp\left(-\frac{\ell \times L_\nu}{L_\phi}\right) = \exp\left(-\frac{L_\nu}{L_\phi/\ell}\right)$ となるため、 L_ϕ/ℓ が一定であれば位相緩和項は一定になる。以降、本章では、 $L_\phi/\ell \rightarrow L_\phi$ と書き直し、 L_ϕ を平均自由行程あたりの位相緩和長とし、フィッティングパラメータの一つとなる。次に、不純物散乱間の距離 l_n の間で生じるスピン回転について考える。スピン回転角は $\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})$ と l_n の積によって決定されるため、 $l_n \rightarrow \ell \times l_n$ と書き直すことで、 $\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \times l_n \rightarrow \theta(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \times (\ell \times l_n) = (\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})\ell) \times l_n$ となるため、平均自由行程あたりのスピン回転角 $\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})\ell$ が一定であれば、一電子の相互作用に関する項は一定となる。そのため、 $\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})\ell \rightarrow \theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})$ と書き直し、 $\theta(\mathbf{k}, \mathbf{B})$ を平均自由行程あたりのスピン回転角とし、フィッティングパラメータの一つとなる（実際には、電子の進む方向に対するスピンの回転軸の方向も決定する必要がある）。最後に、磁場に関する項は、 $\cos\left(2\pi \frac{BS_\nu}{h/2e}\right) \rightarrow \cos\left(2\pi \frac{B\ell^2 \times S_\nu}{h/2e}\right) = \cos\left(\frac{B}{B_{tr}} S_\nu\right)$ となり、 B/B_{tr} が一定であれば磁場に関する項は一定になるため、本章では B/B_{tr} に対して伝導率の量子補正項をプロットする。

以上により、式 (4.3) は、

$$X_\nu = \exp\left(-\frac{L_\nu}{L_\phi}\right) \times \frac{1}{2} \text{Re} \left[\text{Tr} \left\{ \mathbf{U}_{\text{CCW},\nu}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW},\nu} \right\} \right] \times (1 + \cos \varphi'_\nu) \times \cos\left(\frac{B}{B_{\text{tr}}} S_\nu\right) \quad (4.5)$$

と書き直され、平均自由行程によってスケールされたフィッティングパラメータを用いることでバルク 2DES における伝導率の量子補正項を計算することが可能である。

4.2.2 数値計算の効率化

面積ヒストグラムを利用した電気伝導率の量子補正項の計算

WL/WAL 解析を行う際、面直磁場に対する電気伝導率の応答を測定し、理論モデルによるフィッティングを行うことで物性値の決定を行う。そのため、磁場を関数とした WL/WAL による電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma(B)$ を計算する必要がある。しかし、再帰経路ごとに各面直磁場での磁場に関する項 $\cos\left(\frac{B}{B_{\text{tr}}} S_\nu\right)$ を計算するのは非常に効率が悪い

ため、

$$\begin{aligned} X_\nu &= \exp\left(-\frac{L_\nu}{L_\phi}\right) \times \frac{1}{2} \text{Re} \left[\text{Tr} \left\{ \mathbf{U}_{\text{CCW},\nu}^\dagger \mathbf{U}_{\text{CW},\nu} \right\} \right] \times (1 + \cos \varphi'_\nu) \times \cos\left(\frac{B}{B_{\text{tr}}} S_\nu\right) \\ &= x_\nu \cos\left(\frac{B}{B_{\text{tr}}} S_\nu\right) \end{aligned} \quad (4.6)$$

とし、閉ループの面積 S に対する x_ν のヒストグラムと $\Delta\sigma(B)$ がフーリエ変換の関係にあることを利用し、面積ヒストグラムの Fast Fourier Transform (FFT、正確には離散コサイン変換) を行うことで、 $\Delta\sigma(B)$ の高速計算が可能である。

具体的には、面積 S が $(i - 0.5) < S/\Delta S < (i + 0.5)$ となる再帰経路の x_ν のヒストグラム $w[i]$ とし、 $w[i]_{\text{FFTed}}$ を一般的な FFT アルゴリズムによってフーリエ変換 [64] した $w[i]_{\text{FFTed}}$ を用いることで、 i を $\Delta\sigma[i]$ と $B[i]$ の媒介変数とすることで、

$$\Delta\sigma[i] = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} F_0 \times \frac{w[i]_{\text{FFTed}}}{N_{\text{orbit}}}, \quad B[i] = \frac{i}{2^N} \times \frac{\pi}{\Delta S} B_{\text{tr}} \quad (4.7)$$

となる。ここで、離散的なヒストグラムにすることで生じる数値誤差を考慮すると、最大磁場 $B_{\text{max}} = B[2^N] = \pi B_{\text{tr}}/\Delta S$ の三分の一程度までの利用にとどめることが望ましい。

疑似乱数を用いた高速化

3.3.1 に示すように、再帰経路は乱数を用いて計算される。しかしながら、実空間におけるランダムウォーク・シミュレーションで計算される経路は必ずしも再帰するとは限らず、ゴールサイズ Δr を小さくするほど再帰する確率は低下する。そのため、フィッティング解析で何度もシミュレーションを行うたびに、再帰経路だけでなく再帰しない経路も毎回計算することは非常に効率が悪い。そこで、疑似乱数（本研究では、 $\text{ran1}(\text{seed})$ [64] を用いる）の再現性を利用することで、ランダムウォーク・シミュレーションにおいて得られた再帰経路の集合を疑似乱数の seed の集合としてテーブル化することで、再帰経路のみを計算することが可能である [70]。

具体的には、各経路ごとに異なる乱数シード値 seed によって疑似乱数の初期化をおこなってからランダムウォーク・シミュレーションを行う。初回のランダムウォーク・シミュレーションでは、再帰経路と再帰しない経路の両方を計算する必要があるが、再帰経路の初期化に用いた乱数シード値を保存しておけば、二回目以降は再帰経路になる乱数シード値のみを計算することが可能である。さらに、再帰するときの散乱回数も保存することで、毎回 N_{scat} 回の散乱まで計算する必要がなくなるため、さらに効率的な計算が可能になる。本論文では、 $N_{\text{scat}} = 5,000$ 、 $\Delta r = 2.5 \times 10^{-5}$ とし、 $N_{\text{seed}} = 2^{11} \times 10^6$ 個の経路を計算し、 $N_{\text{orbit}} = 147,885$ 個の再帰経路となった。また、各再帰経路の再帰する時の平均散乱回数は 546 回であった。初回の計算量に比べ、二回目以降は 0.00079% の計算量でシミュレーションが可能となった。2017 年時点でのデスクトップ PC の利用で、 $\Delta\sigma[i]$ の計算は 10 秒未満で計算が終了するため、不自由なく実験結果のフィッティング解析を行える。

4.2.3 シミュレーション条件

結果・考察に用いるシミュレーション条件についてまとめる。まず、最大散乱回数 N_{scat} についてだが、 N_{scat} はシミュレーションに用いることができる位相緩和長 L_ϕ の限界値の目安となる。ランダムウォークを N_{scat} 回目までの散乱しか考慮しないということは、 N_{scat} 回目の散乱でステップ関数的な急激な位相緩和を与えることに相当する。しかしながら、フィッティング解析では、指数関数による位相緩和のみを考慮するため、ステップ関数的な位相緩和の影響がほとんど生じない程度に N_{scat} を大きくする（あるいは、 L_ϕ を短

くする) 必要がある。ここで、指数関数による位相緩和に対して、ステップ関数的な位相緩和がどれほど影響を与えるかを概算する。式 (3.12) では散乱回数に対して指数関数的な位相緩和を考えていたが、総和の上限を N_{scat} とすることでステップ関数的な位相緩和も加えることになる。ここで、本論文で用いる $N_{\text{scat}} = 5000$ とし、位相緩和長 $L_\phi = 1000$ に対応する n_ϕ を 1000 とした時、無限和をとる本来の値に対して N_{scat} によるカットオフで生じるずれの大きさの比は、

$$\frac{\sum_{n=N_{\text{scat}}+1}^{\infty} W^{(n)} \exp(-n/n_\phi)}{\sum_{n=3}^{\infty} W^{(n)} \exp(-n/n_\phi)} = 0.000166 \quad (4.8)$$

となるため、カットオフによるずれの大きさは無視できる程に十分小さいと考えられる。

次に面積ヒストグラムの間隔 ΔS であるが、次節以降での既存の Beyond diffusion モデルとの比較を $B \leq 10 \times B_{\text{tr}}$ の磁場範囲で行うために、 $B_{\text{max}}/3 > 10B_{\text{tr}}$ を満たすような ΔS とする。本論文では、 $\Delta S = 0.1$ であり、 $B_{\text{max}} = 10\pi B_{\text{tr}} > 30B_{\text{tr}}$ となるため、 $B \leq 10 \times B_{\text{tr}}$ においては FFT による数値誤差の影響は十分小さい。

4.3 既存の弱局在/弱反局在モデルとの比較

4.3.1 Dmitriev モデルとの比較

Dmitriev らが提案した WL モデル (Dmitriev モデル) との比較を行う [48]。Dmitriev モデルは非後方散乱補正を取り入れた Beyond diffusion モデルであり、SOI などの反局在を起こすような効果は考慮していないため WL のみを考えている。本研究で提案する WL/WAL モデルにおいても $(1 + \cos \varphi_\nu)$ として非後方散乱補正を考えており、一電子の伝播関数を $\mathbf{U}_{\text{CW}} = \mathbf{U}_{\text{CCW}} = \mathbf{I}$ として WL のみを考慮すれば Dmitriev モデルと等価になるはずである。

Dmitriev モデルにおいて、WL による電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma = \Delta\sigma_a + \Delta\sigma_b$ ($\Delta\sigma_a$ は後方散乱、 $\Delta\sigma_b$ は非後方散乱に起因する電気伝導率の量子補正項) は、

$$\Delta\sigma_a = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \times \left\{ x \sum_0^\infty \frac{(P_n)^3}{1 - P_n} \right\}, \quad \Delta\sigma_b = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \times \left\{ -x \sum_0^\infty \frac{P_n \left[(P_n^1)^2/2 + (P_n^{-1})^2/2 \right]}{1 - P_n} \right\} \quad (4.9)$$

となり、

$$P_n = \frac{s}{z} \int_0^\infty dt \exp(-st - t^2/2) L_n(t^2), \quad (4.10)$$

$$P_n^m = \frac{s}{z\sqrt{n+(1-m)/2}} \int_0^\infty dt \exp(-st - t^2/2) L_n^m(t^2), \quad (4.11)$$

$x = B/B_{tr}$ 、 $s = z(2/x)^{1/2}$ 、 $z = 1 + \tau/\tau_\phi = 1 + 1/L_\phi$ (L_ϕ が平均自由行程あたりの位相緩和長であることに注意) であり、 L_n 、 L_n^m はラゲール陪多項式と呼ばれる特殊関数である。一方、本研究で提案する WL モデルでは、非後方散乱補正項 $(1 + \cos \varphi_\nu)$ のうち、1 が後方散乱、 $\cos \varphi_\nu$ が非後方散乱への寄与を表し、量子補正項の計算の際に $(1 + \cos \varphi_\nu) \rightarrow 1$ とした計算結果が $\Delta\sigma_a$ 、 $(1 + \cos \varphi_\nu) \rightarrow \cos \varphi_\nu$ とした計算結果が $\Delta\sigma_b$ に対応する [48, 60]。

図 4.3 に、平均自由行程あたりの位相緩和長が (a) $L_\phi = 10$ 、(b) 100、(c) 1000 の時の本研究で提案した WL 効果による電気伝導率の量子補正項の計算結果 (実線) と Dmitriev モデル (破線) の比較をおこなった結果を示す。いずれの位相緩和長においても、高磁場まで $\Delta\sigma_a$ 、 $\Delta\sigma_b$ とともに Dmitriev モデルとよい一致を示している。また、ゼロ磁場の極限において、Dmitriev モデルは、

$$\Delta\sigma_a = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln \frac{\tau + \tau_\phi}{\tau} = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln(1 + L_\phi), \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_b &= \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \left(\frac{\ln 2}{1 + \tau/2\tau_\phi} - \frac{\ln(1 + \tau_\phi/\tau)}{1 + 2\tau_\phi/\tau} \right) \\ &= \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \left(\frac{\ln 2}{1 + 1/2L_\phi} - \frac{\ln(1 + L_\phi)}{1 + 2L_\phi} \right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

となる。図 4.3(d) に、本研究で提案した WL 効果の計算結果 (実線) と Dmitriev モデル (破線) のゼロ磁場での電気伝導率の量子補正項の比較を示すように、図 4.3(a-c) に示した位相緩和長以外でも非常に良い一致を示していることから、Dmitriev モデルの数値計算を本研究で提案した WL 効果の計算法に置き換えることが可能であるといえる。

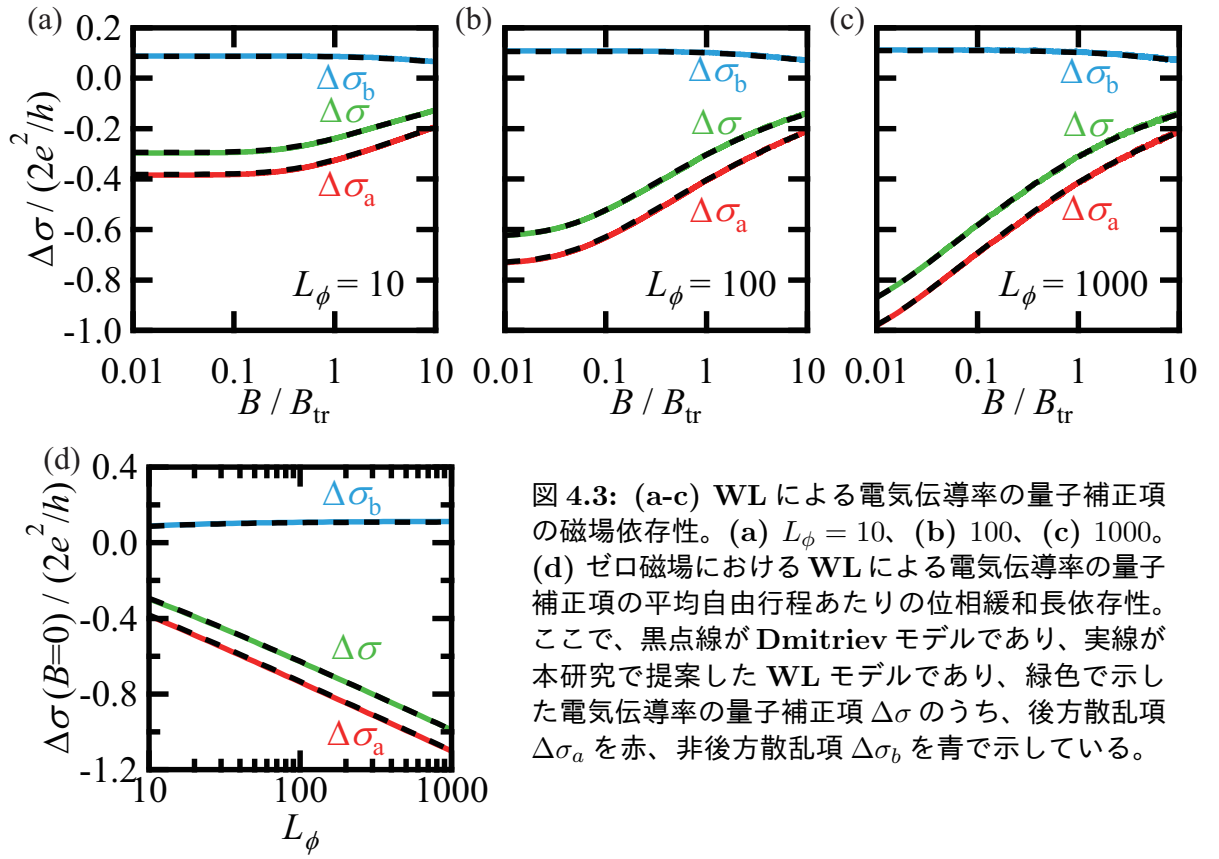


図 4.3: (a-c) WL による電気伝導率の量子補正項の磁場依存性。(a) $L_\phi = 10$ 、(b) 100、(c) 1000。(d) ゼロ磁場における WL による電気伝導率の量子補正項の平均自由行程あたりの位相緩和長依存性。ここで、黒点線が Dmitriev モデルであり、実線が本研究で提案した WL モデルであり、緑色で示した電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma$ のうち、後方散乱項 $\Delta\sigma_a$ を赤、非後方散乱項 $\Delta\sigma_b$ を青で示している。

4.3.2 Golub モデルとの比較

次に、一種類の SOI を導入したときの WAL による電気伝導率の量子補正項について、既存の Beyond diffusion モデルである Golub モデル [26, 63] と比較を行う。Golub モデルは非常に複雑な計算を要するが、SOI と不純物散乱によって生じるスピン緩和機構である D'yakonov-Perel (DP) 緩和機構 [72] を導入できる Beyond diffusion モデルという点で有用な WL/WAL モデルである。より計算が容易な本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法によって Golub モデルを再現することが可能であれば、SOI の評価手法としての WL/WAL 解析に利用される新たな計算法として非常に有用なものとなる。

Golub モデルにおいて、WL/WAL による電気伝導率の量子補正項は、

$$\Delta\sigma_a = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \left(\frac{\ell}{\ell_B}\right)^2 \sum_{N=0}^{\infty} \left\{ \text{Tr} [\mathbf{A}_N^3 (\mathbf{I} - \mathbf{A}_N)^{-1}] - \frac{P_N^3}{1 - P_N} \right\}, \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_b = & \frac{e^2}{\pi^2\hbar} \left(\frac{\ell}{\ell_B}\right)^2 \sum_{N=0}^{\infty} \left\{ \text{Tr} [\mathbf{K}_N \tilde{\mathbf{K}}_N \mathbf{A}_N (\mathbf{I} - \mathbf{A}_N)^{-1}] + \text{Tr} [\tilde{\mathbf{K}}_N \mathbf{K}_N \mathbf{A}_{N+1} (\mathbf{I} - \mathbf{A}_{N+1})^{-1}] \right. \\ & \left. - \mathbf{Q}_N^2 \left(\frac{P_N}{1 - P_N} + \frac{P_{N+1}}{1 - P_{N+1}} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.15)$$

と記述される。ここで、 $\ell = \sqrt{\hbar/eB}$ は磁気長、 $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{K}$ は 3×3 の行列であり、行列要素はラゲール陪多項式の積分によってあらわされる。具体的な Q_N 、 $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{K}$ の定義は複雑であるため、Golub [26] や Glazov [63] の論文を参照してほしい。減衰振動の振る舞いを示すラゲール陪多項式の積分と無限和の計算が必要になるため、注意深く数値計算を行わなければ正しい値を計算することができない。

図 4.4(a-c) に、本研究で提案した WL/WAL 効果による電気伝導率の量子補正項の計算結果と Golub モデルの比較を示す。ここで、平均自由行程を単位とした位相緩和長は (a) $L_\phi = 10$ 、(b) 100、(c) 1000 としている。また、SOI の大きさは平均自由行程当たりの Rashba SOI によるスピン回転角 θ_R によって表しており、どのような L_ϕ 、 θ_R であっても非常に良い一致を示していることから、Golub モデルの数値計算を本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法に置き換えることが可能であり、新たな WL/WAL のフィッティング解析手法として本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法が有用であることを示したといえる。

また、SOI の形として波数 k に対してリニアになる Rashba SOI だけでなく、Dresselhaus SOI の cubic 項についても考察を行う。図 4.4(d-i) に、本研究で提案した WL/WAL

効果の計算結果と Golub モデルのゼロ磁場での電気伝導率の量子補正項の比較を示す。ここで、(d-f) は Rashba SOI、(g-i) は Dresselhaus SOI の cubic 項を仮定している。小さい SOI から大きい SOI まで、Rashba SOI でも Dresselhaus SOI の cubic 項でも非常に良い一致を示すことから、本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法は SOI の cubic 項にも対応していることがわかる。

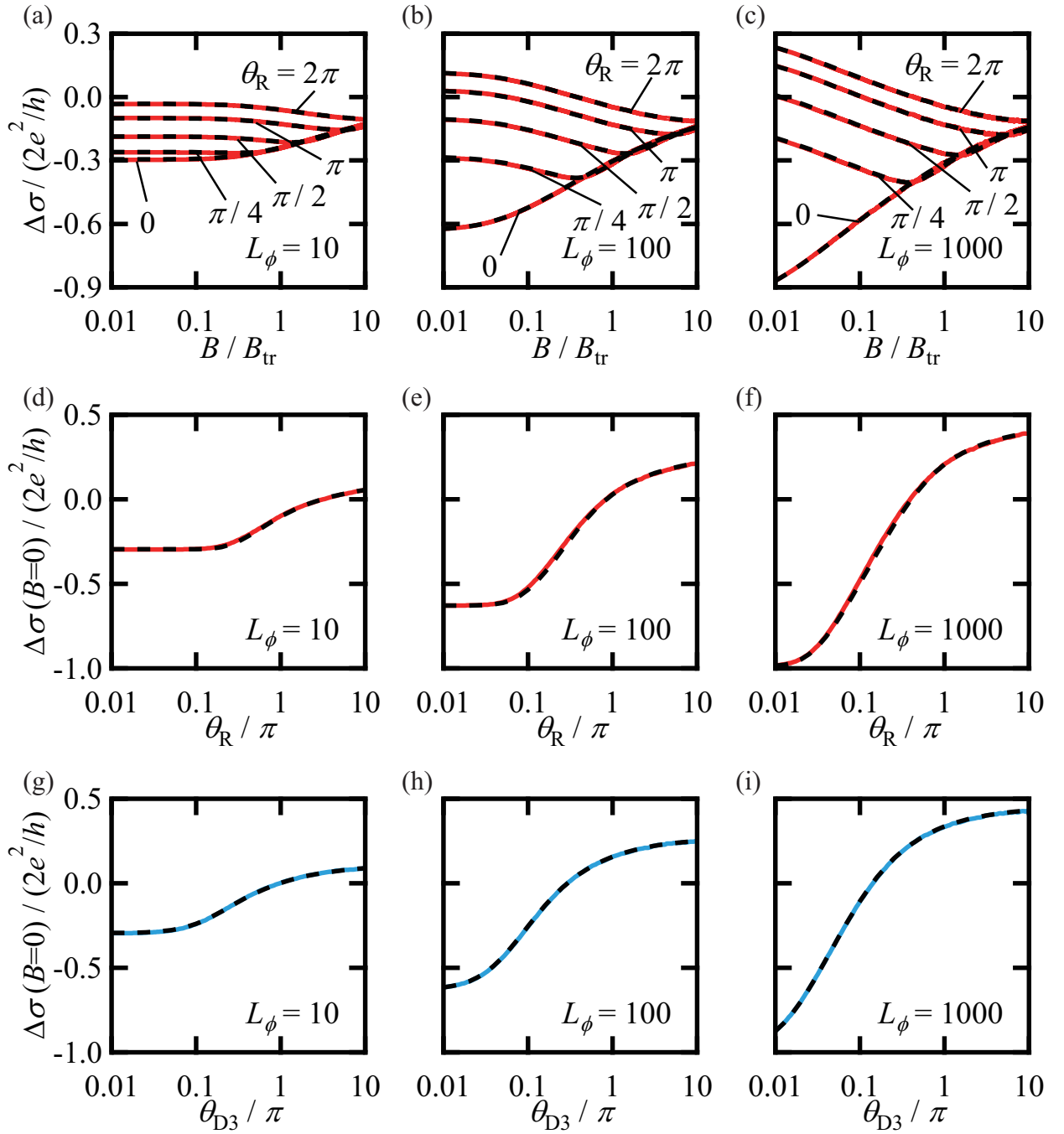


図 4.4: (a-c) WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の磁場依存性。ここで、平均自由行程あたりの Rashba SOI によるスピン回転角は、それぞれ、 $\theta_R = 0, \pi/4, \pi/2, \pi, 2\pi$ の時を示している。(d-i) WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の平均自由行程あたりのスピン回転角依存性。(d-f) Rashba SOI、(g-h) Dresselhaus SOI の cubic 項によるスピン回転を導入した時の電気伝導率の量子補正項。実線が本研究で提案した WL/WAL 効果の計算結果であり、点線が Golub モデルの数値計算結果であり、計算に用いた位相緩和長は平均自由行程を単位として、それぞれ、(a,d,g) $L_\phi = 10$ 、(b,e,h) 100、(c,f,i) 1000 である。

4.4 数値誤差の評価

本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法が既存の Beyond diffusion モデルを厳密に再現することを示したが、実空間シミュレーションから干渉強度の平均を計算しているため、十分な大きさの母集団を用いて平均を計算しなければ、真値からのずれが大きくなってしまいフィッティング解析の際に支障が出る可能性がある。本節では、サンプルサイズ、つまり、 N_{orbit} に対する数値誤差を見積もることで、本研究で提案した WL/WAL モデルの信頼の高さを示す。

式 (4.1) に示すように、WL/WAL による電気伝導率の量子補正項は N_{orbit} 個の再帰経路での干渉強度の平均値から計算される。一方、 N_{orbit} 個の再帰経路での干渉強度の揺らぎの大きさ $\delta \langle X_\nu \rangle_{\text{orbit}}$ は、干渉強度の二乗平均 $\langle X_\nu^2 \rangle$ と平均の二乗 $\langle X_\nu \rangle^2$ から計算され、

$$\delta \langle X_\nu \rangle_{\text{orbit}} = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{orbit}}}} \sqrt{\langle X_\nu^2 \rangle - \langle X_\nu \rangle^2} \quad (4.16)$$

となる。数値計算によって生じる WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の揺らぎの大きさ（標準偏差）の磁場依存性 $\delta \Delta \sigma(B)$ は、

$$\delta \Delta \sigma(B) = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} F_0 \times \delta \langle X_\nu \rangle_{\text{orbit}} = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} F_0 \times \frac{1}{\sqrt{N_{\text{orbit}}}} \sqrt{\langle X_\nu^2 \rangle - \langle X_\nu \rangle^2} \quad (4.17)$$

となる。 $\langle X_\nu^2 \rangle$ の真値を知ることはできないが、 $N_{\text{orbit}} = 147,885$ のような十分大きい再帰経路から求められる $\langle X_\nu^2 \rangle$ は真値に限りなく近いとして、 N'_{orbit} 個の再帰経路で生じる数値誤差を議論すると、

$$\begin{aligned} \delta \Delta \sigma(B) &< \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} F_0 \times \frac{1}{\sqrt{N'_{\text{orbit}}}} \times \sqrt{\frac{1}{N_{\text{orbit}}} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} x_\nu^2 \cos^2 \left(\frac{B}{B_{\text{tr}}} S_\nu \right)} \\ &= \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} F_0 \times \frac{1}{\sqrt{N'_{\text{orbit}}}} \times \sqrt{\frac{1}{2N_{\text{orbit}}} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} x_\nu^2 \left[1 + \cos^2 \left(\frac{2B}{B_{\text{tr}}} S_\nu \right) \right]} \\ &= \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} F_0 \times \frac{1}{\sqrt{N'_{\text{orbit}}}} \times \sqrt{\frac{\sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} x_\nu^2 + \sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} x_\nu^2 \left[1 + \cos^2 \left(\frac{2B}{B_{\text{tr}}} S_\nu \right) \right]}{2N_{\text{orbit}}}} \\ &= \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} F_0 \times \frac{1}{\sqrt{N'_{\text{orbit}}}} \times \sqrt{\frac{\sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} x_\nu^2 + \sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} x_\nu^2 \left[1 + \cos^2 \left(\frac{B'}{B_{\text{tr}}} S_\nu \right) \right]}{2N_{\text{orbit}}}} \end{aligned} \quad (4.18)$$

となる。ここで、 $B' = 2B$ であり、簡単化のために $\sqrt{\langle X_\nu^2 \rangle - \langle X_\nu \rangle^2} \rightarrow \sqrt{\langle X_\nu^2 \rangle}$ としているが数値誤差を低く見積もるような処理はおこなっていない。式 (4.18) を FFT の形で求めるために、 $w[i]$ と同様に x_ν^2 に対する面積ヒストグラム $w_2[i] = \sum_{j=1}^{N_i} x_j^2$ および $w_2[i]$ に FFT をおこなった $w_2[i]_{\text{FFTed}}$ を用いることで、

$$\delta\Delta\sigma[i] < \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} F_0 \times \frac{1}{\sqrt{N'_{\text{orbit}}}} \times \sqrt{\frac{w_2[0]_{\text{FFTed}} + w_2[i]_{\text{FFTed}}}{2N_{\text{orbit}}}} \quad (4.19)$$

$$B[i] = \frac{B'[i]}{2} = \frac{i}{2^N} \times \frac{\pi B_{\text{tr}}}{2\Delta S} \quad (4.20)$$

となる。数値誤差の大きさは $1/\sqrt{N'_{\text{orbit}}}$ に比例することが分かる。

図 4.5(a-c) に θ_R と B に対する電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma$ のイメージプロットを示し、図 4.5(d-e) に θ_R と B に対する $N'_{\text{orbit}} = N_{\text{orbit}} = 147,885$ の時の $\delta\Delta\sigma$ のイメージプロットを示す。およそ $\Delta\sigma$ の変化量に対して、 $\delta\Delta\sigma$ の大きさは 1% 未満と非常に小さい値であることが分かる。また、 N'_{orbit} の値を 10 分の 1 程度まで削減し、計算時間を 10 分の 1 とし、3 ~ 4% 程度の数値誤差しか生じないため、大まかなフィッティング解析ならば十分に行える。

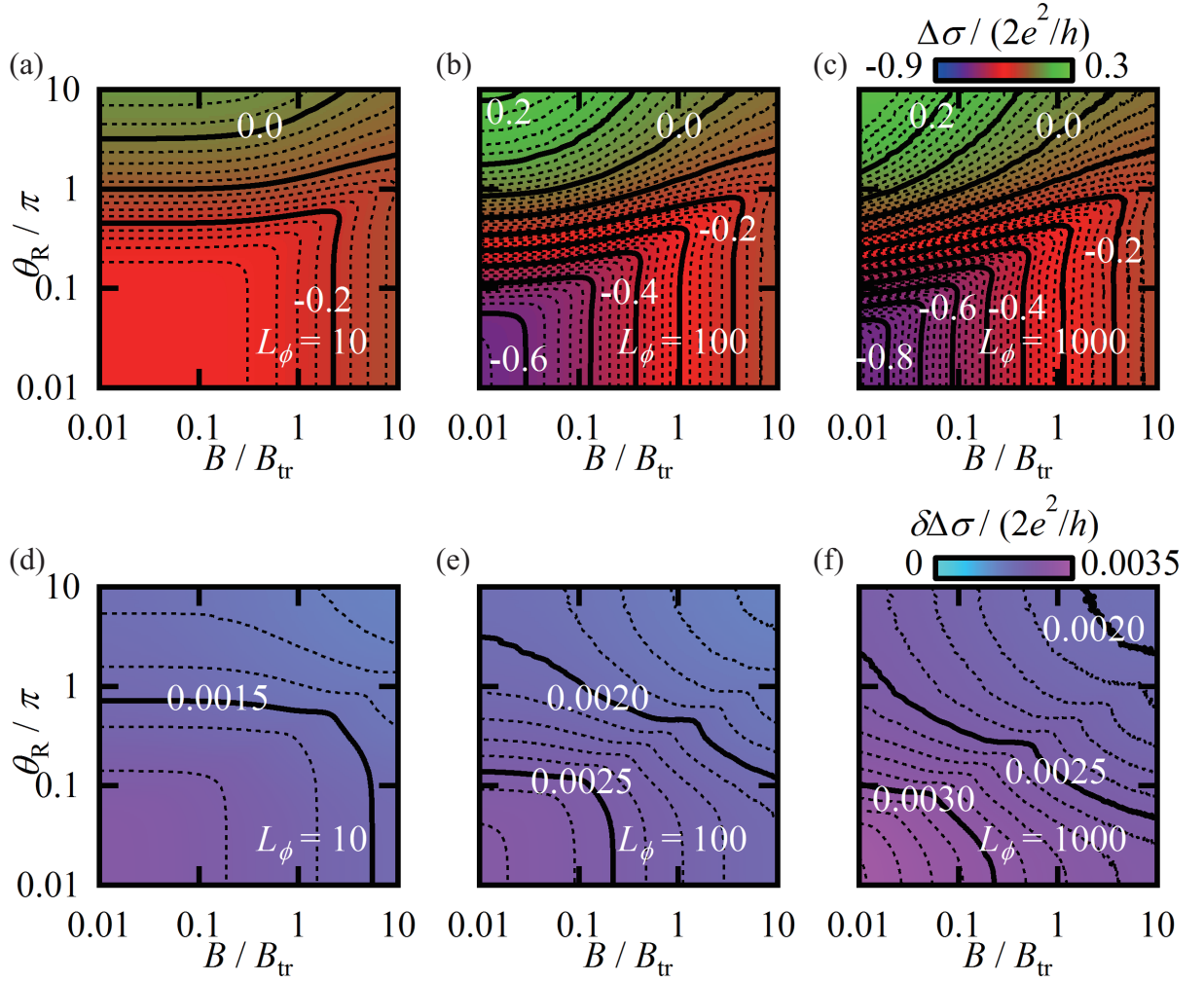


図 4.5: (a-c) 本研究で提案した WL/WAL モデルから計算された θ_R と B に対する WL/WAL による電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma$ のイメージプロット。(d-f) 本研究で提案した WL/WAL モデルから計算された θ_R と B に対する $N'_{\text{orbit}} = N_{\text{orbit}} = 147,885$ の時の $\delta\Delta\sigma$ のイメージプロット。また、計算に用いた平均自由行程あたりの位相緩和長は、それぞれ、(a,d) $L_\phi = 10$ 、(b,e) 100、(c,f) 1000 である。

4.5 Persistent spin helix 状態の解析

前節までは、既存の Beyond diffusion モデルを再現することを示してきたが、本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法は既存の Beyond diffusion モデルでは不可能な解析を可能とする。その一例として、複数の SOI が生じる系での WL/WAL 解析、特に、PSH 状態に関する WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の計算結果を示す。ここでは、SOI などの摂動ハミルトニアンを $H' = \tilde{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ のように定義することで、複数の SOI が存在していてもトータルな SOI はそれらのハミルトニアンの和で与えられるので計算が可能である。

PSH 状態とは、Rashba SOI と Dresselhaus SOI の大きさが同じときにスピン分離軸が一つの方向にそろう現象であり、このような状況下では DP 緩和機構によるスピン緩和が抑制されることが知られている。そのため、WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の測定において、ゲート制御によって Rashba SOI の大きさを変え、Dresselhaus SOI と同じ大きさになるときに WL ピークが観測されることが報告されている [13]。一方で、Dresselhaus SOI の中の cubic 項は PSH 状態を壊す働きがあり、ある程度の大きさの cubic 項が存在すると Rashba SOI と Dresselhaus SOI の大きさが同じになるときであっても WAL ピークが観測されることが報告されている [73]。上記の PSH 状態の解析はスピン緩和時間の決定によって行われるが、本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法を用いることで Rashba SOI や Dresselhaus SOI の大きさをフィッティング・パラメータとした解析が可能となる。

図 4.6 に平均自由行程あたりの位相緩和長 $L_\phi = 100$ における Rashba SOI と Dresselhaus SOI の中の linear 項によるスピン回転角 θ_R と θ_{D1} が同じ大きさの時に Dresselhaus SOI の中の cubic 項によるスピン回転角 $\theta_{D3} = 0, \pi/64, \pi/16$ の値の時の WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の磁場依存性を示す。また、縦軸は $\theta_R = \theta_{D1}$ の値を示している。図 4.6(a) では、 $\theta_{D3} = 0$ としているため、完全にスピン緩和が抑制され、SOI が存在しない時の WL による電気伝導率の量子補正項と同じになる。一方、図 4.6(b) では、 $\theta_{D3} = \pi/64$ であり、図 4.6(a) よりゼロ磁場ピークが小さくなっていることから、WAL ピークが観測されるほどではないが DP 緩和機構によるスピン緩和が生じていることを示している。さらに、図 4.6(c) に示すように、 $\theta_{D3} = \pi/16$ とすると、WL/WAL による電気伝導率の量子補正項がゼロ磁場以外で最小値（その時の磁場を $B_{\min}$ とする）となる WAL ピークが現れる

ことから、スピン緩和が大きくなっていることが分かる。また、 $\theta_R = \theta_{D1}$ の値が大きければ大きいほど、 $B_{\min}$ が小さくなっている。このことは、Rashba SOI と Dresselhaus SOI が大きな値で同じ大きさになる時の方がよりスピン緩和が抑制されることを示している。

以上のように、本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法を用いることで、複数の SOI が生じる系での WL/WAL による電気伝導率の量子補正項が計算可能であることを示した。ここでは、PSH 状態を引き合いに出したが、様々な一電子相互作用を導入することで、SOI 以外の効果によって引き起こされる WL/WAL 効果の研究も可能となる。

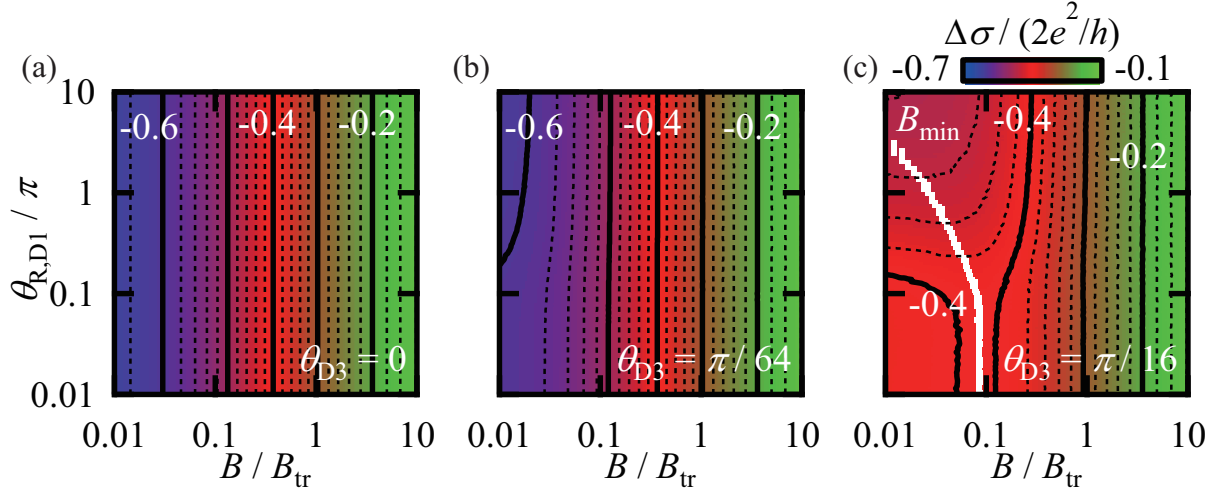


図 4.6: 本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法を用いたスピン回転角の大きさ（平均自由行程当たり）と B に対する WL/WAL による電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma$ のイメージプロット。ここで、縦軸は、Rashba SOI と linear Dresselhaus SOI によるスピン回転角の大きさ（平均自由行程当たり）を表し、 $\theta_R = \theta_{D1}$ である。また、計算に用いた cubic Dresselhaus SOI によるスピン回転角の大きさ（平均自由行程当たり）は、それぞれ、(a) $\theta_{D1} = 0$ 、(b) $\pi/64$ 、(c) $\pi/16$ であり、(c) に示す白点は電気伝導率の量子補正項が最小となる時の磁場 $B_{\min}$ を示している。

4.6 小括

本章では、再帰確率を実空間シミュレーションにより計算の有用性を示すことを目的とした。バルク 2DES での WL/WAL による電気伝導率の量子補正項を実空間におけるランダムウォーク・シミュレーションによって計算する手法を示し、既存の WL/WAL モデルとの比較をおこなった。WL に関しては、高磁場領域・あらゆる位相緩和長の時であっても、後方散乱項と非後方散乱項の両方で Dmitriev モデルを本研究で提案した WL 効果の計算法によって再現した。WAL に関しては、高磁場領域・あらゆる SOI によるスピン回転角・位相緩和長の時であっても、Golub モデルを本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法によって再現した。また、計算が容易であり、計算時間が短くても数値誤差が非常に小さいことを示した。このことから、既存の Beyond diffusion モデルの数値計算を本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法に置き換えることが可能であり、新たな WL/WAL のフィッティング解析手法として本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法が有用であることを示したといえる。

さらに、本研究で提案した WL/WAL 効果の計算法の汎用性の高さを示すために、PSH 状態のような複数の SOI が生じる系の解析が可能であることを示した。本論文では、PSH 状態を引き合いに出したが、グラフェンなどの偽スピンやバレー自由度に関わる系 [69] での WL/WAL の解析にも適用が可能であると考えられ、様々なバルク 2DES における WL/WAL の解析に貢献できるであろう。

第5章 メゾスコピックリング配列構造中のカオス軌道解析 による電子パラメータの抽出

5.1 概要

本章では、メゾスコピックリング配列構造（MRA：Mesoscopic ring array）中のカオス経路を利用した新たな物性解析手法の提案・実証を行う。本手法はWL/WAL（あるいは同一の物理起源を有するAAS効果 [65]）に基づいているが、図5.1に示すようにMRAという微細構造の形状によって再帰経路が決まるため、MRAがある種の“ものさし”として長さスケールを提供し、バルク2DESのWL/WAL解析の場合に要求される平均自由行程 ℓ の情報が不要となる。本研究で用いる図5.1(b)のようなMRAでは、電子の古典的なビリヤード運動がカオスになる。カオス構造が持つ乱雑さが存在するため、再帰経路は不純物散乱によって生じる乱雑さの影響を受けにくい。そのため、長さスケールの測定を必要とせず、電気伝導率の量子補正項のフィッティング解析だけでスピン回転角を直接決定することが可能である。本手法の有用性を示すために、MRAを有する $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 量子井戸での電気伝導率の磁場・ゲート電圧及び温度依存性を測定し、実空間シミュレーションによる再帰経路と干渉強度の計算による電気伝導率の量子補正項のフィッティング解析を行う。また、不純物散乱の影響を考慮することで、半古典論では類を見ない程、実験結果を再現する。これにより、スピン回転角だけでなく、位相緩和時間などの物性値の決定を可能とし、そこで決定した物性値とバルク測定によって決定された物性値との比較・考察を行う。本手法は、 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 量子井戸にとどまらず様々な2次元試料 [6, 17–21, 74] に対しても適用可能と思われ、微細構造を利用した新たな物性評価手法となり得る。

5.2 測定試料・環境

本研究では図5.2のような $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 量子井戸エピ成長基板を用いる。また、ドーパ量に関しては、 $n_1 = 2.0 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$ 、 $n_2 = 2.0 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$ であるKH1-3及び $n_1 = 1.5 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$ 、 $n_2 = 2.5 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$ であるKH3-1を用いる。KH1-3及びKH3-1はゲート制御によりRashba SOIの符号を反転させることが可能であり、Rashba SOIが消

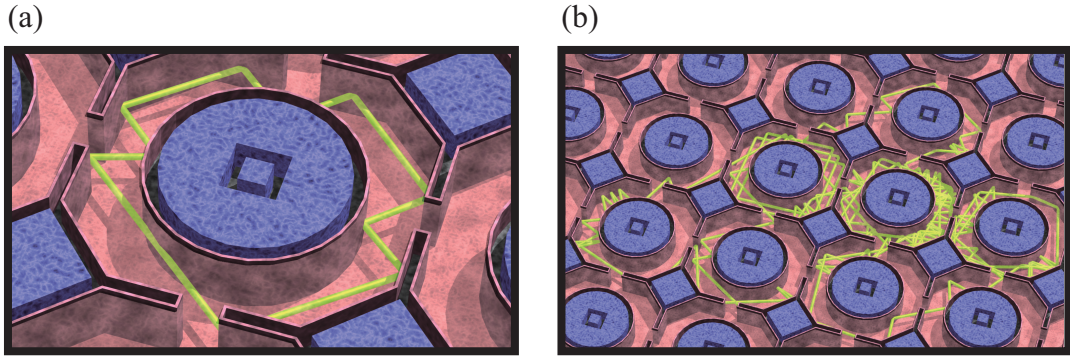


図 5.1: MRA 中を周回する再帰経路の模式図。(a) 単純な 1 リングを周回する再帰経路。(b) 乱雑なビリヤード経路をたどり複数のリングにまたがる再帰経路。

失するときのキャリア濃度 N_S^* は、KH1-3 では $N_S^* = 1.06 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ [4]、KH3-1 では $N_S^* = 1.9 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ （本研究室での先行研究）となる。本論文では、KH1-3 は電気伝導率の磁場及び温度依存性の測定（5.7）、KH3-1 は電気伝導率の磁場及びゲート電圧依存性の測定（5.3）と高磁場測定（5.6）にそれぞれ用いた。また、 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ の有効質量は $m^* = 0.047 \times m_0$ である [3]。

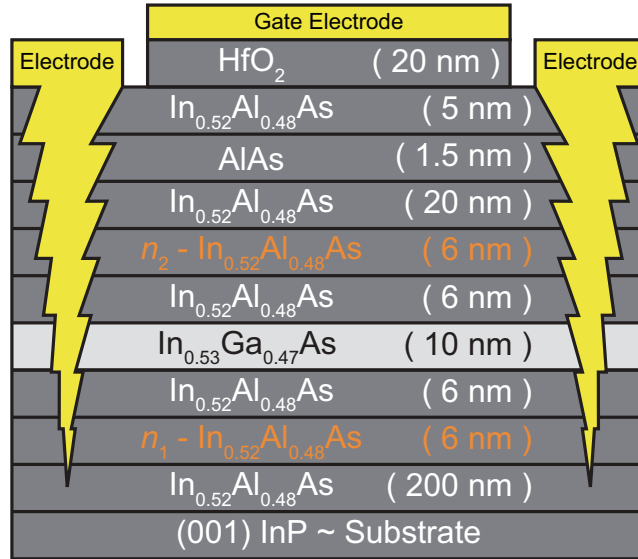


図 5.2: 実験で使用したダブルヘテロ接合量子井戸エピ成長基板の層構造。

次に、図 5.2 の基板に作製された MRA を有するホールバー素子について述べる。EB リソグラフィとドライエッチングによって図 5.3(a) のような MRA（構造のサイズに関して

は図5.3(b)に示す)を作製し、フォトリソグラフィとウェットエッチングによって図5.3(c)のようなホールバー構造を作製した。また、本研究で用いる MRA は縦52個、横104個の微細リングの配列構造であり、このような配列構造にすることで UCF や Aharonov-Bohm 効果のような時間反転経路間の干渉以外の量子干渉効果は平均化により消失する。これにより、微細構造に依存した時間反転経路間の干渉の寄与のみを明瞭に観測することができることが知られている [27, 75]。

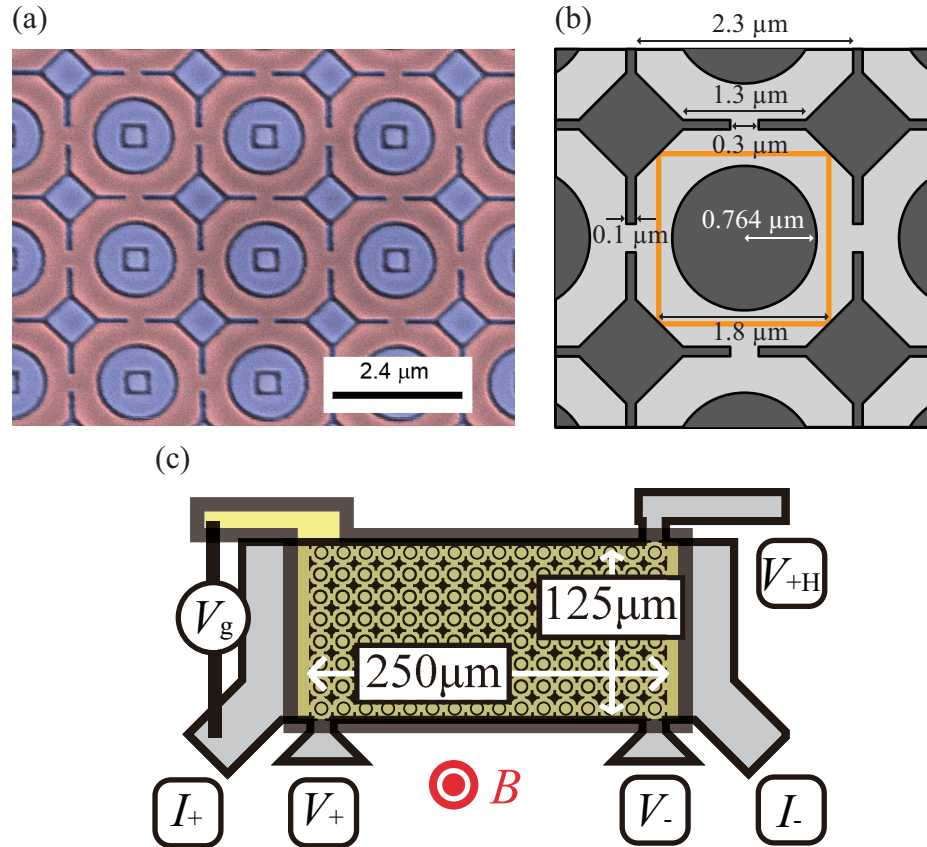


図 5.3: (a) 微細リング配列構造 (MRA) の SEM 像 (橙色で示した箇所が電子の伝導に寄与する部分)。 (b) EB リソグラフィの際の MRA の設計図。 (c) ホールバー構造。

参考文献 [32, 33] では MRA の中心の島の形は正方形であるが、本研究で用いる MRA の中心の島の形は円形にしている理由について述べる。バリスティック量子ドットでは、図 2.5(a) のような規則的なビリヤードか図 2.5(b) のようなカオス的なビリヤードかによって UCF [29] や WL [27] の振る舞いが異なることが知られている。一方、本研究で用いて

いる試料の平均自由行程はおよそ $1 \mu\text{m}$ であり、MRA のサイズと同程度であるため、不純物散乱の影響は無視できない。さらに、エッチング界面での電子の反射が理想的な鏡面反射である保証はないため、古典的には規則的なビリヤードになる系においてもビリヤード経路がカオスになる。しかしながら、参考文献 [32, 33] のようなレギュラー系の微細構造では、理想的には規則的なビリヤードを示す微細構造であるため、乱雑さを決めるパラメータとしての平均自由行程 ℓ_{imp} が必要となってしまう。そのため、MRA をカオス構造にすることにより、乱雑さを決めるパラメータとしての平均自由行程 ℓ_{imp} を導入することなしに、Rashba 効果によるスピン回転角の大きさを直接抽出可能かを試みた。

本研究の測定は、 ^3He と ^4He の混合気体を利用した希釈冷凍機中で 1 K 以下の極低温でおこなった。また、超電導ソレノイドを用いて面直方向に磁場を印加し、四端子測定を行うことで電気伝導率の磁場依存性を測定している。具体的には、 I_+ 端子と I_- 端子の間の電流を I_{xx} 、 V_+ 端子と V_- 端子の間の電圧を V_{xx} とし、測定部分が $125 \mu\text{m} \times 250 \mu\text{m}$ のサイズであることを考慮すると、電気伝導率 σ は、

$$\sigma = \sigma_{xx} = \frac{250 \mu\text{m}}{125 \mu\text{m}} \times \frac{I_{xx}}{V_{xx}} = 2 \frac{I_{xx}}{V_{xx}} \quad (5.1)$$

と与えられる。

5.3 微細リング配列構造中の電気伝導率の量子補正項のゲート電圧依存性

5.3.1 測定結果

希釈冷凍機のベース温度 $T = 15 \text{ mK}$ の極低温下（電子温度は 100 mK 程度、付録 A 参照）で、前述の四端子測定により電気伝導率の測定をおこなった。図 5.4(a) に面直磁場 $B = 0 \text{ mT}$ における電気伝導率 $\sigma_{B=0}$ のゲート電圧依存性を示しているが、ゲート電圧 V_g が増加するにつれ $\sigma_{B=0}$ が上昇している。これは V_g の増加によってキャリア濃度 N_S が増加しているからだと考えられる。また、電気伝導率の量子補正項の変化量に比べ、 $\sigma_{B=0}$ は大きい値であるため、本研究では $\sigma_{B=0}$ を電気伝導率の古典項 σ_0 としている。

図 5.4(b) に電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma$ のゲート電圧依存性のイメージプロットを示し、図 5.4(c) に図 5.4(b) の点線で示した V_g での $\Delta\sigma$ を示す。また、図 5.4(b) のイメージプロットでは、磁気振動の節に対応する $B = \pm 0.16 \text{ mT}$ を基準にプロットしている。緑

点線で示した $V_g = 0.85$ V (図 5.4(c) 左) と青点線で示した $V_g = 0.40, 1.30$ V (図 5.4(c) 右) の $\Delta\sigma$ では、磁気振動の振幅が反転していることが分かる。このことは、図 5.4(b) のイメージプロットで赤点線を境に赤と緑が反転していることに対応する。これは、ゲート電圧により Rashba 効果によるスピン回転角が変化し、リングを周回し再帰する経路におけるスピン干渉の符号が反転したことに起因する。また、 $V_g = 0.55, 1.15$ V においては、単純な正方形ループ (MRA においては図 5.3(b) の橙色で示す周回経路) において再帰経路のスピン干渉強度が反転する時の 1 辺あたりのスピン回転角は 0.4245π となる [31]。

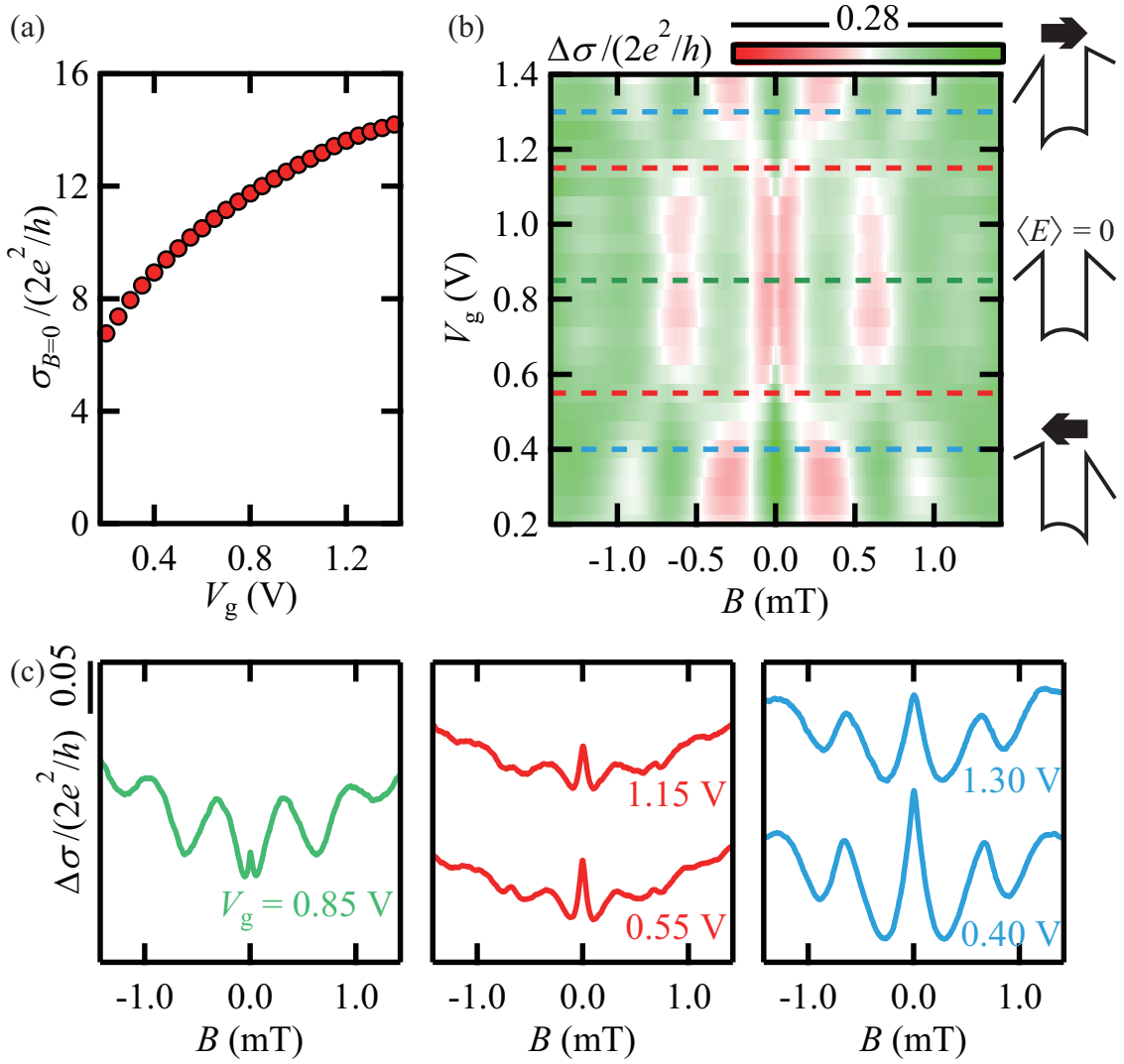


図 5.4: (a) 面直磁場 $B = 0$ での電気伝導率 $\sigma_{B=0}$ 。本論文では $\sigma_0 = \sigma_{B=0}$ としている。(b) 面直磁場 B とゲート電圧 V_g の関数として表した電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma$ のイメージプロット。(c) (b) の点線で示したゲート電圧 V_g における電気伝導率の量子補正項 $\Delta\sigma$ 。

5.3.2 Rashba SOI に関する Onsager の対称性

図 5.4(c) の赤線で示した $V_g = 0.55, 1.15$ V の電気伝導率の量子補正項の磁場依存性、及び青線で示した $V_g = 0.40, 1.30$ V の電気伝導率の量子補正項の磁場依存性はそれぞれ似た振動を示している。これは図 5.4(b) を見るとより明白であり、緑点線で示した $V_g = 0.85$ V を境にイメージプロットの上下で対称的な電気伝導率の量子補正項の磁場依存性が観測されている。これは、 $V_g = 0.85$ V を境に内部電場 $\langle E_z \rangle$ が符号反転し、Rashba SOI の符号反転が生じるため、スピンの回転方向が反転している（もしくは、有効磁場が反転している）ことに対応している。通常の磁場に対する Onsager の対称性 [76]、

$$\Delta\sigma(\mathbf{B}_{\text{SOI}}, B) = \Delta\sigma(\mathbf{B}_{\text{SOI}}, -B) \quad (5.2)$$

だけでなく、Rashba SOI に対する Onsager の対称性、

$$\Delta\sigma(\mathbf{B}_{\text{SOI}}, B) = \Delta\sigma(-\mathbf{B}_{\text{SOI}}, B) \quad (5.3)$$

が存在することを示している。キャリア濃度 N_S や移動度 μ 、不純物散乱の配置などがゲート電圧によって変化しているにもかかわらず、明瞭に式 (5.3) がはじめて実験的に観測されたことは驚くべきことである。このような Rashba SOI に対する Onsager の対称性が観測された要因として MRA という微細構造がカオス系であることが挙げられる。MRA がすでにカオス系であるために、ゲート電圧の変化で不純物散乱による乱雑さが変わったとしてもカオス系が持つ乱雑さに隠れてしまう。そのため、不純物散乱やキャリア濃度 N_S の変化は電気伝導率の古典項に強く影響を与えても、量子補正項に対してはあまり影響を与えないため、式 (5.3) で表される効果が明瞭に観測されたと考えられる。

本研究において、このような Rashba SOI に対する Onsager の対称性が観測された利点は二つある。一つ目は、キャリア濃度 N_S や移動度 μ 、不純物散乱の配置などがゲート電圧によって変化しているにもかかわらず、Rashba SOI によるスピン回転角の大きさだけで量子補正項の磁気振動の振幅の様子が決まる点であり、磁気振動を解析するだけで Rashba SOI によるスピン回転角の大きさを決定することが可能である証拠となる。二つ目は、 $\langle E_z \rangle = 0$ となり、Rashba SOI が消失するときのゲート電圧を曖昧さなく決定できる点である。本研究では、図 5.4(b) に緑色で示した $V_g = 0.85$ V で Rashba SOI が消失していると言え、本手法の評価を行う上で非常に有用な情報を提供する。

5.4 シミュレーション

本節では、前章で確立した実空間シミュレーションを用いたバルク 2DES における WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の計算手法を応用することで、実空間シミュレーションを用いた MRA 中の WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の計算方法を提案する。

5.4.1 理論

メゾスコピックリング配列構造における電気伝導率の古典項

MRA 中では不純物散乱だけでなく、エッチング界面での散乱も考慮する必要があるが、微細構造という幾何学な効果を解析的に取り扱うことは簡単ではない。そこで、MRA における電子の拡散をマクロな視点でとらえ、マクロな拡散係数 D_{meso} が定義できると仮定する。そうすると D_{meso} を式 (2.8) の Einstein の関係式中で用いて電気伝導率の古典項の計算が可能である。つまり、MRA 中の電気伝導率の古典項 σ_0 は、

$$\sigma_0 = 2e^2 \left\{ N(0) \times \frac{S'}{S'_0} \right\} D_{\text{meso}} \quad (5.4)$$

となる。ここで、MRA によって伝導に寄与する電子が存在する領域は図 5.3(a) の赤い部分に限られるため、加工前の 2DES の状態密度 $N(0)$ に対して次の補正が必要である。つまり、 $N(0)$ はユニットセルの面積 S'_0 中の伝導に寄与する面積 S' の比 S'/S'_0 だけ減らすべきである。

本論文では、おもに電気伝導率の量子補正項について議論を行うが、実空間シミュレーションによる伝導率の古典項の解析の可能性については付録 C にて議論する。

メゾスコピックリング配列構造における電気伝導率の量子補正項

式 (3.12) は、バルク 2DES における WL/WAL による電気伝導率の量子補正項を表しており、計算には平均自由行程 ℓ が必要となる。前述のようにエッチング界面による散乱を考慮すれば、不純物散乱だけを考慮した時の平均自由行程 ℓ_{imp} より短い MRA における平均自由行程 ℓ_{meso} となる。また、3.3.2 より、“線” による再帰判定 (3.3.2) をおこなった実空間シミュレーションから求めた再帰確率密度を表現すると、 $(2\Delta r \ell_{\text{meso}})^{-1}$ のファクターがつくため、MRA のあらゆる場所（伝導に寄与しないような図 5.3(a) の青色の部分

も含む) から始めた N_{seed} 個のビリヤード経路から計算される再帰確率密度は

$$W(0) = \frac{1}{2\ell_{\text{meso}}\Delta r N_{\text{seed}}} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} X_{\nu} \quad (5.5)$$

となる。ここで、 N_{seed} 個のビリヤード経路における再帰経路の数を N_{orbit} とし、 X_{ν} は再帰経路とその時間反転対称経路間の干渉強度であり、式 (4.3) によって計算される。 $W(0)$ はMRAの場所によって異なるはずであるため、ユニットセルで平均化された再帰確率密度 $\bar{W}(0) = \frac{1}{S'_0} \int_{S'_0} d\mathbf{r} W(0)$ を用いるが、伝導に寄与しない領域の再帰確率密度はゼロとなることから、伝導に寄与する領域のみで平均化された再帰確率密度を $\bar{W}'(0) = \frac{1}{S'} \int_{S'} d\mathbf{r} W(0)$ と定義すると、

$$\bar{W}(0) = \bar{W}'(0) \times \frac{S'}{S'_0} \quad (5.6)$$

となる。伝導に寄与する領域からスタートするビリヤード経路 N_{seed} 個に対して N_{orbit} 個の再帰経路が存在する時、MRAにおける式 (3.12) は、

$$\begin{aligned} \Delta\sigma &= -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \times 2\pi\ell_{\text{meso}}^2 \bar{W}'(0) \times \frac{S'}{S'_0} \\ &= -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \times 2\pi\ell_{\text{meso}}^2 \left(\frac{1}{2\ell_{\text{meso}}\Delta r N_{\text{seed}}} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} X_{\nu} \right) \times \frac{S'}{S'_0} \\ &= -\frac{2e^2}{h} \times \frac{S'}{S'_0} \times \frac{1}{2\Delta r/\ell_{\text{meso}}} \times \frac{1}{N_{\text{seed}}} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} X_{\nu} \end{aligned} \quad (5.7)$$

となる。ここで、MRAにおける拡散係数 D_{meso} 及び平均自由行程 ℓ_{meso} の間には、バルク2DESと同様に、

$$D_{\text{meso}} = \frac{1}{2}\ell_{\text{meso}}v_F \quad (5.8)$$

の関係が成り立つとすれば、MRAにおける電気伝導率の古典項 (式 (5.4)) と量子補正項 (式 (5.7)) の比は、

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} &= \frac{-\frac{2e^2}{h} \times \frac{S'}{S'_0} \times \frac{1}{2\Delta r/\ell_{\text{meso}}} \times \frac{1}{N_{\text{seed}}} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} X_{\nu}}{2e^2 \left\{ N(0) \times \frac{S'}{S'_0} \right\} \left(\frac{1}{2}\ell_{\text{meso}}v_F \right)} \\ &= -\frac{\lambda_F}{2\pi\Delta r} \frac{1}{N_{\text{seed}}} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} X_{\nu} \\ \Delta\sigma &= \sigma_0 \frac{\lambda_F}{\pi} \frac{1}{2\Delta r N_{\text{seed}}} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{orbit}}} X_{\nu} \end{aligned} \quad (5.9)$$

となる。ここでは、 $k_F = 2\pi/\lambda_F$ を用いている。本研究では、式 (5.9) における電気伝導率の古典項 σ_0 の値は実験値を用いる。

5.4.2 ビリヤード・シミュレーションを用いた再帰経路の計算

式 (5.9) を計算するためには、実空間シミュレーションによって求める再帰経路（軌道）のセットが必要となる。前章とは異なり、不純物散乱だけでなく、エッチング界面での鏡面反射を導入するが、再帰判定方法は同様に“線”による再帰判定 (3.3.2) を用いる。また、本シミュレーションでは次に述べる chaos only モデルと chaos+impurity モデルの二つのモデルを用いてフィッティング解析を行う。

chaos only モデルはカオス経路のみを考慮する実空間シミュレーションである。ここでのカオス経路とは、不純物散乱を考慮せずに、MRA の具体的な構造による壁反射のみによって生じる再帰経路のことを指す。具体的には、図 5.5(a) に示すように、経路の計算はエッチング界面での鏡面反射を考えるビリヤードボールモデルを用いた数値シミュレーションである。また、MRA 中の一部の再帰経路は同じ経路をたどり何度も周回するようなレギュラーな振る舞い（例えば図 5.3(b) の橙色で示す周回経路）をするため、それを排除する目的で不純物散乱による平均自由行程 $\ell_{\text{imp}} = 10 \mu\text{m}$ を導入する。この値はベースとなるバルク 2DES の平均自由行程 ($\ell \approx 1 \mu\text{m}$) より十分長く、位相緩和長 ($L_\phi \geq 100 \mu\text{m}$) より十分短いという条件を満たす範囲内で、ある程度任意に選んでも問題ない。

一方、chaos+impurity モデルは、不純物散乱効果の考慮が本質的となる実空間シミュレーションである。実際の試料では試料サイズと不純物散乱によって決定される平均自由行程 ℓ_{imp} が同程度であるため、より実際の実験結果を再現しようとする場合は、図 5.5(b) のようにエッチング界面での鏡面反射（橙色）だけでなく不純物散乱（赤色）を考慮する必要がある。実際の MRA 試料では構造からの壁反射と ℓ_{imp} でパラメータ化された確率的な散乱が同程度の頻度で発生するため、chaos only モデルよりも chaos+impurity モデルの方が現実にもっと近いものになると考えられる。

ビリヤード・シミュレーションでは、初期位置からの総走行距離 L がカットオフ長 L_{cutoff} に達した時、その初期条件でのビリヤード・シミュレーションは終了とする。4.2.3 と同様に、カットオフ長 L_{cutoff} は位相緩和長より十分長ければよく、本論文では $L_{\text{cutoff}} = 3000 \mu\text{m}$ とする。フィッティング解析に用いる位相緩和長は $500 \mu\text{m}$ までとしているため、このカッ

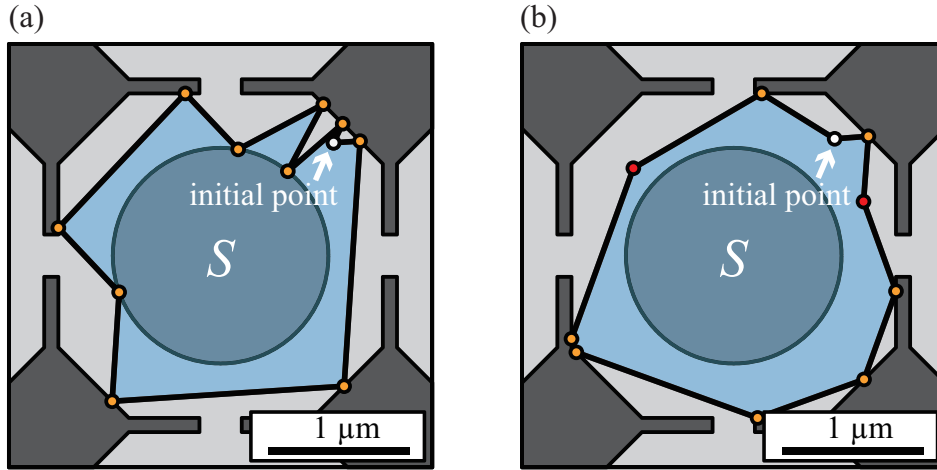


図 5.5: (a) chaos only モデル、(b) chaos+impurity モデルにおける再帰経路の模式図。橙点がエッチング界面での鏡面反射、赤点が不純物散乱を表している。

トオフ長は十分長い。

ビリヤード・シミュレーションでは、“線”による再帰判定 (3.3.2) を行うが、あまりにもゴールサイズ Δr を小さくしすぎると、十分な再帰経路の集合を得るために必要なビリヤード・シミュレーションの試行回数が多くなる。そのため、 $\Delta r = 0.05 \mu\text{m}$ としている。一方、このようにゴールサイズ Δr にある程度の大きさを持たせると、一つの初期条件から複数回再帰したと判定される経路が発生する。このような場合は、それぞれの再帰に対して発生する再帰経路をそれぞれ別の再帰経路としてカウントする必要がある。例えば、あるビリヤード経路が N_1 回目と N_2 回目の散乱で再帰判定された際に、再帰経路としては $r_1 \rightarrow r_2 \rightarrow \dots \rightarrow r_{N_1} \rightarrow r_1$ の経路と $r_1 \rightarrow r_2 \rightarrow \dots \rightarrow r_{N_1} \rightarrow r_{N_1+1} \rightarrow \dots \rightarrow r_{N_2} \rightarrow r_1$ の経路の両方を再帰経路としてカウントする。ここで、 $r_{N_1} \rightarrow r_{N_1+1}$ の線分と初期位置 r_1 の距離は Δr 以下である。

電気伝導率への寄与や再帰確率密度の場所依存性に関しては、すべての領域で均等に起きていると仮定するため、図 5.6 に示すようにビリヤードの開始位置をユニットセル（1 リング構造）で一様になるように選ぶ。実際には、MRA の対称性からユニットセルの $1/8$ の部分からのビリヤード発射を考慮するだけで十分である。本論文では、初期位置に関して 477 通り、角度に関して 512 通り、計 $N_{\text{seed}} = 477 \times 512 = 244,224$ 通りの初期条件に対する再帰経路を計算した。

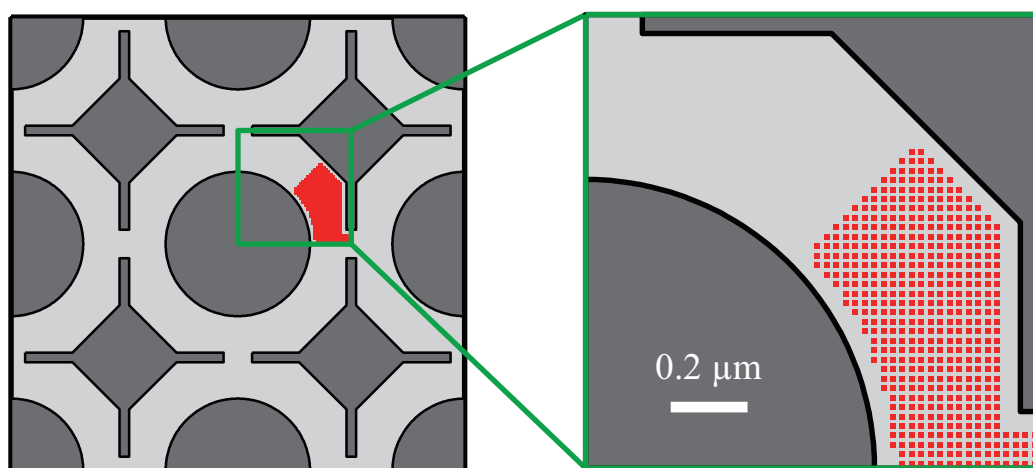


図 5.6: ビリヤード・シミュレーションでの電子発射の初期位置（赤点）。

5.5 量子補正項の磁気振動のゲート電圧依存性のフィッティング解析

5.5.1 chaos only モデルを用いた Rashba 効果によるスピン回転角の決定

参考文献 [31] の単純な正方形ループのモデルでは、 $V_g = 0.55, 1.15$ V のような磁気振動の振幅が最小となるのは $1.8 \mu\text{m}$ あたりのスピン回転角がおおよそ 0.4245π となるときであると示唆している。これは、 k_α に換算すると $|k_\alpha| = 0.370 \text{ rad}/\mu\text{m}$ となる。本節では、ビリヤード・シミュレーションによるフィッティング解析を用いてより正確なスピン回転角の決定を目指す。

$V_g = 0.85$ V の電気伝導率の量子補正項のフィッティング

初めに、残留 SOI や位相緩和長のおよその値を見積もる。そのために、Rashba SOI がほぼ消失している $V_g = 0.85$ V における電気伝導率の量子補正項に対して chaos only モデルによるフィッティング解析を行う。ここで注意すべき点として、残留 SOI とは Dresselhaus SOI や Random Rashba 効果 [77] などの Rashba SOI 以外の SOI のことを指しているが、これは Rashba SOI が消失しているにも関わらず、 $B = 0$ mT において WAL ピークが観測されていることからその存在を仮定せざるを得ない。実際の残留 SOI がどのようなメカニズムに起因しているかを探索するのは本研究の対象外であるが、スピン反転を伴う不純物散乱によるスピン緩和 (Elliot 緩和機構) を仮定した Hikami モデルと cubic Dresselhaus SOI を仮定した ILP モデルでは同一の WAL 曲線が導出されることを鑑み、残留 SOI を cubic Dresselhaus 型のハミルトニアンで仮定する。しかし、 $(H_R, H_{D+}^{(3)})$ と $(H_R, H_{D-}^{(3)})^\dagger$ の組み合わせでは異なる計算結果が出てしまうため、それぞれの組み合わせから計算される干渉強度の平均を用いることで異方性を排除している。また、残留 SOI の大きさは波数の次元で k_c [rad/ μm] として与え、 $2k_c$ は単位長さ当たりのスピン回転角となる。

本論文では、実験結果とシミュレーション結果の間の一致度は決定係数 r^2 を用いて比較を行う (付録 B)。また、chaos only モデルは電気伝導率の量子補正項のゼロ磁場周辺の磁気振動成分のみを再現するモデルであると言える。なぜなら、chaos+impurity モ

[†] H_{D+} と H_{D-} は、式 (2.33) の比例係数 β_3 が互いに符号反転の関係になるように定義する。

デルで計算される小さな面積を囲む再帰経路の相対数が減ってしまうからである。そのため、高磁場側で実験結果とシミュレーション結果が大きくずれる。そこで、高磁場のずれを無視できる $|B| \leq 0.32$ mT の磁場範囲でのみ決定係数 r^2 の計算を行うことにした。

残留 SOI による波数分離 k_c と位相緩和長 L_ϕ の関数とした決定係数 r^2 のイメージプロットを図 5.7(a) に示す。決定係数 r^2 が最大になるのは $k_c = 0.171$ rad/ μm 、 $L_\phi = 90$ μm の時である。図 5.7(b) に実験結果とフィッティング結果を示すように、 $|B| \leq 0.32$ mT の範囲で非常に良い一致を示すだけでなく、高磁場側での振動成分も再現していることが分かる。ここでは、フェルミ波長 λ_F に関しては実験結果とシミュレーション結果の振幅が $|B| \leq 0.32$ mT の範囲内で同じになるように選んでいる。以上のことから、chaos only モデルでは残留 SOI と位相緩和長の値として $k_c = 0.171$ rad/ μm 、 $L_\phi = 90$ μm を用いることにする。厳密には、 k_c と L_ϕ の値はゲート依存するが、少なくとも k_c のゲート依存は k_α のそれに比べると十分小さいと予測される。 k_α 値を V_g の関数として抽出することが本節の主眼であり、解析可能なパラメータ空間は限られるため、chaos only モデルで用いる k_c と L_ϕ の値は上記の値で固定する。

電気伝導率の量子補正項のゲート電圧依存性のフィッティング

本項では、前項で述べた残留 SOI 値 k_c と位相緩和長 L_ϕ の値は固定したまま、Rashba SOI による波数分離の大きさ k_α をパラメータとして実験結果のフィッティングを行うことで、 k_α のゲート電圧依存性を決定することを試みる。残留 SOI と同様に、Rashba SOI の大きさも波数の次元である k_α [rad/ μm] を用いる。また、バルク 2DES では k_α と Rashba 係数 α の間には

$$2k_\alpha = \frac{2\alpha m^*}{\hbar^2} \quad (5.10)$$

の関係が成り立つ [31]。前述と同様に $|B| \leq 0.32$ mT の磁場範囲の決定係数 r^2 を用いた実験結果と理論シミュレーションの間の定量的な比較を行う。

図 5.8 に各ゲート電圧の実験結果に対し各 k_α のシミュレーション結果の間の決定係数 r^2 のイメージプロットを示している。また、各ゲート電圧において決定係数 r^2 が最大になる k_α は赤点で示しており、おおよそ黒点線のようなゲート電圧に対してリニアに変化する振る舞いを示すことがわかる。特に、 $V_g = 0.55, 1.15$ V の実験データのフィッティングでは決定係数 r^2 が高い値を示す k_α の範囲が狭いため、高精度な k_α の決定が可能で

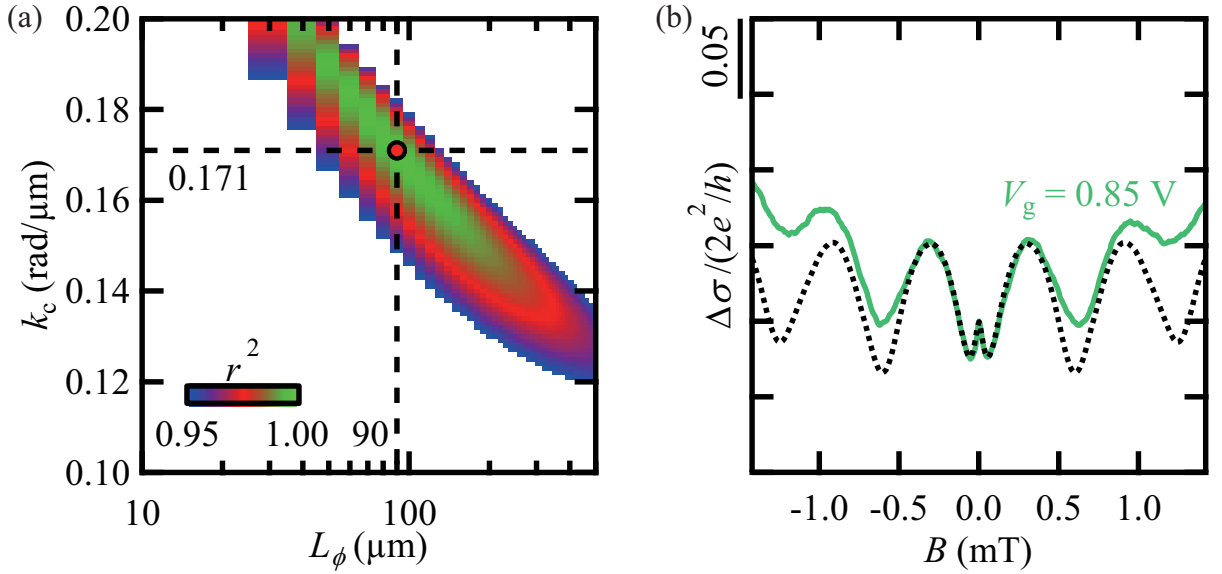


図 5.7: (a) Rashba SOI が消失している $V_g = 0.85$ V 時の電気伝導率の量子補正項とシミュレーションの間の決定係数 r^2 のイメージプロット。残留 SOI による波数分離 k_c と位相緩和長 L_ϕ をフィッティング・パラメータとしており、赤点で示す $k_c = 0.171$ rad/ μm 、 $L_\phi = 90$ μm の時に決定係数が最大 ($r^2 = 0.9958$) となる。(b) 決定係数が最大となる $k_c = 0.171$ rad/ μm 、 $L_\phi = 90$ μm の時のシミュレーション結果（黒点線）と Rashba SOI が消失している $V_g = 0.85$ V 時の電気伝導率の量子補正項の磁気振動（緑実線）。

ある。 $V_g = 0.55, 1.15$ V の電気伝導率の量子補正項の磁気振動の成分が最小となっており、このような振動が消失した時の $\Delta\sigma$ をうまくフィッティングできる k_α の領域が狭いことが高精度な k_α の決定につながっていると考えられる。また、ゲート電圧に対し内部電場 $\langle E_z \rangle$ が線形的に変化することと、Rashba SOI が $\langle E_z \rangle$ に対して線形的に変化することが実験的にも示されていることから、 k_α と V_g の関係を、

$$k_\alpha = -0.961 \times (V_g - 0.855) \text{ [rad}/\mu\text{m}] \quad (5.11)$$

と決定できる。式 (5.11) を用いると、 $V_g = 0.55, 1.15$ V の時、それぞれ $k_\alpha = 0.293$ rad/ μm 、 $k_\alpha = 0.284$ rad/ μm となり、単純な正方形ループで予測される値 ($k_\alpha = 0.370$ rad/ μm) よりも小さくなる。これは、微細リングを最短で再帰するような経路が正方形ループの距離に比べ、図 5.5(a) のようにビリヤード・シミュレーションでの再帰経路の方が距離が長くなるためだと考えられる。

また、参考文献 [4] より、 k_α は

$$k_\alpha = \frac{\alpha m^*}{\hbar^2} = \frac{|e|m_e}{2\varepsilon_S\varepsilon_0\hbar^2} \left(\frac{a_{\text{SO}}m^*}{m_e} \right) (N_S^* - N_S) \quad (5.12)$$

となる。ここで、 ε_0 は真空の誘電率、 $\varepsilon_S = 13.1$ は $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ の比誘電率、 N_S^* は $\alpha = 0$ ($k_\alpha = 0$) となる時のキャリア濃度である。式 (5.11) と式 (5.12) を利用することで、バルク 2DES 系を仮定したキャリア濃度をゲート電圧の関数として見積もることが可能である。また、KH3-1 においては、 $N_S^* = 1.9 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ 、 $a_{\text{SO}}m^*/m_e = 1.17 \text{ eV\AA}^2$ ($N_S = N_S^*$ の時) である。本研究におけるゲート範囲 $0.2 \text{ V} \leq V_g \leq 1.4 \text{ V}$ はキャリア濃度では $1.3 \times 10^{16} \text{ m}^{-2} \leq N_S \leq 2.4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ の範囲に対応することになる。

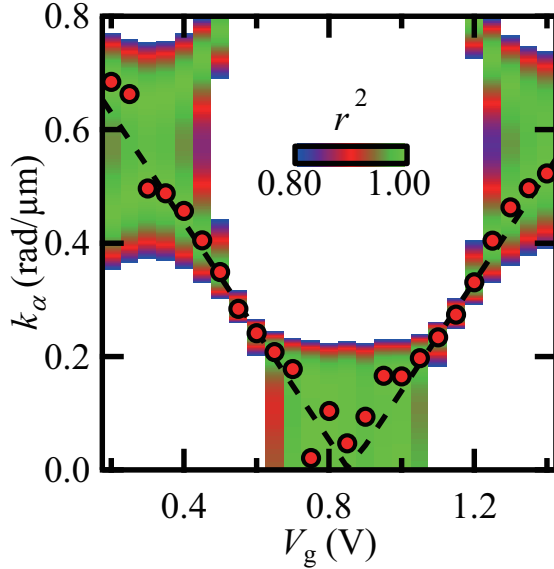


図 5.8: 各ゲート電圧 V_g における電気伝導率の量子補正項と各 Rashba SOI による波数分離 k_α におけるシミュレーション結果の間の決定係数 r^2 のイメージプロット。各 V_g において r^2 が最大になる k_α を赤点で示している。 V_g と k_α がリニアな関係とすると、黒点線のような振る舞いを示していると仮定される。

図 5.9(a) に各ゲート電圧における電気伝導率の量子補正項のフィッティング結果を示す。 $|B| = 0.32 \text{ mT}$ 周辺の量子補正項がゲート電圧が大きくなるにつれて赤 → 緑 → 赤と変化する様子がシミュレーションでも明瞭に再現されている。また、図 5.9(b) に $V_g = 0.40, 0.55, 0.85, 1.15, 1.30 \text{ V}$ の実験結果とフィッティング結果からも $|B| \leq 0.32 \text{ mT}$ の範囲で非常に良い一致を示していることがわかる。また、 $|B| > 0.32 \text{ mT}$ であっても、振動成分に関しては再現できていることがわかる。

図 5.9(c) に $|B| \leq 0.32 \text{ mT}$ の範囲での実験結果とフィッティング結果の一致度の高さを定量的に示すために、 $|B| \leq 0.32 \text{ mT}$ の範囲での実験結果の標準偏差を基準とした実験結

果とフィッティング結果の差のイメージプロットを示している。黒線で囲まれた領域は0.3以上となる領域を示しているが、ほとんどの領域で0.3を下回っており、高い一致度を示していることがわかる。

以上のことから、電気伝導率の量子補正項の測定・解析のみで Rashba SOI のゲート電圧依存性の決定が可能であることを実証したと言える。

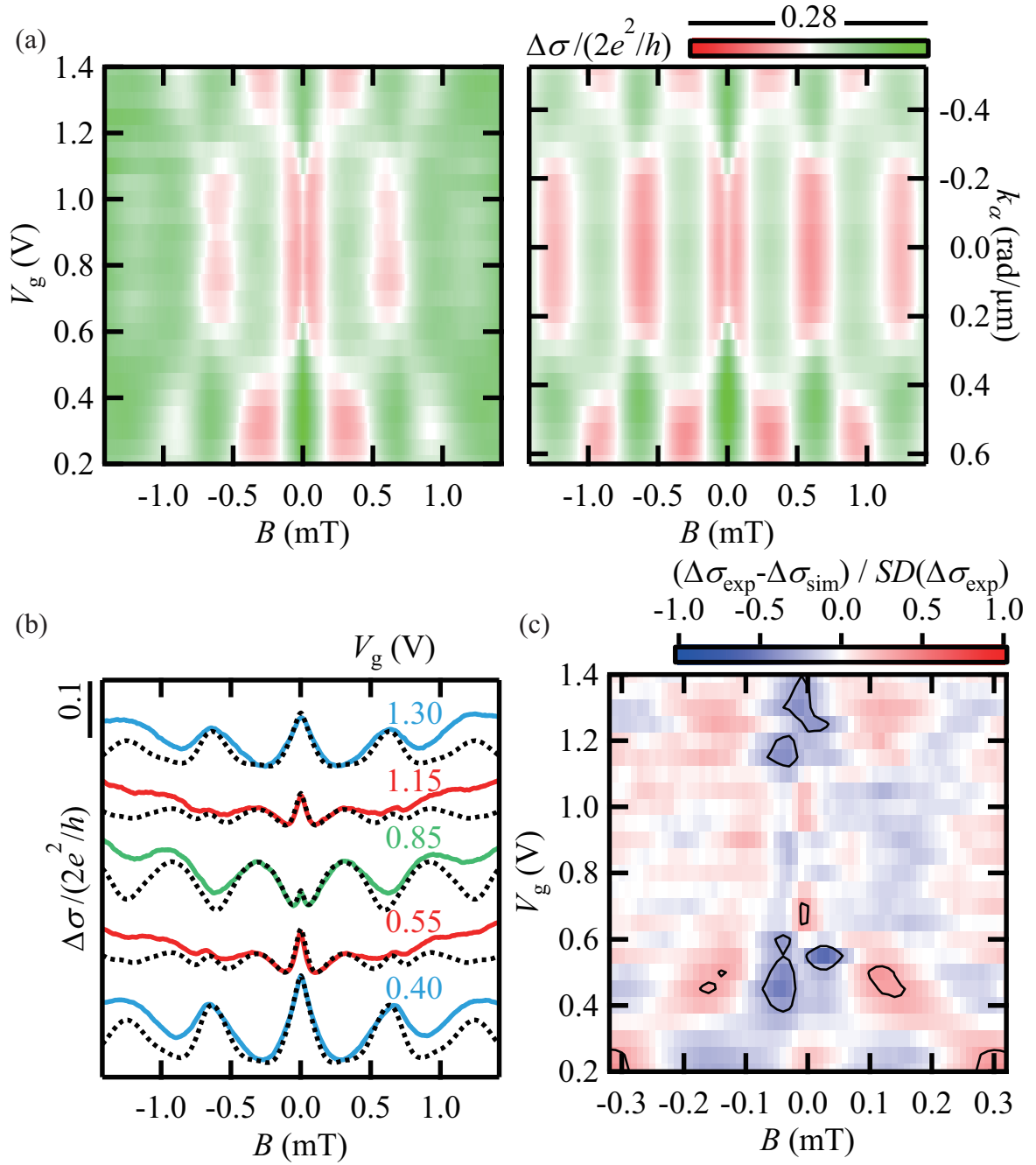


図 5.9: (a) 各ゲート電圧における電気伝導率の量子補正項（左）とフィッティング結果（右）の磁場依存性。(b) $V_g = 0.40, 0.55, 0.85, 1.15, 1.30$ V の時の電気伝導率の量子補正項（色実線）とフィッティング結果（黒点線）の磁場依存性。(c) 各ゲート電圧の量子補正項の標準偏差 $SD(\Delta\sigma_{\text{exp}})$ で規格化した $|B| \leq 0.32$ mT の領域における各ゲート電圧の実験結果とフィッティング結果の差。黒線で囲まれた領域以外は 0.3 以下となっている。

5.5.2 chaos+impurity モデルを用いた物性値の決定

$V_g = 0.85$ V の電気伝導率の量子補正項のフィッティング

chaos only モデルでは $\ell_{\text{imp}} = 10 \mu\text{m}$ としてフィッティング解析をおこなったが、実際の試料では $1 \mu\text{m}$ 程度の平均自由行程である。そのため、 $V_g = 0.85$ V の電気伝導率の量子補正項のフィッティング解析を $\ell_{\text{imp}} = 1 \mu\text{m}$ で行うことで、より実験結果を再現し、正確な残留 SOI による波数分離 k_c や位相緩和長 L_ϕ の決定を行える。 $\ell_{\text{imp}} = 1 \mu\text{m}$ は $V_g = 0.85$ V での k_c を抽出するための暫定的なものである。抽出された k_c 値は $\ell_{\text{imp}} = 1 \mu\text{m}$ の周辺でほぼ一定値となったことにより、この方法の正当化ができる。

$\ell_{\text{imp}} = 1 \mu\text{m}$ とし、 k_c 、 L_ϕ をパラメータとしたフィッティング結果を図 5.10 に示す。ここで、実験結果とシミュレーション結果の間の WAL ピークの一致度を見るために、決定係数 r^2 の計算は $|B| \leq 0.32$ mT の磁場範囲でおこなった。

図 5.10(a) に示すように、 $k_c = 0.121$ rad/ μm 、 $L_\phi = 300 \mu\text{m}$ の時に r^2 が最大になった。図 5.10(b) に実験結果とフィッティング結果の比較を示すように、ゼロ磁場周辺だけでなく高磁場でも実験結果をかなり忠実に再現していることが分かる。

電気伝導率のゲート電圧依存性のフィッティング

次に、式 (5.11) で示した k_α と V_g の関係と $k_c = 0.121$ rad/ μm を使い、不純物散乱による平均自由行程 ℓ_{imp} と位相緩和長 L_ϕ をパラメータとした電気伝導率の量子補正項のフィッティングをおこなった。ここで、 ℓ_{imp} による高磁場の一致度も含めて確認するために、決定係数 r^2 の計算は $|B| \leq 1.42$ mT の磁場範囲でおこなった。

その結果を図 5.11 に示す。図 5.11(a) にゲート電圧 (Rashba SOI) に対する実験結果 (左)、フィッティング結果 (右) のイメージプロットを示す。図 5.11(b) に示すように、 $V_g = 0.40, 0.55, 0.85, 1.15, 1.30$ V の電気伝導率の量子補正項の実験結果とシミュレーション結果は高磁場まで非常に良い一致を示していることが分かる。また、図 5.11(c) に $|B| \leq 0.142$ mT の範囲での実験結果とフィッティング結果の一致度の高さを定量的に示すために、 $|B| \leq 0.142$ mT の範囲での各ゲート電圧の実験結果 $\Delta\sigma_{\text{exp}}$ の標準偏差 $SD(\Delta\sigma_{\text{exp}})$ に対する (V_g, B) における $\Delta\sigma_{\text{exp}}$ とフィッティング結果 $\Delta\sigma_{\text{sim}}$ の差のイメージプロットを示している。黒線で囲まれた領域は 0.3 以上となる領域を示しているが、高磁場も含め、

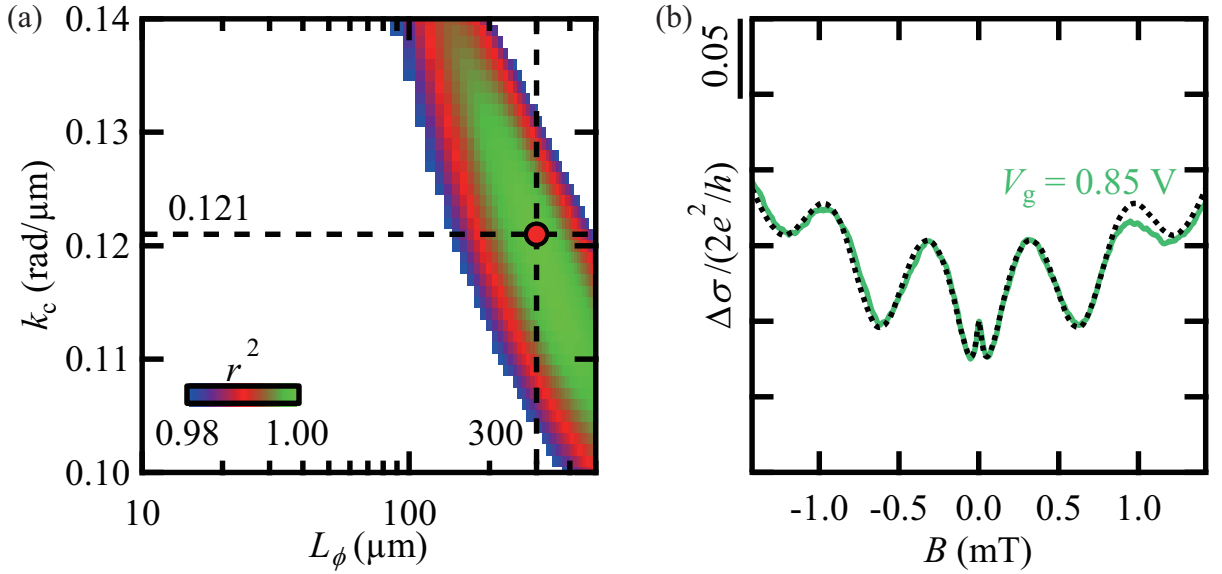


図 5.10: (a) Rashba SOI が消失している $V_g = 0.85$ V 時の電気伝導率の量子補正項と chaos+impurity モデルによるシミュレーション結果との間の決定係数 r^2 のイメージプロット。残留 SOI による波数分離 k_c と位相緩和長 L_ϕ をフィッティング・パラメータとしており、赤点で示す $k_c = 0.121$ rad/ μm 、 $L_\phi = 300$ μm の時に決定係数が最大の $r^2 = 0.9996$ となる。(b) 決定係数が最大となる時のシミュレーション結果 (黒点線) と Rashba SOI が消失している $V_g = 0.85$ V 時の電気伝導率の量子補正項 (緑実線)。

ほとんどの領域で 0.3 を下回っており、高い一致度を示していることがわかる。

図 5.12 にフィッティング解析によって抽出されたパラメータのゲート電圧依存性を示す。初めに、図 5.12(a) のフェルミ波長 λ_F のゲート電圧依存性について述べる。ここで、 λ_F はキャリア濃度によって $\lambda_F = \sqrt{2\pi/N_S}$ のように計算されるため、前述の k_α から見積もられた N_S を用いて計算された λ_F を黒点線で示している。本解析で決定された λ_F はバルク 2DES に関して k_α から見積もられた λ_F と似たゲート電圧依存性を示すことがわかった。このことは、電気伝導率の量子補正項のフィッティング解析によって定量的にフェルミ波長を決定できる可能性があることを示している。

次に述べるのは、図 5.12(b) に示す ℓ_{imp} のゲート電圧依存性である。ここでは、ほとんどのゲート電圧において $\ell_{\text{imp}} = 0.9$ μm 程度となることが分かった。ちなみに、バルク 2DES では $N_S = 1.3 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ (本実験の $V_g = 0.2$ V) の時に $\ell = 1.13$ μm 、 $N_S = 2.4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ (本実験の $V_g = 1.4$ V) の時に $\ell = 2.17$ μm となり [78, 79]、本解析によって決定した平均自由行程はバルク 2DES の値と同じオーダーになるが、ゲート電圧に対する変化がほとん

どないことから、 ℓ_{imp} がバルク 2DES における平均自由行程そのものを表すわけではないと考えられる。

最後に、図 5.12(c) の本解析で決定された位相緩和長 L_ϕ のゲート電圧依存性については、ほとんどが $L_\phi \sim 250 \text{ } \mu\text{m}$ (位相緩和時間 τ_ϕ に換算するとおよそ $\tau_\phi = 3 \times 10^{-10} \text{ s}$ 程度 [$V_g = 0.85 \text{ V}$]) であり、バルク 2DES での位相緩和時間と大きく外れる値ではない。ここに示されている L_ϕ の V_g 依存を説明する理論モデルは構築できない。これは、ゲートディプリケーションや不純物配置など、位相緩和に関わるゲート電圧依存の条件が多く存在するからである。そのため、5.7 にて、ゲート電圧を固定し、MRA における WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の温度依存性の解析を行うことで、微細構造中の位相緩和機構について詳細に議論する。

ここで議論した各 V_g での電気伝導率の量子補正項のフィッティング結果は付録 D に示す。

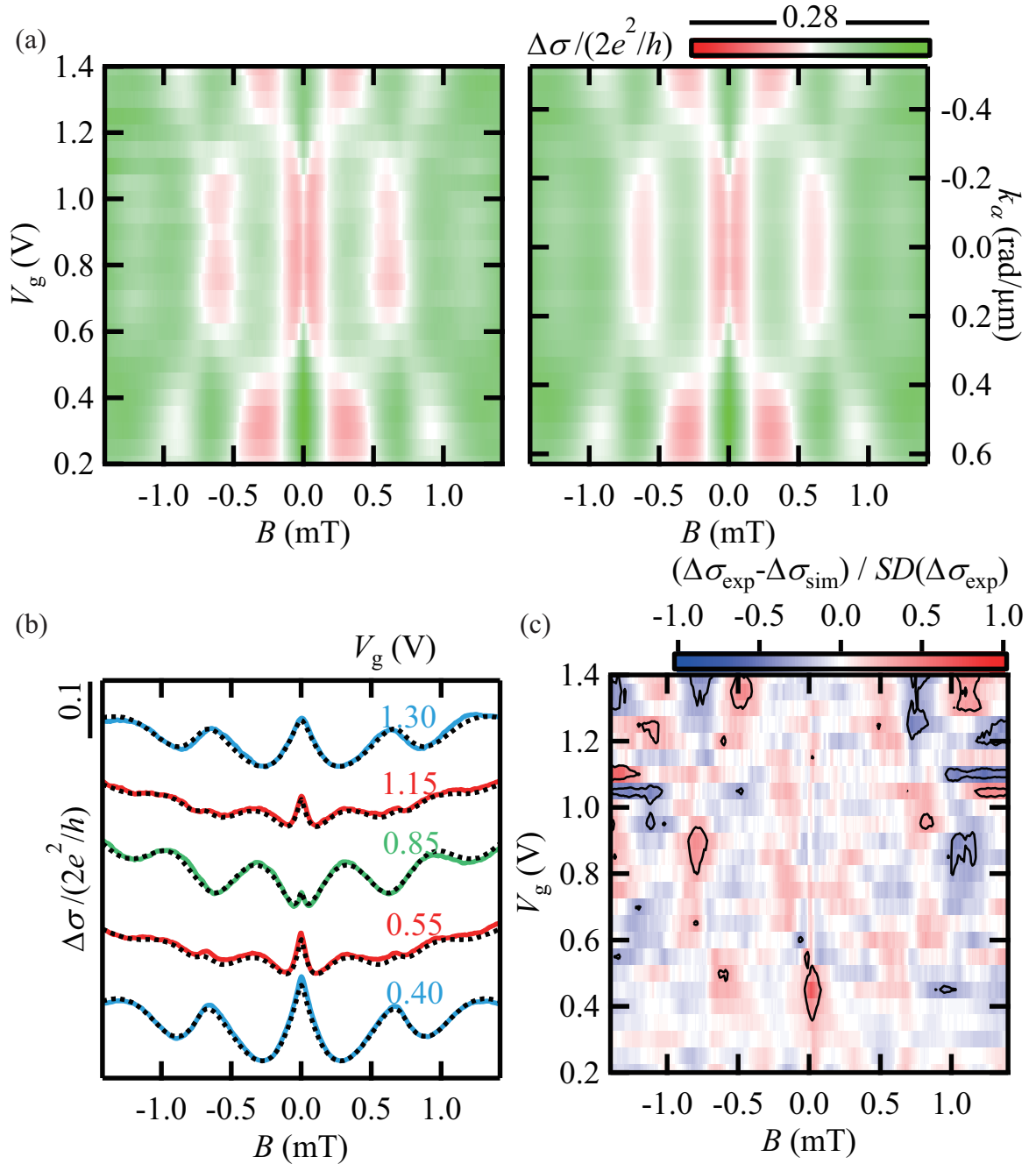


図 5.11: (a) 各ゲート電圧・磁場における電気伝導率の量子補正項（左）と chaos+impurity モデルでのフィッティング結果（右）。(b) $V_g = 0.40, 0.55, 0.85, 1.15, 1.30$ V の時の電気伝導率の量子補正項の実験結果（色実線）と chaos+impurity モデルでのフィッティング結果（黒点線）。(c) 各ゲート電圧の実験結果の標準偏差 $SD(\Delta\sigma_{\text{exp}})$ で規格化した $|B| \leq 1.42$ mT の領域における各ゲート電圧の実験結果と chaos Impurity モデルでのフィッティング結果の差。黒線で囲まれた領域以外は 0.3 以下となっている。

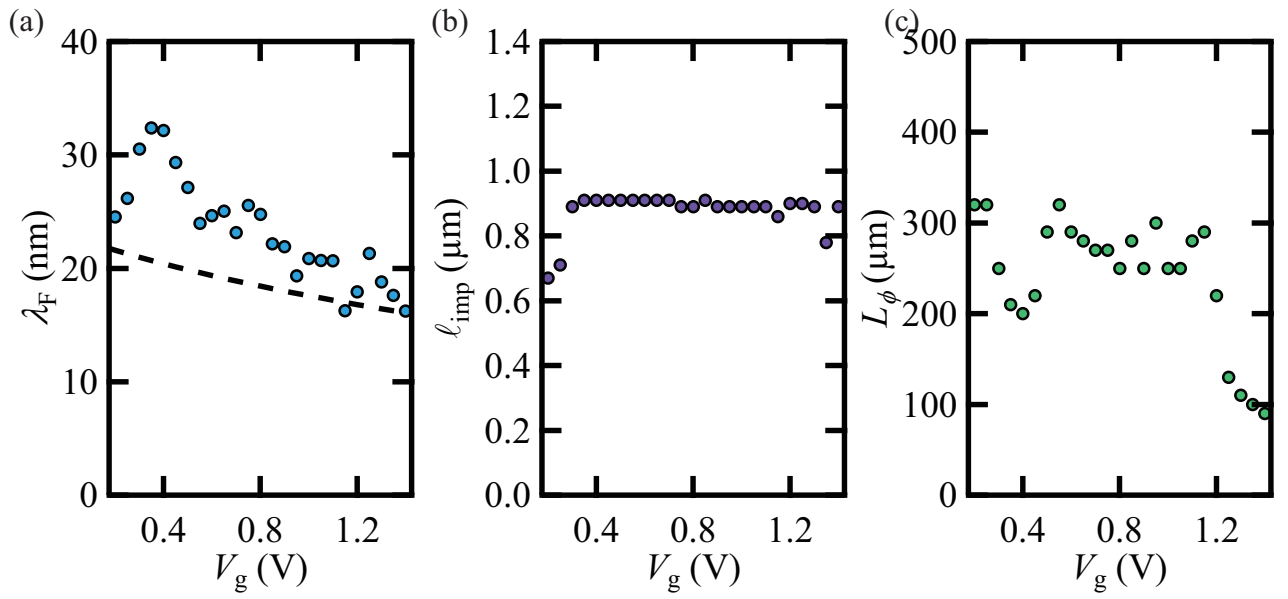


図 5.12: フィッティング解析によって決定された物性値。(a) フェルミ波長 λ_F 。(b) 確率的な散乱強度を与える不純物散乱による平均自由行程 ℓ_{imp} 。(c) 弾道的な位相緩和長 L_ϕ 。

5.6 chaos+impurity モデルを用いた高磁場フィッティング

前節までで、不純物散乱による平均自由行程を考慮することでゼロ磁場周辺以外の電気伝導率の量子補正項の振る舞いを再現できることを示した。本節では、chaos+impurity モデルでより高磁場まで電気伝導率の量子補正項のフィッティングが可能であるか調査する。

chaos+impurity モデルでは、図 5.13(a) のような非常に短い距離で再帰する経路が生じる。このような再帰経路が囲む閉ループの面積は小さく、囲む磁束も小さいため、高磁場を印加しなければ局在が解けない。そのため、高磁場における電気伝導率の量子補正項の振る舞いは短い距離で再帰する経路によって決まると考えられる。この解釈の根拠として、参考文献 [62, 67] が挙げられる。ここでは、バルク 2DES における WL/WAL による電気伝導率の量子補正項は高磁場において散乱回数が少ない再帰経路の寄与が大きいことが示されている。そのため、的確に不純物散乱による平均自由行程を選択すれば、高磁場のずれを忠実に再現し、定量的に不純物散乱による平均自由行程を決定できると考えられる。

測定結果

測定データは 5.3 と同じ素子を用い、希釈冷凍機のベース温度 20 mK、 $|B| \leq 5$ mT の広い磁場範囲で電気伝導率の量子補正項を測定した。また、 V_g は Rashba SOI が消失するように調整してある。測定結果を図 5.13(c) の緑実線で示す。5.3 と同一素子にもかかわらず、5.3 で観測された WAL ピークが消失しているのは、Mini Circuits の Low pass filter を入れていないので、電子温度が $T_{el} \approx 500$ mK 程度まで上昇しているからである。

フィッティング解析

フィッティングでは、5.3 と同じ素子であるため、残留 SOI を $k_c = 0.121$ rad/ μm とし、不純物散乱による平均自由行程 ℓ_{imp} と位相緩和長 L_ϕ をパラメータとしてフィッティング解析をおこなった。また、高磁場の振る舞いを再現するために、広い磁場範囲 $|B| \leq 5$ mT で決定係数 r^2 の計算をおこなった。

図 5.13(b) に示す各パラメータに対する決定係数 r^2 のイメージプロットから、決定係数 r^2 が最大となるのは $\ell_{\text{imp}} = 0.94$ μm 、 $L_\phi = 75$ μm の時であることがわかった。また、図

5.13(c,d) に示す実験結果（緑実線）とフィッティング結果（黒点線）の比較からわかるように、振動成分が明瞭に観測される低磁場だけでなく、振動成分が消失するような高磁場まで実験結果とフィッティング結果が非常に良い一致を示した。このことから、確率的な散乱長を的確に選ぶことで広い磁場範囲でビリヤード・シミュレーションが成立することが明らかとなった。また、図 5.13(c,d) に小さい面積 ($S \leq 0.5 \times S_0 = 0.5 \times 1.8 \times 1.8 \mu\text{m}^2$) を描く再帰経路からの電気伝導率の量子補正項への寄与を赤実線で示している。図 5.13(e) に示す再帰経路の面積ヒストグラムを用いて考えると、 $S \leq 0.5 \times S_0$ の面積範囲には、 S_0 周辺のピークが含まれていない。そのため、図 5.13(c,d) の赤実線には微細構造に起因した振動成分が現れないが、図 5.13(a) のような不純物散乱による小さい面積の寄与のみで振動成分が消失する高磁場を非常に良く再現することを示している。ここで、シミュレーション結果と実験結果のスケールを合わせるために用いたフェルミ波数は 26.81 nm であり、Rashba SOI の値から見積もられるキャリア濃度 ($N_S = 1.9 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$) から計算されるフェルミ波数 $\lambda_F = 18.19 \text{ nm}$ と比べても、同じオーダーであることがわかった。

以上のことは、MRA での鏡面反射と不純物散乱の両方の影響を受けて再帰経路を形成していることを示している。さらに、定量的に不純物散乱による平均自由行程を決定する可能性を示唆している。

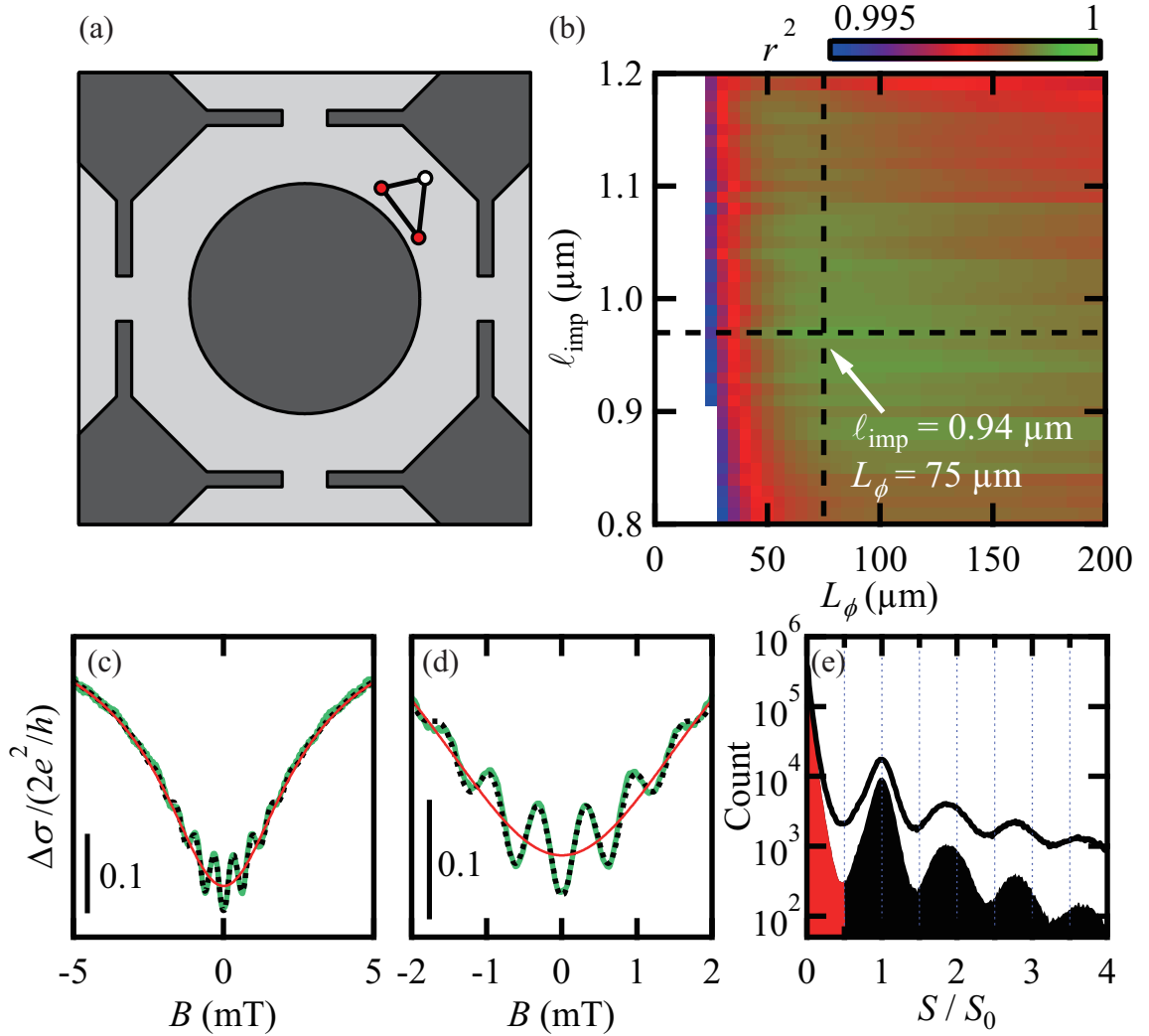


図 5.13: (a) 高磁場の電気伝導率の量子補正項に寄与するような再帰経路の模式図。
 (b) Rashba SOI がほぼ消失している $V_g = 1.00 \text{ V}$ 時の電気伝導率の量子補正項と
 シミュレーションの間の決定係数 r^2 のイメージプロット。不純物散乱による平均自由
 行程 ℓ_{imp} と位相緩和長 L_ϕ をフィッティング・パラメータとしており、 $\ell_{\text{imp}} = 0.94 \mu\text{m}$ 、
 $L_\phi = 75 \mu\text{m}$ の時に決定係数が $r^2 = 0.9991$ となる。(c,d) 決定係数が最大となるの時の
 シミュレーション結果（黒点線）と Rashba SOI がほぼ消失している $V_g = 1.00 \text{ V}$
 時の電気伝導率の量子補正項（緑実線）。また、赤実線は面積が $S \leq 0.5 \times S_0$ となる
 再帰経路の寄与のみを積算した場合のシミュレーション結果を示している。(e) 各面
 積における再帰経路のカウント数（実線）。塗りつぶされた領域は位相緩和を含めた
 再帰経路のカウント数を表し、 $S \leq 0.5 \times S_0$ の領域を赤色で示している。

5.7 電気伝導率の温度依存性のフィッティング解析

位相緩和に関して詳細な議論を行うために、位相緩和時間 τ_ϕ の温度依存性を chaos+impurity モデルによって決定し、理論的に予測される位相緩和時間と比較を行う。

5.7.1 測定結果

希釈冷凍機のベース温度を $T = 15, 30, 60, 120, 240, 480, 960$ mK と変化させ、前述の四端子測定により、 $|B| \leq 2$ mT の磁場範囲で電気伝導率の量子補正項の温度依存性の測定をおこなった。また、ゲート電圧に関しては、Rashba SOI が最小になるように調整している。

図 5.14(a) に電気伝導率の量子補正項の測定結果を示す。 $T = 15$ mK の電気伝導率の量子補正項のゼロ磁場で WAL ピークが観測されているが、これはゲート依存性の測定と同様に残留 SOI が存在するためであると考えられる。ここで注目すべき点は、高温になるにつれ WAL ピークが減少している点である。2DES 中の WL/WAL の温度依存性の測定 (付録 A) でも同様の現象が現れており、高温での WAL ピークの消失は位相緩和時間の増大が原因であることが示されている。つまり、本測定結果は温度の上昇に伴い位相緩和時間が減少していることを示唆している。

5.7.2 位相緩和時間の温度依存性の決定

定量的に位相緩和時間の温度依存性を議論するために、各温度における電気伝導率の量子補正項のフィッティングを行い、フィッティング・パラメータとしての位相緩和時間の決定を行う。そのために、ここでフィッティング・パラメータを明確にする。まず、SOI に関しては、前述の通り、残留 SOI が存在していると考えられるため、 k_c の大きさを決定する必要がある。ここで、残留 SOI の温度依存の明確な理論が存在しないため、 k_c は温度に対して不変とする。また、不純物による平均自由行程 ℓ_{imp} も温度に対して不変であり、位相緩和時間のみに温度依存があるとする。 k_c と ℓ_{imp} の値は最も低温の 15 mK の電気伝導率の量子補正項のフィッティング結果の値を用いる。具体的には、 $k_c = 0.150$ rad/ μm 、 $\ell_{\text{imp}} = 1.3$ μm となる。

前述のゲート電圧依存性では、位相緩和長 L_ϕ をフィッティング・パラメータとしてい

たが、理論との比較を行うために位相緩和長を位相緩和時間に変換する必要がある。本シミュレーションでは、拡散長ではなくバリスティックな長さに対する位相緩和長を仮定しているため、 $\tau_\phi = L_\phi/v_F$ となる（本試料では、 $v_F = 6.36 \times 10^5$ m/s）。

図 5.14(a) に示すように、各温度における電気伝導率の量子補正項の測定結果（実線）とフィッティング結果（点線）は磁気振動成分だけでなく温度変化によるゼロ磁場周辺の WAL ピークの変化も非常に良い一致を示している。そして、図 5.14(b) にフィッティングによって決定された位相緩和時間を示すように、低温になるにつれて位相緩和時間が長くなる傾向が得られた。また、位相緩和時間が 100 mK 以下でほとんど変化しないのは、付録 A のように電子温度が変わらなくなるためと考えられる。

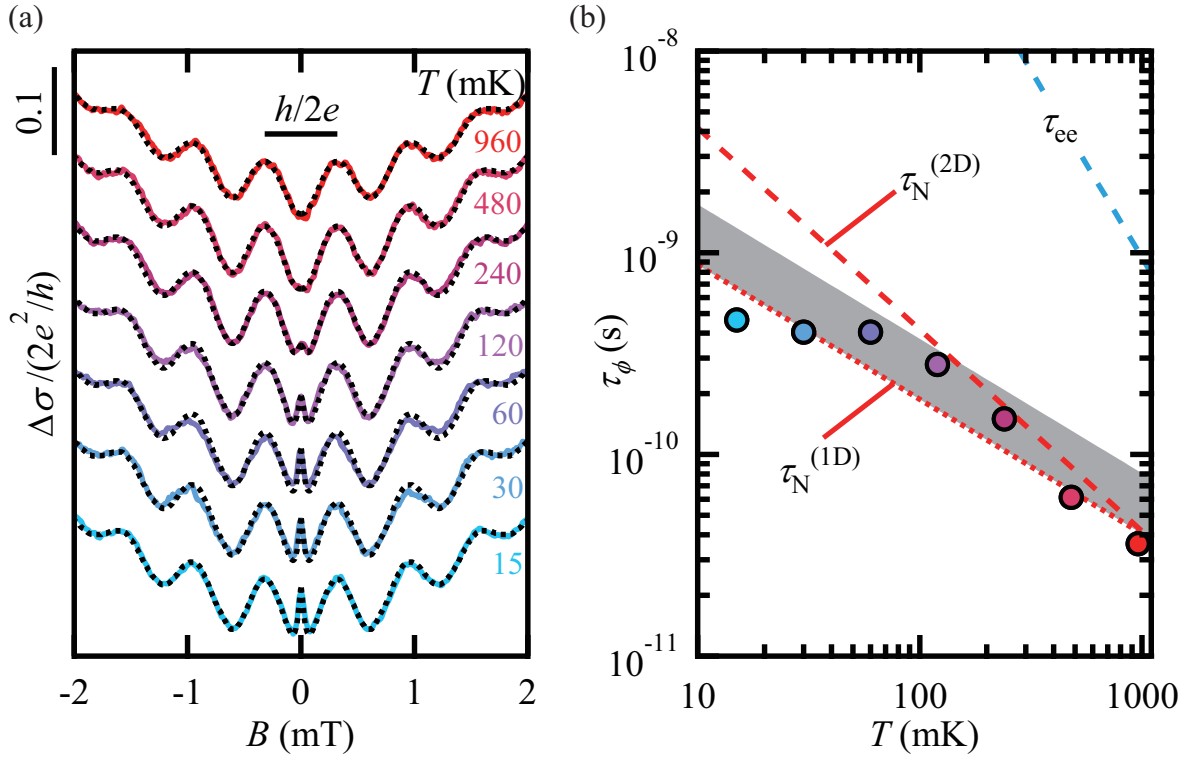


図 5.14: (a) MRA での電気伝導率の量子補正項の温度依存性。実線が実験結果、点線がフィッティング結果を表す。(b) 位相緩和時間の温度依存性。丸点がフィッティング解析によって決定した位相緩和時間、青破線が非弾性散乱を伴う電子-電子散乱による位相緩和時間 τ_{ee} 、赤破線が二次元系での Nyquist 機構による位相緩和時間 $\tau_N^{(2D)}$ 、赤点線が偽一次元系での Nyquist 機構による位相緩和時間 $\tau_N^{(1D)}$ を表す。また、 $\tau_N^{(1D)} \sim 2\tau_N^{(1D)}$ の領域を灰色で示している。

5.7.3 フェルミ液体論による考察

フィッティング解析によって決定した位相緩和時間を考察するために、理論から予測される位相緩和時間と比較を行う。また、今回の測定温度のように 1 K 以下の低温度では電子-電子相互作用に比べ電子-フォノン相互作用は非常に弱くなるため、本論文では電子-電子相互作用による位相緩和のみを考慮する。

二次元系における位相緩和

電子-電子相互作用による位相緩和には二つの位相緩和機構が存在する [28, 71, 80–82]。一つは、非弾性散乱を伴う電子-電子散乱による位相緩和機構であり、この位相緩和機構による位相緩和時間 τ_{ee} は、

$$\tau_{ee}^{-1} = \frac{\pi}{4} \frac{(k_B T)^2}{\hbar E_F} \ln \frac{E_F}{k_B T} \quad (5.13)$$

と表される。 τ_{ee} はフェルミエネルギー E_F と温度 T によって決定され、およそ T^{-2} に比例する振る舞いとなる。

もう一つは、電子の熱揺らぎによって生じる微小な電子-電子相互作用の揺らぎによる位相緩和機構（Nyquist 機構）である。Nyquist 機構では時間反転対称経路間で生じる微小な電子-電子相互作用を試料内の電場の揺らぎによる位相緩和として扱っている [82]。二次元系において、Nyquist 機構による位相緩和時間 $\tau_N^{(2D)}$ は、

$$\tau_N^{(2D)-1} = \frac{k_B T}{2\pi\hbar} \frac{\lambda_F}{\ell} \ln \frac{\pi\ell}{\lambda_F} \quad (5.14)$$

と表される。 $\tau_N^{(2D)}$ は平均自由行程とフェルミ波長の比 ℓ/λ_F と温度 T によって決定され、およそ T^{-1} に比例する振る舞いとなる。二つの電子-電子相互作用による位相緩和メカニズムを考慮したときの位相緩和時間 $\tau_\phi^{(2D)}$ はそれぞれの位相緩和時間の逆数和 $\tau_\phi^{(2D)-1} = \tau_{ee}^{(2D)-1} + \tau_N^{(2D)-1}$ によって計算されるが、フィッティング解析によって決定された位相緩和時間がおおよそ T^{-1} に比例していることから、本測定においては Nyquist 機構による位相緩和時間が支配的になっていると思われる。実際に、1 K 以下において、二次元系の Nyquist 機構による位相緩和はバルク 2DES の WL/WAL から決定した位相緩和時間の温度依存性 [80] をよく説明し、Huibers らの開放系ドットにおける位相緩和時間の温度依存性とも定性的に一致している [28, 81]。

図 5.14(b) に、 τ_{ee} (青破線)、 $\tau_N^{(2D)}$ (赤破線) を示す。ここで、式 (5.13) と式 (5.14) を計算するには E_F や ℓ/λ_F の値を決定する必要があるが、 E_F はキャリア濃度から計算することが可能であり、Rashba SOI が消失するときのキャリア濃度である $N_S = 1.06 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ を用いると、 $E_F = 54.0 \text{ meV}$ となる。一方、 ℓ/λ_F は $N_S = 1.06 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ におけるバルクの測定値から $\ell/\lambda_F = 35$ となるが、フィッティング解析によって決定された位相緩和時間を再現するように $\ell/\lambda_F = 0.865$ としている。このような非現実的な ℓ/λ_F を与えることは、Huibers らの開放系ドットにおける位相緩和時間の温度依存性でも同様の傾向が示されている [28, 81]。

擬一次元系における位相緩和

MRA はある種の細線の組み合わせで形成しているととらえることで、擬一次元的な電子系としてとらえることが可能なように思われる。式 (5.14) は二次元のフェルミ液体論の結果であったが、細線幅 W の細線における擬一次元系でのフェルミ液体論から計算される Nyquist 機構による位相緩和時間 $\tau_N^{(1D)}$ は、

$$\tau_N^{(1D)-1} = \left(\frac{k_B T}{W} \sqrt{\frac{\pi}{\hbar m^*} \frac{\lambda_F}{\ell}} \right)^{2/3} \quad (5.15)$$

となる。式 (5.15) は GaAs 量子井戸の量子細線での WL/WAL 測定によって決定された位相緩和時間を忠実に再現することが示されている [80]。ここで、式 (5.15) を計算では $\ell/\lambda_F = 35$ とし、MRA の設計から有効線幅はおおよそ $W = 0.5 \mu\text{m}$ であると仮定している。

図 5.14(b) に、 $\tau_N^{(1D)}$ (赤破線) を示す。また、擬一次元系での Nyquist 機構による位相緩和は非指数関数減衰であり、指数関数減衰を仮定する場合は $\exp(-t/2\tau_N^{(1D)})$ となるという理論 [82, 83] が存在するため、図 5.14(b) では $\tau_N^{(1D)} \sim 2\tau_N^{(1D)}$ の領域を灰色で示している。図 5.14(b) で示すように、 $\tau_N^{(1D)}$ はフィッティング解析によって決定した位相緩和時間と定量的に再現していることがわかる。

上記のように、本研究で決定した位相緩和時間の温度依存性がバリスティック量子ドットや量子細線で成り立つ位相緩和時間の理論によって説明できることは、本手法によって位相緩和時間の定量的な決定を果たせることを示す一つの根拠となるだろう。

5.8 小括

本章では、MRA 中の乱雑な経路からビリヤード・シミュレーションによって再帰経路・干渉強度を求めることで電気伝導率の量子補正項を計算する手法を提案した。ビリヤード・シミュレーションでは、不純物散乱による平均自由行程をフィッティング・パラメータにしない chaos only モデルと、不純物散乱による平均自由行程をフィッティング・パラメータとする chaos+impurity モデルの二つのモデルを用いてフィッティング解析をおこなった。

MRA における電気伝導率の量子補正項のゲート電圧依存性の測定では、Rashba SOI による有効磁場に対する Onsager の対称性 $\Delta\sigma(\mathbf{B}_{\text{SOI}}, B) = \Delta\sigma(-\mathbf{B}_{\text{SOI}}, B)$ が観測され、明確に Rashba SOI が消失するゲート電圧を決定され、本手法の評価を行う上で非常に有用に働いた。実際に、chaos only モデルを用いた電気伝導率の量子補正項のフィッティング解析では、他の測定を介さずに Rashba 効果によるスピン回転角の大きさの決定を果たし、バルク 2DES での WL/WAL 解析と同様にゲート電圧による Rashba SOI の制御が可能であることを確認した。一方、chaos+impurity モデルを用いた電気伝導率の量子補正項のフィッティング解析では、フェルミ波長、不純物散乱による平均自由行程、位相緩和長（時間）をフィッティング・パラメータとすることで、半古典論では類を見ないほど広い磁場範囲で実験結果を再現することを示した。

電気伝導率の量子補正項の温度依存性の測定では、chaos+impurity モデルを用いたフィッティング解析によって位相緩和時間の温度依存性を決定し、バリステック量子ドットや量子細線で成り立つ位相緩和時間の理論によって説明可能であることから、本手法によって位相緩和時間の定量的な決定の可能性を示した。

第6章 総括

本論文では、本論文ではメゾスコピックリング配列構造におけるスピン回転を伴う弱反局在の実空間シミュレーション手法を開発し、複雑な電気伝導率の磁気振動の解析を行い、物性値の決定が可能であることを示すことを目的とし、各章において以下に示す解析手法の提案・実証をおこなった。

再帰経路の実空間シミュレーションとスピン干渉効

第3章では、再帰確率を用いた WL/WAL 理論を数値計算によって解くために、実空間シミュレーションによって再帰経路を計算する手法を提案した。WL/WAL 理論に用いられる再帰及び再帰確率の定義を明確にし、実空間シミュレーションによって再帰経路を計算するための再帰判定法や不純物散乱の導入法を示した。また、様々な一電子相互作用が存在する中で生じる時間反転対称経路間の干渉の強度の計算方法を示したことで、あらゆる一電子相互作用を考慮した WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の計算を可能とした。

バルク二次元電子系における弱局在/弱反局在の実空間シミュレーション

第4章では、実空間シミュレーションによる再帰確率の計算の有用性を示すために、バルク 2DES における WL/WAL による電気伝導率の量子補正項を実空間におけるランダムウォーク・シミュレーションによって計算する手法を示し、既存の拡散近似を用いない WL/WAL モデルとの比較をおこなった。そして、短い計算時間かつ小さな数値誤差でありながら、SOI の有無を含め、既存の WL/WAL モデルを厳密に再現することを示した。さらに、一つ一つの再帰経路の干渉強度を計算する手法であるため、複数の SOI が共存する系の WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の計算も可能であることを示した。将来的に、あらゆる一電子相互作用が生じる系であっても適用できる可能性を示した。

メゾスコピックリング配列構造中のカオス軌道解析による電子パラメータの抽出

第5章では、MRA 中のカオス経路を利用した新たな物性解析手法の提案・実証をおこなった。ビリヤード・シミュレーションでは、不純物散乱による平均自由行

程をフィッティング・パラメータにしない chaos only モデルと、不純物散乱による平均自由行程をフィッティング・パラメータとする chaos+impurity モデルの二つのモデルを用いてフィッティング解析をおこなった。電気伝導率の量子補正項のゲート電圧依存性の測定では、Rashba SOI による有効磁場に対する Onsager の対称性 $\Delta\sigma(\mathbf{B}_{\text{SOI}}, B) = \Delta\sigma(-\mathbf{B}_{\text{SOI}}, B)$ が観測され、明確に Rashba SOI が消失するゲート電圧を決定し、本手法の評価を行う上で非常に有用に働いた。実際に、chaos only モデルを用いた電気伝導率の量子補正項のフィッティング解析では、他の測定を介さずに Rashba 効果によるスピン回転角の大きさの決定を果たし、バルク 2DES での WL/WAL 解析と同様にゲート電圧による Rashba SOI の制御が可能であることを確認した。一方、chaos+impurity モデルを用いた電気伝導率の量子補正項のフィッティング解析では、フェルミ波長、不純物散乱による平均自由行程、位相緩和長（時間）をフィッティング・パラメータとすることで、半古典論では類を見ないほど広い磁場範囲で実験結果を再現することを示した。また、電気伝導率の温度依存性の測定では、chaos+impurity モデルを用いたフィッティング解析によって位相緩和時間の温度依存性を決定し、バリスティック量子ドットや量子細線で成り立つ位相緩和時間の理論によって説明可能であることから、本手法によって位相緩和時間の定量的な決定が可能であることを示唆した。

本論文で示した解析手法は、SOI によるスピン回転角の決定や半古典論の有用性を示すだけでなく、様々な一電子相互作用の導入が可能であることから、理論を拡張すれば横磁場印加による Zeeman 効果 [68] や偽スピン・バレー自由度 [69] の影響を考慮することが可能となり、バルク 2DES や MRA 中の WL/WAL による電気伝導率の量子補正項のフィッティング解析によって様々な新規 2 次元材料の物性解明を果たすだろう。

謝辞

本研究を行うにあたり、多くの方々にお世話になりました。その感謝の意を書きとどめたいと思います。古賀貴亮准教授には、指導教官としてお世話になったこと、心より御礼申し上げます。同じ研究グループとして研究を進めてきた峰重俊介さん、陳抗さん、横田昇一郎君、山士家貴志君、劉玻麟君、岡本公仁君には、ともに苦楽を分かち合った仲間として、心より御礼申し上げます。異なる研究テーマではありますが、ナノエレクトロニクス研究室のメンバー、特に五十木寛さん、池内昭朗博士や同期の樋浦諭志助教授には、研究室の生活を支えてくださったこと、心より御礼申し上げます。また、末岡和久教授、八田英嗣助教、加納美智代技官、アグス・スバギョ博士には、研究生活における多くの御支持を頂けたこと、心より御礼申し上げます。1年間でしたが同じ研究室のメンバーとして過ごさせていただいた、高橋康夫教授、有田正志准教授、福地厚助教授、内田貴文博士、民主博士をはじめとしたナノ物性工学研究室の方々には、大変お世話になりました、心より御礼申し上げます。サンパウロ大学のJ. Carlos Egues教授、北海道大学の明楽浩史教授、浅井哲也教授、坂井哲准教授、鈴浦秀勝准教授、矢久保考介教授には、「バルク二次元電子系における弱局在/弱反局在の実空間シミュレーション」に関して多くの助言をいただけたこと、心より御礼申し上げます。また、産総研の川畑史郎博士、大阪大学の小林研介教授、慶応大学の齊藤圭司准教授には、「メゾスコピックリング配列構造中のカオス軌道解析による電子パラメータの抽出」に関して多くの助言をいただけたこと、心より御礼申し上げます。また、主査の本久順一教授、副査の富田章久教授、高橋康夫教授には、博士論文審査を担当していただいたこと、心より御礼申し上げます。

そして最後に、自分にとっての安息の地を与えてくれた福山夫妻と長谷川貴大君並びに常連の皆様、今まで自分を支えてくれた姉や親戚の皆様に感謝の意を示し、謝辞とさせていただきます。

付 録 A バルク 2DES における位相緩和時間の温度依存性

本研究で用いた希釈冷凍機によって、電子温度がどこまで下がるかを示す。図 A.1(a) にバルク 2DES の KH3-1 にて測定された WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の温度依存性（実線）および ILP モデルによるフィッティング結果（点線）、図 A.1(b) にそこから見積もられた位相緩和時間の温度依存性を示す。位相緩和時間は $N_S = 0.768 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ 、 $E_F = 39.1 \text{ meV}$ 、 $\lambda_F = 28.6 \text{ nm}$ 、 $\ell = 0.106 \text{ }\mu\text{m}$ 、 $\alpha = 1.31 \times 10^{-12} \text{ eVm}$ の時の WL/WAL の温度依存性の解析によって決定した。最も低温の時で 100 mK くらいの位相緩和時間まで長くなることから、本研究で用いた希釈冷凍機によって電子温度は 100 mK 程度まで冷やすことが可能であるといえる。

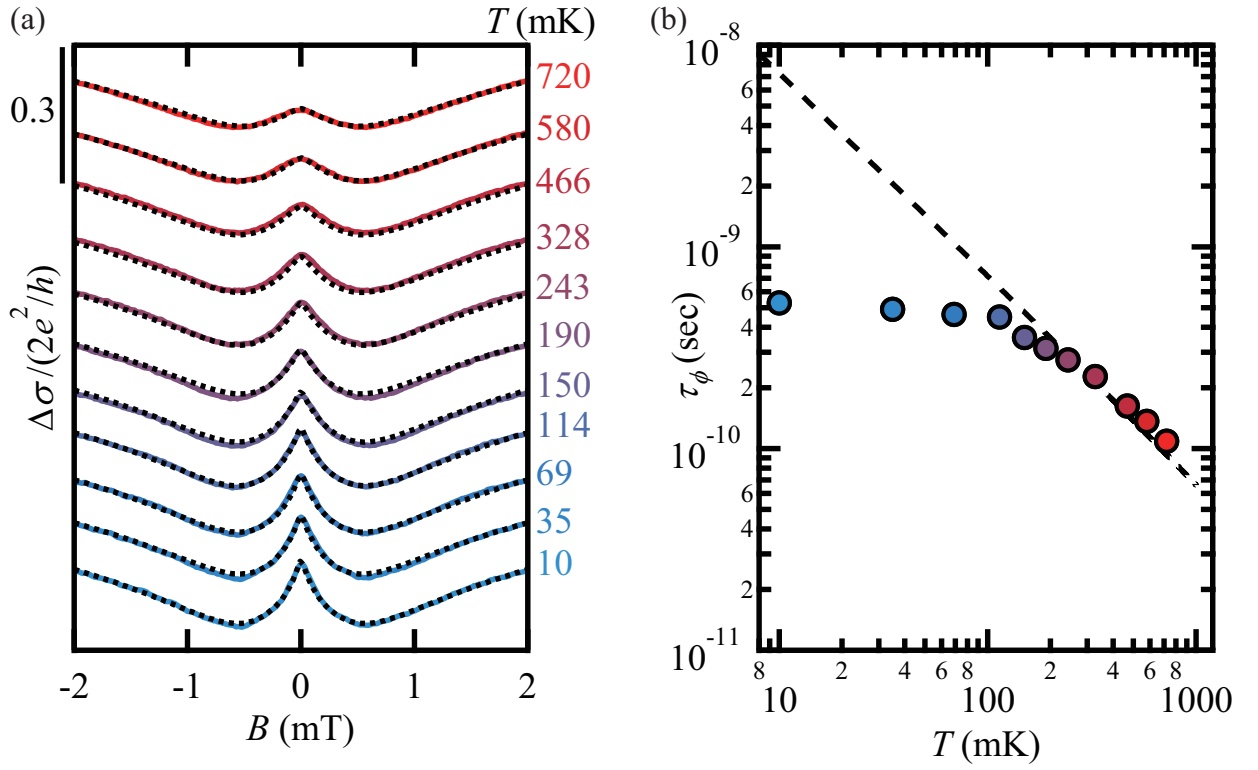


図 A.1: (a) バルク 2DES の KH3-1 にて測定された WL/WAL による電気伝導率の量子補正項の温度依存性の測定結果（色実線）とフィッティング結果（黒点線）。(b) 位相緩和時間の温度依存性。丸点がバルク 2DES の KH3-1 における WL/WAL の温度依存性から決定した位相緩和時間、黒破線が二次元フェルミ液体論での位相緩和時間の温度依存性を示している。

付 録 B 決定係数

本研究では、実験結果とシミュレーション結果の比較を定量的に行うために、一致度の指標として決定係数 r^2 を用いた。決定係数とは、ふたつのデータ間の相関を定量的に示す指標であり、二つのデータ列 f_1 、 f_2 に対して、

$$r^2 \equiv \left(\frac{\langle (f_1 - \langle f_1 \rangle) \cdot (f_2 - \langle f_2 \rangle) \rangle}{\sqrt{\langle f_1^2 \rangle - \langle f_1 \rangle^2} \cdot \sqrt{\langle f_2^2 \rangle - \langle f_2 \rangle^2}} \right)^2 \quad (\text{B.1})$$

と定義され、1 に近いほど一致度が高く、決定係数では二データ間の相関を測るものであり、データの振幅の大きさについては比較しない。また、逆相関に関しては $r^2 = 0$ としている。そのため、決定係数を用いて得られるフィッティング結果は最も“形”が一致したシミュレーション結果となる。

付 録 C 微細リング配列構造における古典項の解析

本文では、実験的に観測される MRA における電気伝導率の量子補正項をビリヤード・シミュレーションによって精度よく再現できることを示したが、MRA における電気伝導率の古典項に関してもビリヤード・シミュレーションによる古典拡散によって説明可能か調査する。

式 (3.2) より、拡散係数 D の 2DES において、時刻 t における原点からの二乗平均距離 $\langle l^2(t) \rangle$ は、

$$\langle l^2(t) \rangle = \int d\mathbf{r} r^2 W(\mathbf{r}, t) = 4Dt \quad (\text{C.1})$$

となる。電子は一定のフェルミ速度 v_F で伝導しているため、時刻 t ではなく総走行距離 $L = v_F t$ 、平均自由行程 $\ell = 2D/v_F$ と考えることで、総走行距離 L における原点からの二乗平均距離 $\langle l^2(L) \rangle$ は、

$$\langle l^2(L) \rangle = 2\ell L \quad (\text{C.2})$$

となる。

微細ループ配列構造をバルクととらえた時の拡散係数 D_{meso} と式 (5.8) で関係付けられる ℓ_{meso} を用いても成り立つとすれば、

$$\langle l^2(L) \rangle = 2\ell_{\text{meso}} L \quad (\text{C.3})$$

となる。ビリヤードシミュレーションを用いて $\langle l^2(L) \rangle$ を計算することで、ビリヤードシミュレーションにおける ℓ_{meso} を計算することが可能になると考えられる。

図 C.1 に示す (0, 0) のループに存在する電子が、総走行距離 L で (n_x, n_y) のループに電子が存在する時、原点からの距離を $2.4 \times \sqrt{n_x^2 + n_y^2} [\mu\text{m}]$ とすると、ビリヤードシミュレーションから $\langle l^2(t) \rangle$ を求めることが可能である。図 C.2(a) の上段は総走行距離 $L = 1000 \mu\text{m}$ の時の各ループに存在する電子の分布を示している。ここで、電子の分布は $P(n_x, n_y) = (n_x, n_y)$ のループに存在するビリヤード経路の総数/全ビリヤード経路の総数 として計算している。不純物散乱による平均自由行程 ℓ_{imp} が長いほど電子が拡散していることがわかる。図 C.2(b) に示すように不純物散乱による平均自由行程 $\ell_{\text{imp}} = 0.1, 1, 10 \mu\text{m}$ の時の総走行距離 L に対する $\sqrt{\langle l^2(L) \rangle}$ をプロットから、 L がある程度の長さ (数十 μm) に

達すると、 $\sqrt{\langle l^2(L) \rangle}$ が $\sqrt{L}$ に比例している。また、 l_{imp} が長いほど $\sqrt{\langle l^2(L) \rangle}$ が長くなっていることから、 l_{meso} (D_{meso}) が大きくなることがわかる。実際に、図 C.2(c) に示すように、各 l_{imp} に対する MRA における平均自由行程 l_{meso} を計算した結果から、 l_{imp} が長いほど l_{meso} (D_{meso}) が大きくなることがわかる。

一方、図 C.2(d) に式 (5.4) と式 (5.12) を用いて実験結果から見積もられる MRA における平均自由行程 l_{meso} のゲート電圧依存性を示す。 $V_g = 0.2 \text{ V}$ の時に $l_{\text{meso}} = 0.089 \mu\text{m}$ であり、 $V_g = 1.4 \text{ V}$ の時に $l_{\text{meso}} = 0.139 \mu\text{m}$ となっており、これらに対応する l_{imp} はそれぞれ $l_{\text{imp}} = 0.34 \mu\text{m}$ 、 $l_{\text{imp}} = 0.75 \mu\text{m}$ となる。chaos+impurity モデルによるフィッティング解析では l_{imp} がそれぞれ $l_{\text{imp}} = 0.67 \mu\text{m}$ 、 $l_{\text{imp}} = 0.89 \mu\text{m}$ となることから、厳密に再現してはいないがオーダーとしては同程度であるため、式 (5.4) の仮定が大きく外れてはいないと言える。

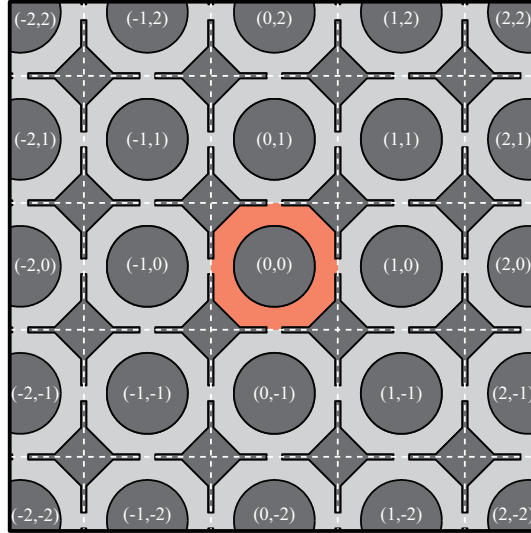


図 C.1: 電子の古典拡散のシミュレーションにおける初期位置とループ番号の定義。

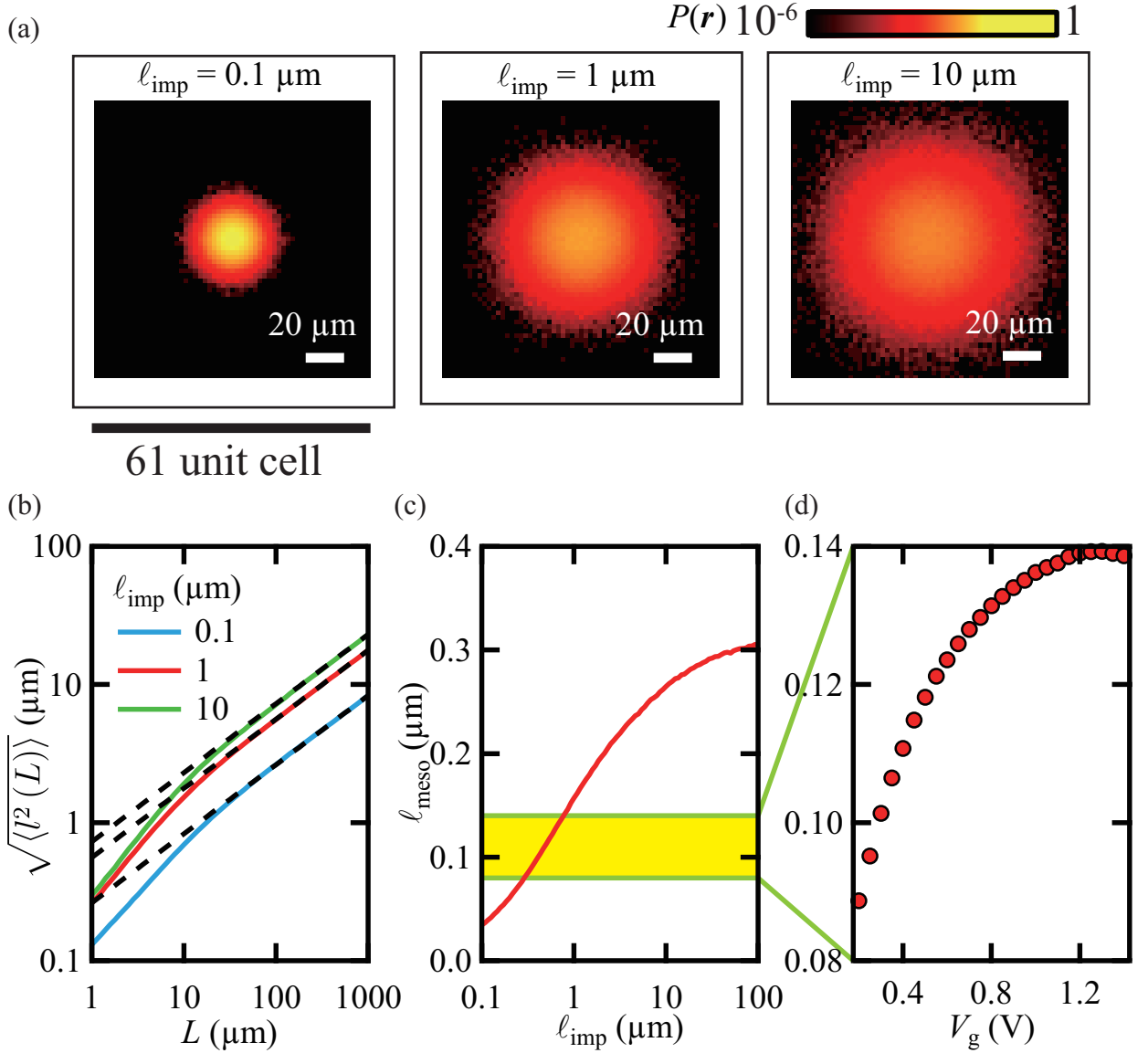
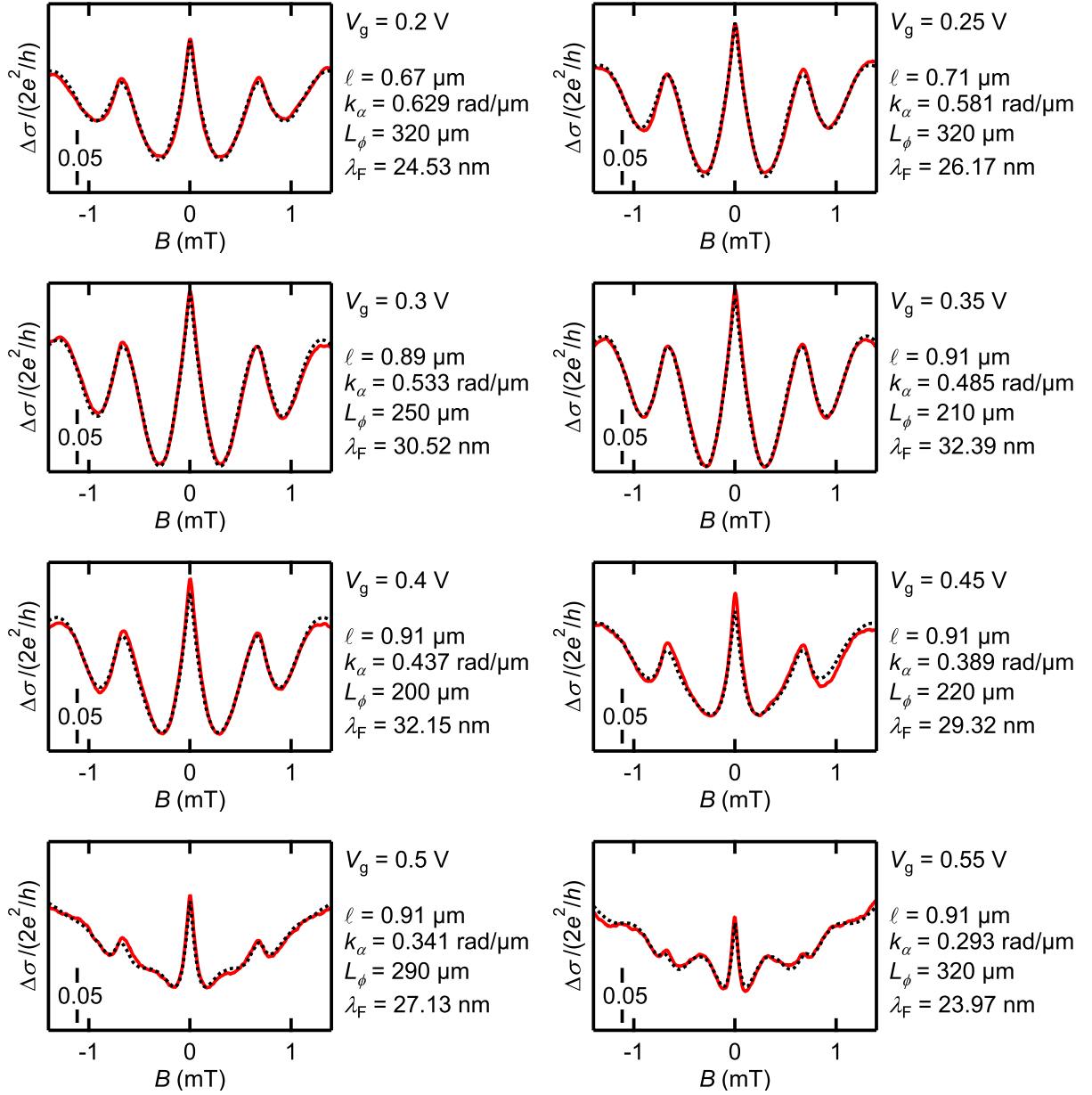
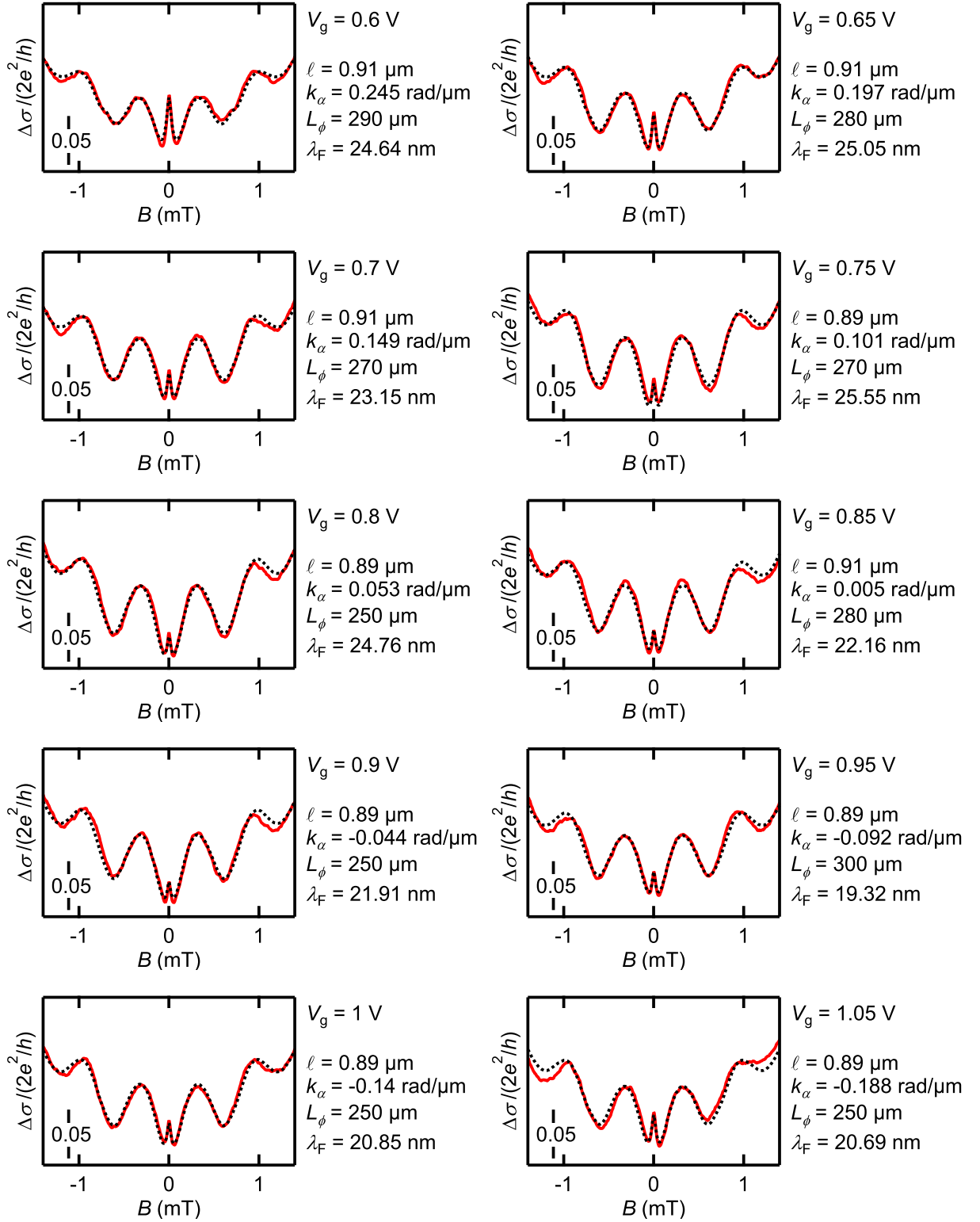
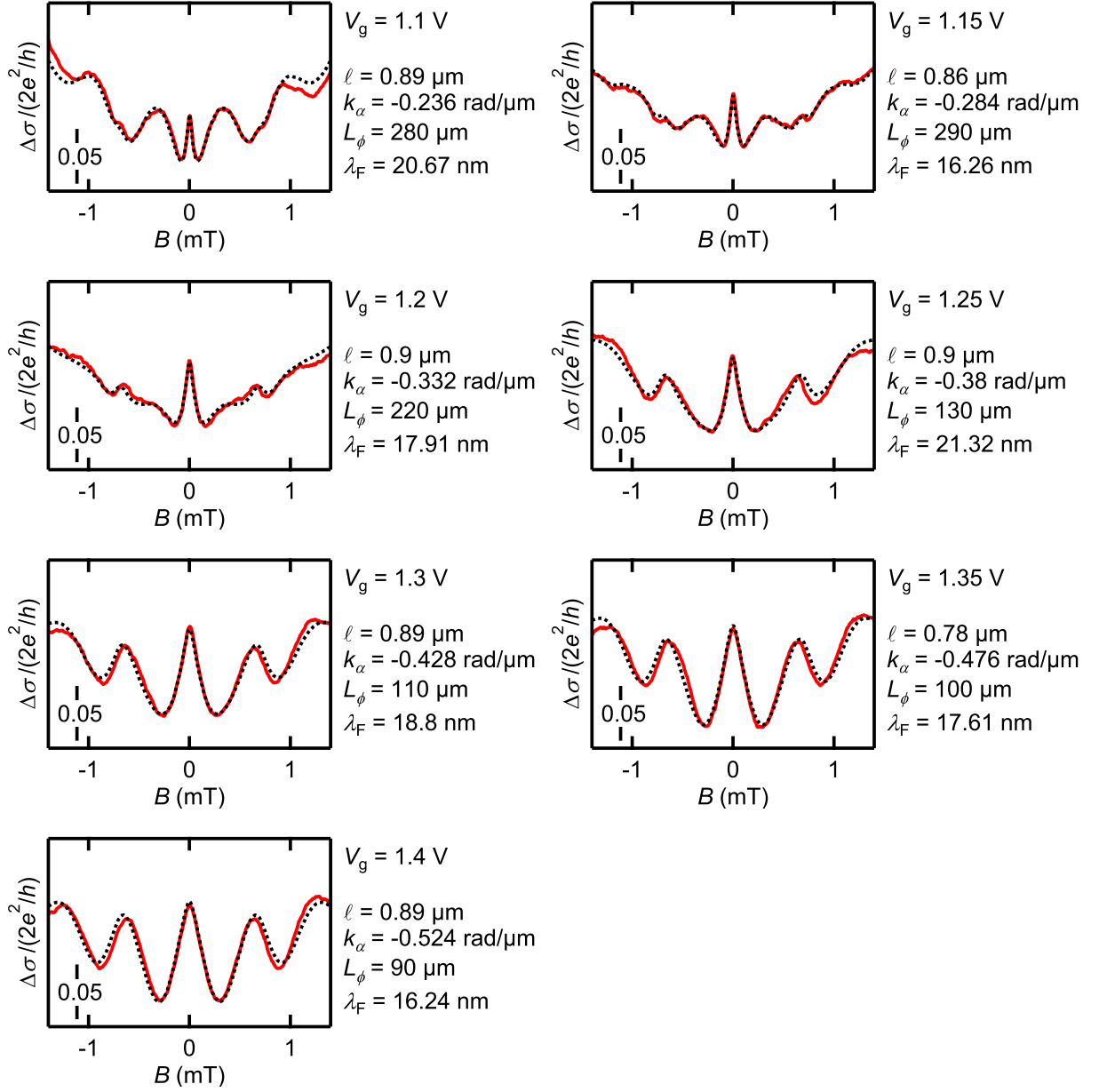


図 C.2: (a) 総走行距離 $L = 1000 \mu\text{m}$ における電子の拡散の様子。(b) $\sqrt{\langle l^2(L) \rangle}$ の総走行距離 L 依存性。黒点線は拡散運動の極限を表す。(c) MRA における平均自由行程 ℓ_{meso} の不純物散乱による平均自由行程 ℓ_{imp} 依存性。(d) 実験結果から見積もられる MRA における平均自由行程 ℓ_{meso} のゲート電圧依存性。

付 録 D 各ゲート電圧における chaos impurity モデルでのフィッティング結果







参考文献

- [1] S. Datta and B. Das. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, 56:665, 1990.
- [2] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki. Gate control of spin-orbit interaction in an inverted $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ heterostructure. *Physical Review Letters*, 78:1335, 1997.
- [3] T. Koga, J. Nitta, T. Akazaki, and H. Takayanagi. Rashba spin-orbit coupling probed by the weak antilocalization analysis in $\text{InAlAs}/\text{InGaAs}/\text{InAlAs}$ quantum wells as a function of quantum well asymmetry. *Physical Review Letters*, 89:046801, 2002.
- [4] S. Faniel, T. Matsuura, S. Mineshige, Y. Sekine, and T. Koga. Determination of spin-orbit coefficients in semiconductor quantum wells. *Physical Review B*, 83:115309, 2011.
- [5] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom. Observation of the spin hall effect in semiconductors. *Science*, 306:1910, 2004.
- [6] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium: Topological insulators. *Reviews of Modern Physics*, 82:3045, 2010.
- [7] T. Kimura, T. Goto, H. Shintani, K. Ishizaka, T. Arima, and Y. Tokura. Magnetic control of ferroelectric polarization. *Nature*, 426:55, 2003.
- [8] H. J. Xiang, Su-Huai Wei, M.-H. Whangbo, and Juarez L. F. Da Silva. Spin-orbit coupling and ion displacements in multiferroic TbMnO_3 . *Physical Review Letters*, 101:037209, 2008.

-
- [9] V. M. Edelstein. Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems. *Solid State Communications*, 73:233, 1990.
 - [10] S. Souma, A. Sawada, H. Chen, Y. Sekine, M. Eto, and T. Koga. Spin blocker using the interband Rashba effect in symmetric double quantum wells. *Physical Review Applied*, 4:034010, 2015.
 - [11] J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss. Nonballistic spin-field-effect transistor. *Physical Review Letters*, 90:146801, 2003.
 - [12] B. A. Bernevig, J. Orenstein, and Shou-Cheng Zhang. Exact SU(2) symmetry and persistent spin helix in a spin-orbit coupled system. *Physical Review Letters*, 97:236601, 2006.
 - [13] K. Yoshizumi, A. Sasaki, M. Kohda, and J. Nitta. Gate-controlled switching between persistent and inverse persistent spin helix states. *Applied Physics Letters*, 108:132402, 2016.
 - [14] R. Moriya, K. Sawano, Y. Hoshi, S. Masubuchi, Y. Shiraki, A. Wild, C. Neumann, G. Abstreiter, D. Bougeard, T. Koga, and T. Machida. Cubic Rashba spin-orbit interaction of a two-dimensional hole gas in a strained-Ge/SiGe quantum well. *Physical Review Letters*, 113:086601, 2014.
 - [15] G. M. Minkov, A. V. Germanenko, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, S. A. Dvoretzki, and N. N. Mikhailov. Weak antilocalization of holes in HgTe quantum wells with a normal energy spectrum. *Physical Review B*, 91:205302, 2015.
 - [16] H. Nakamura, T. Koga, and T. Kimura. Experimental evidence of cubic Rashba effect in an inversion-symmetric oxide. *Physical Review Letters*, 108:206601, 2012.
 - [17] W. Han, R. K. Kawakami, M. Gmitra, and J. Fabian. Graphene spintronics. *Nature Nanotechnology*, 9:794, 2014.

-
- [18] A. Kara, H. Enriquez, A. P. Seitsonen, L. C. L. Y. Voon, S. Vizzini, B. Aufray, and H. Oughaddou. A review on silicene — new candidate for electronics. *Surface Science Reports*, 67:1, 2012.
- [19] Z. Wang, D.-K. Ki, H. Chen, H. Berger, A. H. MacDonald, and A. F. Morpurgo. Strong interface-induced spin-orbit interaction in graphene on WS₂. *Nature Communications*, 6:8339, 2015.
- [20] S. Jia, S. Xu, and M. Z. Hasan. Weyl semimetals, fermi arcs and chiral anomalies. *Nature Materials*, 15:1140, 2016.
- [21] M. Kepenekian, R. Robles, C. Katan, D. Saponi, L. Pedesseau, and J. Even. Rashba and Dresselhaus effects in hybrid organic–inorganic perovskites: From basics to devices. *ACS Nano*, 9:11557, 2015.
- [22] F. J. Ohkawa and Y. Uemura. Quantized surface states of a narrow-gap semiconductor. *Journal of the Physical Society of Japan*, 37:1325, 1974.
- [23] Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba. Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy. *JETP Letters*, 39:78, 1984.
- [24] Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *Journal of Physics C*, 17:6039, 1984.
- [25] H. Nakamura and T. Kimura. Electric field tuning of spin-orbit coupling in KTaO₃ field-effect transistors. *Physical Review B*, 80:121308, 2009.
- [26] L. E. Golub. Weak antilocalization in high-mobility two-dimensional systems. *Physical Review B*, 71:235310, 2005.
- [27] A. M. Chang, H. U. Baranger, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. Weak localization in chaotic versus nonchaotic cavities: A striking difference in the line shape. *Physical Review Letters*, 73:2111, 1994.
- [28] A. G. Huibers, M. Switkes, C. M. Marcus, K. Campman, and A. C. Gossard. Dephasing in open quantum dots. *Physical Review Letters*, 81:200, 1998.

-
- [29] C. M. Marcus, A. J. Rimberg, R. M. Westervelt, P. F. Hopkins, and A. C. Gossard. Conductance fluctuations and chaotic scattering in ballistic microstructures. *Physical Review Letters*, 69:506, 1992.
- [30] R. M. Clarke, I. H. Chan, C. M. Marcus, C. I. Duruöz, J. S. Harris, K. Campman, and A. C. Gossard. Temperature dependence of phase breaking in ballistic quantum dots. *Physical Review B*, 52:2656, 1995.
- [31] T. Koga, J. Nitta, and M. van Veenhuizen. Ballistic spin interferometer using the Rashba effect. *Physical Review B*, 70:161302, 2004.
- [32] T. Koga, Y. Sekine, and J. Nitta. Experimental realization of a ballistic spin interferometer based on the rashba effect using a nanolithographically defined square loop array. *Physical Review B*, 74:041302, 2006.
- [33] S. Mineshige, S. Kawabata, S. Faniel, J. Waugh, Y. Sekine, and T. Koga. Semiclassical interpretation of the spin interference effect observed in square loop arrays of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ quantum wells. *Physical Review B*, 84:233305, 2011.
- [34] R. Kubo. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 12:570, 1957.
- [35] S. Chakravarty and A. Schmid. Weak localization: The quasiclassical theory of electrons in a random potential. *Physics Reports*, 140:193, 1986.
- [36] G. Dresselhaus. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. *Physical Review*, 100:580, 1955.
- [37] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, 109:1492, 1958.
- [38] L. P. Gor'kov, A. I. Larkin, and D. E. Khmel'nitskii. Particle conductivity in a two-dimensional random potential. *JETP Letters*, 30:228, 1979.

-
- [39] S. Hikami, A. I. Larkin, and Y. Nagaoka. Spin-orbit interaction and magnetoresistance in the two dimensional random system. *Progress of Theoretical Physics*, 63:707, 1980.
- [40] A. I. Larkin and D. E. Khmel'nitskii. Anderson localization and anomalous magnetoresistance at low temperatures. *Soviet Physics Uspekhi*, 25:185, 1982.
- [41] D. E. Khmel'nitskii. Localization and coherent scattering of electrons. *Physica B+C*, 126:235, 1984.
- [42] G. Bergmann. Weak localization in thin films: a time-of-flight experiment with conduction electrons. *Physics Reports*, 107:1, 1984.
- [43] S. Wang and P. E. Lindelof. Weak localization experiments on magnesium films: effects of substrate, ion implantation, microwaves, temperature, and resistivity/thickness on the phase and spin-orbit relaxation. *Journal of Low Temperature Physics*, 71:403, 1988.
- [44] S. V. Iordanskii, Yu. B. Lyanda-Geller, and G. E. Pikus. Weak localization in quantum wells with spin-orbit interaction. *JETP Letters*, 60:206, 1994.
- [45] W. Knap, C. Skierbiszewski, A. Zduniak, E. Litwin-Staszewska, D. Bertho, F. Kobbi, J. L. Robert, G. E. Pikus, F. G. Pikus, S. V. Iordanskii, V. Mosser, K. Zekentes, and Yu. B. Lyanda-Geller. Weak antilocalization and spin precession in quantum wells. *Physical Review B*, 53:3912, 1996.
- [46] A. Kawabata. Theory of negative magnetoresistance I. Application to heavily doped semiconductors. *Journal of the Physical Society of Japan*, 49:628, 1980.
- [47] A. Kawabata. On the field dependence of magnetoresistance in two-dimensional systems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 53:3540, 1984.
- [48] A. P. Dmitriev, V. Yu. Kachorovskii, and I. V. Gornyi. Nonbackscattering contribution to weak localization. *Physical Review B*, 56:9910, 1997.

-
- [49] S. McPhail, C. E. Yasin, A. R. Hamilton, M. Y. Simmons, E. H. Linfield, M. Pepper, and D. A. Ritchie. Weak localization in high-quality two-dimensional systems. *Physical Review B*, 70:245311, 2004.
- [50] R. P. Taylor, A. P. Micolich, R. Newbury, and T. M. Fromhold. Correlation analysis of self-similarity in semiconductor billiards. *Physical Review B*, 56:R12733, 1997.
- [51] D. M. Zumbühl, J. B. Miller, C. M. Marcus, K. Campman, and A. C. Gossard. Spin-orbit coupling, antilocalization, and parallel magnetic fields in quantum dots. *Physical Review Letters*, 89:276803.
- [52] D. M. Zumbühl, J. B. Miller, C. M. Marcus, D. Goldhaber-Gordon, J. S. Harris, K. Campman, and A. C. Gossard. Conductance fluctuations and partially broken spin symmetries in quantum dots. *Physical Review B*, 72:081305.
- [53] R. A. Jalabert, H. U. Baranger, and A. Douglas Stone. Conductance fluctuations in the ballistic regime: A probe of quantum chaos? *Physical Review Letters*, 65:2442, 1990.
- [54] H. U. Baranger, Rodolfo A. Jalabert, and A. Douglas Stone. Weak localization and integrability in ballistic cavities. *Physical Review Letters*, 70:3876, 1993.
- [55] I. L. Aleiner and A. I. Larkin. Divergence of classical trajectories and weak localization. *Physical Review B*, 54:14423, 1996.
- [56] Y. Takane and K. Nakamura. Semiclassical analysis of the ballistic weak localization in chaotic billiards: Role of partially time-reversed pairs of paths. *Journal of the Physical Society of Japan*, 66:2977, 1997.
- [57] P. W. Brouwer and C. W. J. Beenakker. Voltage-probe and imaginary-potential models for dephasing in a chaotic quantum dot. *Physical Review B*, 55:4695, 1997.
- [58] Y. Takane and K. Nakamura. Influence of small-angle diffraction on the ballistic conductance fluctuations in chaotic billiards. *Journal of the Physical Society of Japan*, 67:397, 1998.

-
- [59] K. Richter and M. Sieber. Semiclassical theory of chaotic quantum transport. *Physical Review Letters*, 89:206801, 2002.
- [60] G. M. Minkov, A. V. Germanenko, V. A. Larionova, S. A. Negashev, and I. V. Gornyi. Analysis of negative magnetoresistance: Statistics of closed paths. I. Theory. *Physical Review B*, 61:13164, 2000.
- [61] T. Nambu, S. Kawaji, K. Kuboki, Kawaguchi Y., J. Yoshino, and H. Sakaki. Negative magnetoresistance and inelastic scattering time in two-dimensional electron systems in GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterojunction interfaces. *Journal of the Physical Society of Japan*, 53:682, 1984.
- [62] M. I. Dyakonov. Magnetoconductance due to weak localization beyond the diffusion approximation: The high-field limit. *Solid State Communications*, 92:711, 1994.
- [63] M. M. Glazov and L. E. Golub. Nondiffusive weak localization in two-dimensional systems with spin-orbit splitting of the spectrum. *Semiconductors*, 40:1209, 2006.
- [64] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C++ : The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2002.
- [65] B. L. Al'tshuier, A. G. Aronov, and B. Z. Spivak. The aaronov-bohm effect in disordered conductors. *JETP Letters*, 33:94, 1981.
- [66] H.-P. Wittmann and A. Schmid. Anomalous magnetoconductance beyond the diffusion limit. *Journal of Low Temperature Physics*, 69:131, 1987.
- [67] A. Zduniak, M. I. Dyakonov, and W. Knap. Universal behavior of magnetoconductance due to weak localization in two dimensions. *Physical Review B*, 56:1996, 1997.
- [68] J. B. Miller, D. M. Zumbühl, C. M. Marcus, Yu. B. Lyanda-Geller, D. Goldhaber-Gordon, K. Campman, and A. C. Gossard. Gate-controlled spin-orbit quantum interference effects in lateral transport. *Physical Review Letter*, 90:076807, 2003.

-
- [69] E. McCann, K. Kechedzhi, Vladimir I. Fal'ko, H. Suzuura, T. Ando, and B. L. Al'tshuler. Weak-localization magnetoresistance and valley symmetry in graphene. *Physical Review Letters*, 97:146805, 2006.
- [70] A. Sawada and T. Koga. Universal modeling of weak antilocalization corrections in quasi-two-dimensional electron systems using predetermined return orbitals. *Physical Review E*, 95:023309, 2017.
- [71] B. L. Al'tshuler, A. G. Aronov, and Khmel'nitskii D. E. Effects of electron-electron collisions with small energy transfers on quantum localisation. *Journal of Physics C*, 15:7367, 1982.
- [72] M. I. D'yakonov and V. I. Perel. Spin orientation of electrons associated with the interband absorption of light in semiconductors. *Sov. Phys. JETP*, 33:1053, 1971.
- [73] F. Dettwiler, J. Fu, S. Mack, P. J. Weigle, J. C. Egues, D. D. Awschalom, and D. M. Zumbühl. Electrical spin protection and manipulation via gate-locked spin-orbit fields. *arXiv*: 1403.3518, 2014.
- [74] H. Y. Hwang, Y. Iwasa, M. Kawasaki, B. Keimer, N. Nagaosa, and Y. Tokura. Emergent phenomena at oxide interfaces. *Nature materials*, 11:103, 2012.
- [75] C. P. Umbach, C. Van Haesendonck, R. B. Laibowitz, S. Washburn, and R. A. Webb. Direct observation of ensemble averaging of the aharonov-bohm effect in normal-metal loops. *Physical Review Letters*, 56:386, 1986.
- [76] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. I. *Physical Review*, 37:405, 1931.
- [77] E. Ya. Sherman. Random spin-orbit coupling and spin relaxation in symmetric quantum wells. *Applied Physics Letters*, 82:209, 2003.
- [78] S. Faniel, T. Matsuura, S. Mineshige, Y. Sekine, and T. Koga. Weak localization/antilocalization in a nearly symmetric $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ quantum well. *AIP Conference Proceedings*, 1399:649, 2011.

-
- [79] T. Koga, T. Matsuura, S. Faniel, S. Souma, S. Mineshige, Y. Sekine, and H. Sugiyama. Beating analysis of shubnikov de haas oscillation in $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ double quantum well toward spin filter applications. *IEICE transactions on electronics*, 95:770, 2012.
- [80] K. K. Choi, D. C. Tsui, and K. Alavi. Dephasing time and one-dimensional localization of two-dimensional electrons in $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ heterostructures. *Physical Review B*, 36:7751, 1987.
- [81] A. G. Huibers, M. Switkes, C. M. Marcus, K. Campman, and A. C. Gossard. Dephasing in open quantum dots. *Physica B*, 249:348, 1998.
- [82] E. Akkermans. *Mesoscopic physics of electrons and photons*. Cambridge University Press, 2007.
- [83] F. Pierre, A. B. Gougam, A. Anthore, H. Pothier, D. Esteve, and Norman O. Birge. Dephasing of electrons in mesoscopic metal wires. *Physical Review B*, 68:085413, 2003.