

磁場中ディラック電子系半金属の
電子状態と輸送現象の理論

大和田光明

電気通信大学 情報理工学研究科
博士(理学)の学位申請論文

2019 年 3 月

磁場中ディラック電子系半金属の 電子状態と輸送現象の理論

博士論文審査委員会

主査 伏屋 雄紀 准教授

委員 中村 仁 准教授

委員 尾関 之康 教授

委員 大淵 泰司 准教授

委員 松林和幸 准教授

著作権所有者

大和田光明

2019 年

Theoretical study on the electronic state and the transport phenomena of the semimetals with Dirac electrons under a magnetic field.

Mitsuaki Owada

Abstract

Large and non-saturating magnetoresistance (MR) of semimetals has attracted renewed interest since the report of the non-saturating and quadratic MR on WTe₂. The interests are spread to unusual transport phenomena in topological semimetals, such as in WP₂, LaBi, Cd₃As, and NbP. A feature of these semimetals has the Dirac electron which has a linear dispersion and a nearly free hole which has quadratic dispersion.

For the analysis of the experimental data of MR, the semi-classical formula based on the Boltzmann equation is useful. The widely used formula is derived for the free electrons which have quadratic dispersion, but the Dirac electron has the linear dispersion. It is not adequate that using the conventional formula for the analysis of the MR on Dirac electron systems.

In order to clarify the property of MR in the semimetals with Dirac electrons, I studied the MR from the effective models of the Dirac electrons. First, the analytical formula of MR for the Dirac electron based on the Boltzmann theory is obtained and the existence of the correction which is specific to Dirac electrons revealed. Second, the MR for the semimetals in the quantum limit (QL) is discussed. By considering the magnetic field dependence of the carrier density, the obtained formula of MR for Dirac electrons quantitatively agrees with the calculation result based on the Kubo formula not only at weak magnetic fields but also in the QL. Third, we discussed the MR on bismuth in the QL. By using the obtained formula and considering the Landau levels of bismuth, we quantitatively explained the behavior of the MR for bismuth in the quantum limit. Fourth, the angle-dependence of MR is discussed. The MR formula for any Fermi-surface is renewed and the behavior of MR from the tight-binding model (TB) of bismuth and antimony. The theoretical result of bismuth is qualitatively consistent with the experimental data. It was revealed that the angle dependence of hole with TB on antimony and with the six ellipsoidal model are different.

In this study, new findings were obtained on the relationship between the electronic state of the Dirac electron system semimetal and the magnetoresistance.

磁場中ディラック電子系半金属の電子状態 と輸送現象の理論

大和田 光明

概要

近年、ディラック電子系半金属の量子極限における磁気抵抗の異常なふるまいが注目されている。磁気抵抗の実験データの解析には、ボルツマン理論に基づく式が便利だが、従来の式では久保公式に基づくディラック電子の磁気抵抗と定量的に一致しない。また、代表的なディラック電子系半金属のビスマスの量子極限における磁気抵抗の異常なふるまいを、先行研究では十分に説明できていない。前述の問題を解決するため、本研究ではディラック電子系半金属の電子状態からボルツマン理論に基づく磁気抵抗の式を再導出した。得られた式はディラック電子特有の補正を持つことが、新たに分かった。また、磁場中のビスマスの電子状態を考慮することで、量子極限における磁気抵抗のふるまいを定量的に説明することができた。本研究により、ディラック電子系半金属の電子状態と磁気抵抗の関係について新たな知見を得られた。

目次

第 1 章	序論：研究背景	3
1.1	ディラック電子と磁気抵抗	3
1.2	フェルミ面と角度依存性	4
第 2 章	電子状態と輸送理論	9
2.1	輸送理論	9
2.1.1	ドゥルーデ模型	9
2.1.2	ボルツマン方程式	10
2.1.3	久保公式	13
2.2	磁場中自由電子	21
2.2.1	軌道運動と電子状態	22
2.2.2	量子振動	28
2.2.3	量子極限	29
2.3	ディラック電子と半金属	32
2.3.1	様々なディラック電子	33
2.3.2	Wolff 模型	34
2.3.3	磁場中 Wolff 模型	37
2.3.4	V 族半金属	40
2.4	磁気抵抗	46
2.4.1	磁気抵抗研究の発展	48
2.4.2	近年の磁気抵抗研究	56
2.4.3	問題提起	59
第 3 章	ディラック電子系の磁気抵抗	63
3.1	ディラック電子に対する半古典的な磁気抵抗の公式	63
3.2	1 キャリア模型：ディラック電子 (ρ^D)	67
3.3	2 キャリア模型：ディラック電子と自由電子 (ρ^{D+Q})	69
第 4 章	ディラック電子系半金属の磁気抵抗	77
4.1	等方的なディラック電子系半金属と強磁場中の電子状態	77
4.2	久保公式に基づいた磁気抵抗の計算	80
4.2.1	選択則	80

4.2.2	磁気伝導度	81
4.3	磁気伝導度の比較：久保公式とボルツマン方程式	83
4.4	量子極限における磁気抵抗	85
第 5 章	ビスマスの磁気抵抗	89
5.1	磁場中ビスマスの有効模型	89
5.1.1	拡張ディラック模型	89
5.1.2	Smith-Barraf-Rowell 模型 (SBR 模型)	90
5.2	エネルギーとキャリア密度の磁場依存性	92
5.3	量子極限とディラック電子の磁気抵抗	93
第 6 章	電子状態と角度依存磁気抵抗	99
6.1	ビスマス	99
6.1.1	磁気伝導度の積分表示：弱磁場近似	99
6.1.2	角度依存磁気抵抗	101
6.2	アンチモン	106
6.2.1	磁気伝導度の積分表示：強磁場	106
6.2.2	サイクロトロン有効質量	108
6.2.3	フェルミ面断面積の計算	110
6.2.4	連結フェルミ面と 6 楕円体模型の磁気抵抗	112
6.2.5	連結フェルミ面と 6 楕円体模型の de Haas–van Alphen 振動	117
第 7 章	総括	125
付 録 A	研究の時系列	127
付 録 B	物理量の無次元化	131
付 録 C	de Haas–van Alphen 振動の計算アルゴリズム	135

第1章 序論：研究背景

本博士論文は、電子状態と磁気抵抗のふるまいの関係について主に研究しており、その内容は (i) 電子状態と磁気抵抗の磁場の変化に対するふるまいの関係、(ii) 角度依存磁気抵抗を用いたフェルミ面解析、の二つに分かれる¹。故に、本章の構成を二つに分け、(i) と (ii) の背景それぞれについて記述する。この章の最後に本論文全体の構成について説明する。

1.1 ディラック電子と磁気抵抗

最近、グラフェンやトポロジカル絶縁体、ワイル半金属など、ディラック電子系物質の物性が注目を集めている [1–4]。これらの物質では、非飽和磁気抵抗や線形磁気抵抗、超高移動度 (ultra-high mobility) など、異常な磁気抵抗のふるまいが実験的に報告され [5–8]、電子状態との関係が盛んに議論されている。ディラック電子の特徴は自由電子のエネルギーと異なるエネルギー分散にある。自由電子のエネルギーが波数の2次に比例 ($\varepsilon \propto k^2$) するのに対し、ディラック電子は波数の1次に比例する ($\varepsilon \propto k^1$)。しかし、これまでのディラック電子系物質の磁気抵抗のデータ解析では、自由電子のモデルを仮定した式を用いている場合がある [5, 9]。この解析は問題である。電子状態と磁気抵抗の関係に注目しているにも関わらず、ディラック電子の電子状態を無視した解析を行っている。これでは、真の意味でディラック電子の磁気抵抗を議論することはできない。前述の問題を解決するために、ディラック電子にも適用できる磁気抵抗の式が必要である。そこで本研究では、ディラック電子の有効モデルからボルツマン理論に基づいて磁気抵抗の式を再導出し、ディラック電子系物質の磁気抵抗のふるまいを明らかにする。

本研究では、ディラック電子の磁気抵抗の式を用いて、代表的なディラック電子系物質であるビスマスの磁気抵抗の計算を行う。ビスマスは古くから研究されており、有効質量などの物性が明らかとなっている。しかし、量子極限における異常な磁気抵抗も観測されている [10–13] (図 1.1)。物性が明らかで、定量的に比較可能なビスマスの磁気抵抗を研究することで、物性が不明な部分が多い A_3Bi [2] やワイル電子系物質の磁気抵抗を研究する入口が開ける。

ディラック電子の磁気抵抗の式は、自由電子にはない相対論的な補正 λ_{ε_F} が含まれている。この λ_{ε_F} を含む式を用いることで、従来の自由電子と同様に磁気抵抗の実験データの

¹ 本博士論文の第3章から第5章までが (i)、第6章が (ii) の内容である。

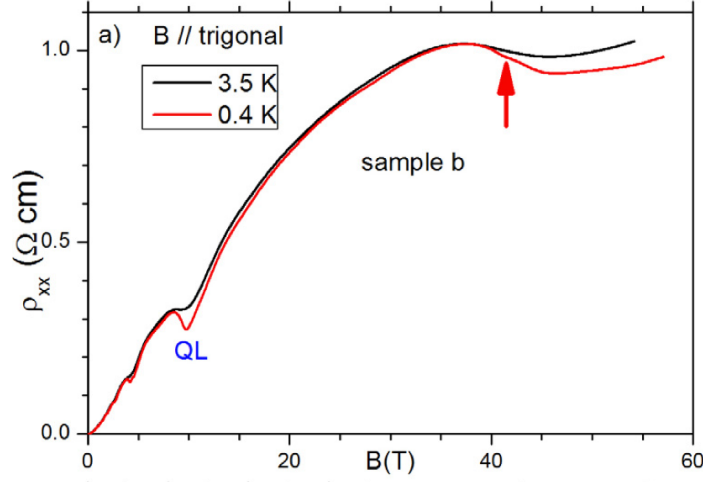


図 1.1: ビスマスの磁気抵抗 ($B \parallel \text{Trigonal 軸}$) [11]. 磁気抵抗が $B \sim 35\text{T}$ で値が飽和する. 電子と正孔のキャリア密度 n, p が異なる場合 ($n \neq p$) は, ボルツマン理論でこのふるまいを説明することができるが, 実験で確かめられていない.

解析が可能となる. ただし, 補正 λ_{eF} はフェルミエネルギーに依存する量である. 半金属であるビスマスのフェルミエネルギーとキャリア密度は, 量子極限で磁場に依存する [12,14]. 補正 λ_{eF} を加えることで, 量子極限におけるエネルギーの磁場依存性を磁気抵抗の計算に反映させられる. また, キャリア密度の磁場依存性も磁気抵抗に大きく影響を与える. λ_{eF} とキャリア密度の磁場依存性二つの効果を反映させることにより, 実験で観測されたビスマスの異常な磁気抵抗 (図 1.1 [11]) と定量的に一致する計算結果を得た.

本研究ではビスマスの磁気抵抗を計算したが, 再導出した式はビスマス以外のディラック電子系物質の磁気抵抗もここで導いた式を用いて計算できる. 加えて, 有限ギャップのディラック電子だけでなく, ギャップレスディラックの磁気抵抗も計算することができ, トポロジカル絶縁体やワイル電子系などの量子極限における磁気抵抗の研究に応用できる. 本研究によって, ディラック電子系物質の研究が大きく発展することが期待できる.

上述では磁気抵抗の磁場依存性について紹介した. だが, 磁気抵抗の角度依存性も近年注目を集めている. そこで, 電子状態と磁気抵抗の関係に関する研究を進展させ, 磁気抵抗の角度依存性についても研究を行なった.

1.2 フェルミ面と角度依存性

ディラック電子系物質や WTe_2 , ZrSiS などの巨大な磁気抵抗が報告されている [5,15]. WTe_2 と ZrSiS は楕円体模型で表せない複雑なフェルミ面を持つ. 前節で述べたように,

磁気抵抗の解析には自由電子²を仮定した磁気抵抗の式が用いられることがある [5, 9]. これでは、楕円体で表せないようなフェルミ面の異方性やトポロジを磁気抵抗の解析へ十分に反映させることができない. このことから、任意のフェルミ面に対して計算可能な磁気抵抗の式を再構築する必要がある.

本研究では、ボルツマン理論に基づく磁気抵抗の式を積分表示で改めて表すことにより、任意のフェルミ面に対する磁気抵抗を理論的に計算できる手法を開発した. また、開発した手法の一部を応用することで、ド・ハースーファン・アルフェン効果 (dHvA) も同様に計算することができる. 本研究で開発した磁気抵抗と dHvA の計算手法を第一原理計算と組み合わせることにより、非常に複雑なフェルミ面を持つ物質で、フェルミ面の異方性やトポロジを反映させた磁気抵抗と dHvA を計算することができる. 新物質が報告されたら直ちに磁気抵抗と dHvA を計算することで、どのような実験を行えばフェルミ面が決定できるか計画を立てることができる. また、理論計算と実験結果に差異があれば、そこに新たな発見があることを知ることも可能だ.

本研究では開発した手法を用いて、アンチモンの正孔フェルミ面の角度依存磁気抵抗と角度依存 dHvA を議論する. アンチモン研究の歴史は古く、従来の研究では、正孔フェルミ面は 6 つの楕円体が孤立して存在していると考えられている (6 楕円体模型, 図 1.2) [16]. しかし近年, 図 1.3 のような楕円体模型とはかけ離れたフェルミ面である可能性が示唆された (連結フェルミ面, 図 1.3(a)) [17]. 従来の楕円体模型を仮定して磁気抵抗の式では、連結フェルミ面のトポロジを磁気抵抗へ十分に反映させることは困難であり、実験と比較することのできる計算結果を得ることができない. 本研究の計算により、実験と比較可能な磁気抵抗と dHvA を得ることができる. 6 楕円体模型 (図 1.2) と連結フェルミ面 (図 1.3(a)) では、角度依存磁気抵抗と角度依存 dHvA で違いがあることが本研究の計算から判明した.

任意のフェルミ面から角度依存磁気抵抗と角度依存 dHvA を計算することは、フェルミ面を決定する上で、非常に有用である. 実験結果からフェルミ面を決定する場合、バンド計算から得られるフェルミ面の構造を人間が見て、実験結果と比較する [18–20]. この方法ではフェルミ面の構造が複雑になると、角度ごとの異方性やフェルミ面の断面積を人間が判断することは困難になる. しかし、本手法では機械的に実験と比較可能な角度依存磁気抵抗と角度依存 dHvA を計算することから、より正確に実験結果との比較が可能になる. また、人間が見つけられないような異方性を計算することができるので、実験データの解析が容易になる.

本博士論文ではアンチモンの正孔フェルミ面について計算を行なっているが、より複雑な ZrSiS [15] や LuPtBi [21] などのフェルミ面の角度依存磁気抵抗と角度依存 dHvA の計算が原理的には可能である. 本研究の手法を用いることで、様々な物質における研究の発展が期待できる.

²正確には楕円体のフェルミ面

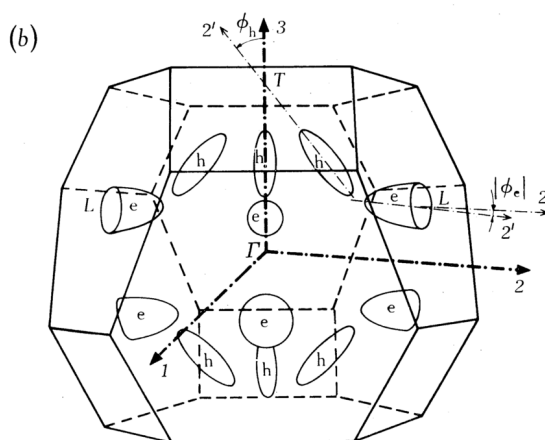


図 1.2: アンチモンのフェルミ面の配置 [16]. 各 L 点に電子フェルミ面 (e) が一つずつ, T 点の近傍に正孔フェルミ面 (h) が 6 つ存在する. 実験データの解析では, 電子フェルミ面と正孔フェルミ面は全て楕円体を仮定し, 電子フェルミ面は Bisectrix 軸に対して $-4^\circ \sim -7^\circ$ [22–24], 正孔フェルミ面は Trigonal 軸に対して 53° 傾いている [23, 24].

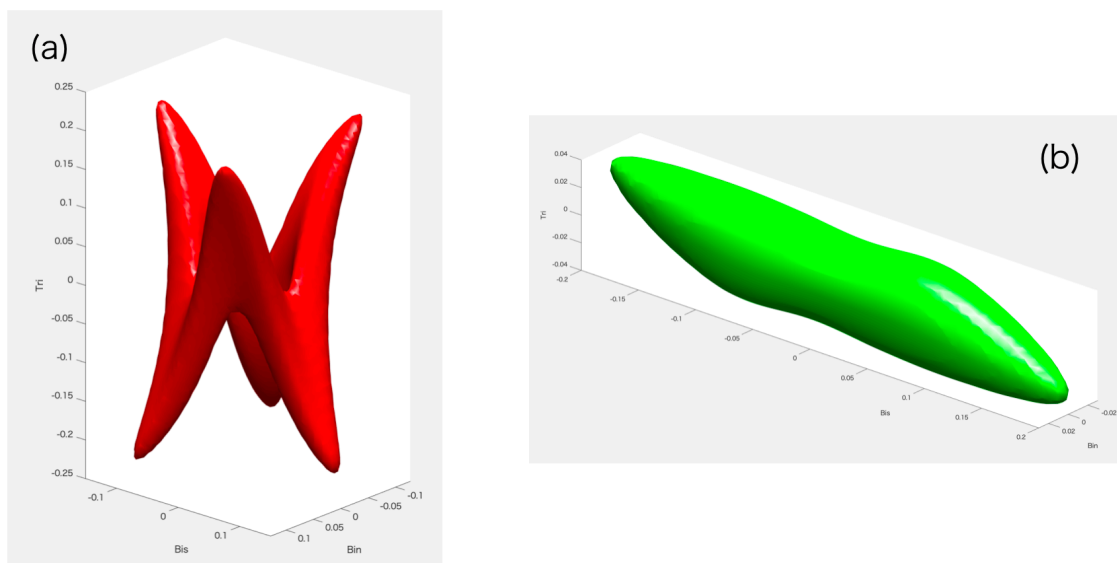


図 1.3: Liu–Allen 模型に基づくアンチモンのフェルミ面：(a) 正孔（連結フェルミ面） (b) 電子 [17]

本論文の構成

本論文の構成は次の通りである．第2章では，本研究と関わりのある“輸送理論”，“磁場中電子状態”などの基礎的な理論について説明する．第3章ではWolff模型からボルツマン理論に基づく磁気抵抗を再導出し，そのふるまいを示す．第4章では，磁場中の電子状態をボルツマン理論の磁気抵抗へ反映させ，等方的なディラック電子系半金属における量子極限の磁気抵抗のふるまいを議論する．この章では，再導出した式の磁気抵抗と久保理論に基づく磁気抵抗との比較も行う．第5章ではビスマスの電子状態とディラック電子の磁気抵抗の式を用いて，理論的にビスマスの量子極限における磁気抵抗のふるまいを計算し，実験との比較を行う．第6章では，任意のフェルミ面から角度依存磁気抵抗と角度依存dHvAを理論的に計算する手法を紹介し，図1.2と図1.3(a)について，角度依存磁気抵抗と角度依存dHvAを理論的に計算した．図1.2と図1.3(a)で，二つの量の角度依存性について，違いを明らかにした．第7章は，本論文全体の総括とした．

第2章 電子状態と輸送理論

この章では、本研究と関係する基礎的な理論と、本研究を行うに至った詳しい背景を紹介する。始めに基礎的な理論である“輸送理論”と“磁場中自由電子”について紹介する。その後、固体中の“ディラック電子”と“磁気抵抗”について触れる。本章の最後に先行研究の抱える問題点について説明する。

2.1 輸送理論

導体の両端に電池をつなぐと電流が流れるが、電流の流れにくさを表す「抵抗」の大きさは、導体ごとに異なる。この違いを議論するためには、電子が導体中をどのように運動するのかを考える必要がある。この節では、古典的なドゥルーデ模型、半古典的なボルツマン理論、量子論的な久保理論について触れる [13, 25–31]。

2.1.1 ドゥルーデ模型

1900年、Paul Drude が金属電子の運動を説明する理論を発表した [32]。現在ドゥルーデ模型と呼ばれるこの理論は、直感的に理解しやすく、実験結果との比較が容易であるから、電気伝導研究の有用な模型と言える。ドゥルーデ模型は次の4つを前提としている [25]。

1. 電子は自由電子とする。運動している電子は金属中イオンや他の電子と衝突・散乱はされるが、電子-電子間の相互作用は無視できる。
2. 電子と陽イオンで、物質の電気的中性が保たれている。
3. 電子と陽イオンが衝突する確率は一定である。
4. 陽イオンに衝突した電子の速度は、衝突した陽イオンの温度によって決まる。しかし、衝突後の電子はランダムな方向に運動するので、速度の平均はゼロになる。

導体中の電子に電場 \mathbf{E} を作用させると、電子の運動方程式は次のように表される

$$\hat{m}^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e\mathbf{E} - \frac{1}{\tau} \hat{m}^* \mathbf{v} \quad (2.1)$$

m^* は電子の有効質量, τ は緩和時間を表す. 本論文では, テンソル量については \hat{m}^* , $\hat{\mu}$ のように, 記号ハット ($\hat{\cdot}$) を用いる. 易動度 $\hat{\mu}$ を $\mu_{ij} = \frac{e\tau}{m_i^*} \delta_{ij}$ とおき, 式 (2.1) を \mathbf{v} について解くと

$$\mathbf{v} = -\hat{\mu}\mathbf{E} + \mathbf{C}e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (2.2)$$

となる. 電流は, 十分に時間が経過した場合を考えると ($t \rightarrow \infty$), 第二項は無視できる. 電流密度 $\mathbf{j} = -en\mathbf{v}$ に式 (2.2) を代入すると,

$$\mathbf{j} = en\hat{\mu}\mathbf{E} \quad (2.3)$$

が得られる. $\mathbf{j} = \hat{\sigma}\mathbf{E}$ より, 電気伝導度 σ は

$$\hat{\sigma} = ne\hat{\mu} \quad (2.4)$$

となることがわかる.

2.1.2 ボルツマン方程式

キャリア輸送におけるボルツマン方程式は, 電子の動的な運動を古典的なニュートンの運動方程式に基づくと仮定している. 一方, それらの量子力学的なエネルギーやフェルミ分布関数を考慮することで量子力学的な効果を取り入れる. このように, 古典的な運動に基づき量子力学的な効果を取り入れたボルツマン方程式は, 半古典的な輸送理論の式と言える. ここでは, ボルツマン方程式に基づいて, どのように伝導度が得られるか紹介する.

熱平衡状態における波数 \mathbf{k} の電子の分布関数はフェルミ分布関数 $f_0(\mathbf{k})$ で表現される

$$f_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{\exp[(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/k_B T] + 1}. \quad (2.5)$$

μ は化学ポテンシャル, T は温度, k_B はボルツマン定数である. 外部から電場や磁場, 温度差を加えることによって, 系は熱平衡状態からずれた状態になる. 系のフェルミ分布関数が乱されることで, \mathbf{k} の他に実空間における座標 \mathbf{r} と時刻 t の両方に依存する. この乱された分布関数を $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ とおく. 電子の運動について考えてみる. 電子の速度 $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ と運動量 $\hbar\mathbf{k}$ は, 電子のエネルギー $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ と外場から受ける力 \mathbf{F} に対して次の関係を持つ

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \quad (2.6)$$

$$\frac{d(\hbar\mathbf{k})}{dt} = \mathbf{F}. \quad (2.7)$$

時刻 t に座標 (\mathbf{r}, \mathbf{k}) で速度 $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ の運動をする電子は, 時刻 $t+dt$ に $(\mathbf{r}', \mathbf{k}') = (\mathbf{r} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}}dt, \mathbf{k} + \frac{\mathbf{F}}{\hbar}dt)$ へ移動する. 元々 (\mathbf{r}, \mathbf{k}) にいた電子が $t+dt$ に $(\mathbf{r}', \mathbf{k}')$ に移動する. このとき, 二つの座標におけるキャリア数は等しいから,

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{k} = f(\mathbf{r}', \mathbf{k}', t+dt) d\mathbf{r}' d\mathbf{k}' \quad (2.8)$$

が満たされる． $d\mathbf{r}d\mathbf{k}, d\mathbf{r}'d\mathbf{k}'$ は位相空間の座標 $(\mathbf{r}, \mathbf{k}), (\mathbf{r}', \mathbf{k}')$ 近傍の微小体積をそれぞれ表す．リュービルの定理から， $d\mathbf{r}d\mathbf{k} = d\mathbf{r}'d\mathbf{k}'$ が成立するので，上式は，

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)d\mathbf{r}d\mathbf{k} = f(\mathbf{r}', \mathbf{k}', t + dt) \quad (2.9)$$

となる．しかし，運動している電子は散乱されることから， (\mathbf{r}, \mathbf{k}) から $(\mathbf{r}', \mathbf{k}')$ へ本来移動しない電子が $(\mathbf{r}', \mathbf{k}')$ へ移動したり，移動しない場合がある．時刻 dt の間に散乱過程で変化する電子数の変化 $(\partial f / \partial t)_{\text{scatt.}} dt$ を考慮すると

$$f\left(\mathbf{r} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}}dt, \mathbf{k} + \frac{\mathbf{F}}{\hbar}dt, t + dt\right) = f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{scatt.}} dt \quad (2.10)$$

が成り立つ．左辺を dt の一次までテイラー展開すると

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f + \frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{scatt.}} \quad (2.11)$$

となる．この式をボルツマン方程式と呼ぶ．式 (2.11) はこのままだと解くことが困難である．散乱過程において，熱平衡状態から非平衡状態への変化は小さい．一般に，熱平衡状態の方が非平衡状態より安定した状態であるため，散乱過程によって非平衡状態になった系は緩和時間 τ で熱平衡状態に戻ろうとする．非平衡状態から熱平衡状態までの変化速度を，それぞれの分布関数の差で表されると仮定すると（緩和時間近似）

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f + \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau}. \quad (2.12)$$

となる．電子に一律な電場 \mathbf{E} だけが働いているとする．このとき，フェルミ分布関数は $\nabla_{\mathbf{r}} f = 0$ である．また，定常状態において $\partial f / \partial t = 0$ であるので，ボルツマン方程式は，次式で表される

$$-\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = -\frac{f - f_0}{\tau}. \quad (2.13)$$

平衡状態から非平衡分状態への変化が小さく，非平衡状態の分布関数は平衡状態の分布関数を用いて，次式で表されると仮定する，

$$f = f_0 - \Phi \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}. \quad (2.14)$$

Φ は外場によって分布関数がどれだけ変化したかの重みを表す．式 (2.14) を式 (2.13) に代入すると，

$$-\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \left[\nabla_{\mathbf{k}} f_0 - (\nabla_{\mathbf{k}} \Phi) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} - \Phi \left(\nabla_{\mathbf{k}} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \right] = \frac{1}{\tau} \Phi \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \quad (2.15)$$

Φ は外場 \mathbf{E} に比例するので¹, 式 (2.15) の $\mathbf{E}\Phi$ の積は電場 \mathbf{E} の2次になり, 線形応答の範囲では $\mathbf{E}\Phi$ を無視することができる. また $\frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}f_0 = v_{\mathbf{k}}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$ より式 (2.15) の左辺は,

$$\begin{aligned} & -\frac{e}{\hbar}\mathbf{E} \cdot \left[\nabla_{\mathbf{k}}f_0 - (\nabla_{\mathbf{k}}\Phi)\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} - \Phi \left(\nabla_{\mathbf{k}}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \right] \\ & = -\frac{e}{\hbar}\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}f_0 \\ & = -e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \end{aligned} \quad (2.16)$$

となる. 式 (2.15) を変形した結果が恒等式であるためには $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$ の係数が0でなくてはならない. よって, 式 (2.16) と式 (2.15) から

$$\Phi = -e\tau\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \quad (2.17)$$

であることがわかる.

電流密度 \mathbf{j} の定義はスピンの縮退を考慮すると,

$$\begin{aligned} \mathbf{j} & = -en\langle \mathbf{v} \rangle \\ & = \frac{2}{(2\pi)^3} \int (-e)\mathbf{v}_{\mathbf{k}}f d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (2.18)$$

である. 熱平衡状態において電流密度がゼロである. 式 (2.14), (2.17) を式 (2.18) に代入すると,

$$\begin{aligned} \mathbf{j} & = \frac{1}{4\pi^3} \int (-e)\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \left(f_0 - \Phi \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\mathbf{k} \\ & = \frac{e}{4\pi^3} \int \mathbf{v}_{\mathbf{k}}\Phi \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\mathbf{k} \\ & = \frac{e^2\tau}{4\pi^3} \int \mathbf{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (2.19)$$

が得られる².

異方性を考慮した自由電子の場合について考える. 外場が働いていない場合, この電子のエネルギーは

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z^*} \quad (2.20)$$

¹ Φ は外場による分布関数の変化の重みを表す.

² f_0 は熱平衡状態におけるフェルミ分布関数を表すので, f_0 を含む項はゼロとなる.

で表される． m_i^* は i 方向の有効質量である． $T = 0\text{K}$ で $(-\partial f^0/\partial \varepsilon) = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$ より，式 (2.20) を用いて式 (2.19) を積分すると，直ちに次式が得られる．

$$\begin{aligned} J_i &= \frac{ne^2\tau}{m_i^*} E_j \\ &= ne\mu_{ij} E_j. \end{aligned} \quad (2.21)$$

式 (2.21) から，電気伝導度は

$$\hat{\sigma} = ne\hat{\mu} \quad (2.22)$$

である．半古典的なボルツマン理論に従って得られた上式は，古典的なドゥルーデ理論（式 (2.4)）と明らかに一致している [25–27]．古典的ではあるものの，ドゥルーデ理論が信頼できることがわかる．ただし，ドゥルーデ理論は自由電子を仮定し，電子-電子相関などを無視している．有効模型が自由電子では一致しない金属や，電子-電子相関が強い系では，ボルツマン理論や後述する久保公式に基づいた計算を行うべきである．

2.1.3 久保公式

線形応答理論

$T = 0\text{K}$ の場合について考える．粒子数が M の系において，状態 m の粒子数を M_m とすると注目する粒子が状態 m である確率演算子 \mathcal{P}_m と密度行列 ρ は次式で定義される [29]

$$\mathcal{P}_m = \frac{M_m}{M} \quad (2.23)$$

$$\sum_m \mathcal{P}_m = 1 \quad (2.24)$$

$$\rho = \sum_m |m\rangle \mathcal{P}_m \langle m| \quad (2.25)$$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \quad (2.26)$$

式 (2.24)-(2.26) より，

$$\text{Tr}(\rho) = \sum_n \langle n|\rho|n\rangle = \sum_n \mathcal{P}_n = 1 \quad (2.27)$$

となる．状態 m に対して任意の物理量 B の期待値 $\langle B \rangle$ は，次式で計算される

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \sum_m \mathcal{P}_m \langle m| B |m\rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle n|\rho B|n\rangle \\ &= \text{Tr}(\rho B). \end{aligned} \quad (2.28)$$

ρ の時間に依存したシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial |m\rangle}{\partial t} = \mathcal{H} |m\rangle \quad (2.29)$$

が成立するので、式 (2.25) から

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \sum_m i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (|m\rangle \mathcal{P}_m \langle m|) \\ &= \sum_m \left(i\hbar \frac{\partial |m\rangle}{\partial t} \mathcal{P}_m \langle m| - |m\rangle \mathcal{P}_m \left(-i\hbar \frac{\partial \langle m|}{\partial t} \right) \right) \\ &= \sum_m (\mathcal{H} |m\rangle \mathcal{P}_m \langle m| - |m\rangle \mathcal{P}_m \langle m| \mathcal{H}) \\ &= \mathcal{H} \rho - \rho \mathcal{H} = [\mathcal{H}, \rho] \end{aligned} \quad (2.30)$$

となる．時刻 $t = -\infty$ で熱平衡状態にある系の大正準集団の密度行列 ρ_0 は、熱平衡状態におけるハミルトニアン H_0 を用いて、次式で表される

$$\rho_0 = \frac{e^{-\beta H_0}}{\text{Tr}(e^{-\beta H_0})}. \quad (2.31)$$

この熱平衡状態の系に外場による摂動 $H'(t)$ を加えると、そのハミルトニアン \mathcal{H} と密度行列 ρ は

$$\mathcal{H} = H_0 + H'(t) \quad (2.32)$$

$$\rho(t) = \rho_0 + \rho'(t) \quad (2.33)$$

と表現される． $\rho'(t)$ は $H'(t)$ によって生じた密度行列の変化である．密度行列について $H'(t)$ の一次に対する変化を見ると、

$$i\hbar \frac{\partial \rho'(t)}{\partial t} = [H_0, \rho'(t)] + [H'(t), \rho_0] \quad (2.34)$$

が成立する³．式 (2.34) の解は

$$\rho'(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-iH_0(t-t')/\hbar} [H'(t'), \rho_0] e^{iH_0(t-t')/\hbar} \quad (2.35)$$

となる．

熱平衡状態における任意の物理量 B の平均値を $\langle \rho_0 B \rangle = 0$ と仮定すると、式 (2.28) から時刻 t における B の平均値は

$$\langle B \rangle = \langle \rho_0 B \rangle + \langle \rho' B \rangle = \langle \rho' B \rangle \quad (2.36)$$

³ $H'(t)$ に対する密度行列の変化は $\rho'(t)$ の変化に相当する．また、 $[H_0, \rho]$ は $H'(t)$ の 0 次、 $[H'(t), \rho'(t)]$ は $H'(t)$ の二次の変化になるので、ここでは無視する．

と記述できる⁴．ここで、外場の摂動を時刻 t に依存しない演算子 \mathcal{A} を使って

$$H'(t) = -\mathcal{A}e^{-i\omega t} \quad (2.37)$$

と仮定する．式 (2.35) と (2.37) を式 (2.36) に代入すると、次式が得られる

$$\langle B \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega t'} \text{Tr} \left(e^{-iH_0(t-t')/\hbar} [\mathcal{A}, \rho_0] e^{iH_0(t-t')/\hbar} B \right). \quad (2.38)$$

上式について、変数変換 ($t - t' = \tau$) を行くと

$$\langle B \rangle = B(\omega) e^{-i\omega t} \quad (2.39)$$

$$B(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty d\tau e^{i\omega\tau} \text{Tr} \left(e^{-iH_0\tau/\hbar} [\mathcal{A}, \rho_0] e^{iH_0\tau/\hbar} B \right) \quad (2.40)$$

となり、物理量の統計平均 $\langle B \rangle$ は外場と同じ時間依存性を持つことがわかる．式 (2.40) は角振動数 ω の外場について、一次の項までを考慮した物理量 B の応答である．このことから、上述の理論を線形応答理論と呼ぶ．

線形応答理論を用いて電気伝導度を計算する場合、式 (2.40) はそのまま使用せず、変形した式を使用する．式 (2.40) について

$$X(t) = \text{Tr} \left(e^{-iH_0t/\hbar} [\mathcal{A}, \rho_0] e^{iH_0t/\hbar} B \right) \quad (2.41)$$

とし、($\tau \rightarrow t$) の変換を行うと、

$$B(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} X(t) \quad (2.42)$$

となる． $i\omega \rightarrow i\omega - \delta$ ($\delta > 0$) とおくと、

$$\begin{aligned} B(\omega) &= \lim_{\delta \rightarrow +0} \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty e^{i\omega t} X(t) dt \\ &= \lim_{\delta \rightarrow +0} \frac{i}{\hbar} \left(\left[\frac{e^{(i\omega - \delta)t}}{i\omega - \delta} X(t) \right]_0^\infty - \int_0^\infty dt \frac{e^{(i\omega - \delta)t}}{i\omega - \delta} \frac{dX(t)}{dt} \right) \\ &= \lim_{\delta \rightarrow +0} \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{X(0)}{i\omega - \delta} - \int_0^\infty dt \frac{e^{i\omega t}}{i\omega - \delta} \frac{dX(t)}{dt} \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{X(0)}{i\omega} - \int_0^\infty dt \frac{e^{i\omega t}}{i\omega} \frac{dX(t)}{dt} \right) \end{aligned} \quad (2.43)$$

となる．ここで、 $X(t \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ と仮定すると、

$$X(t \rightarrow \infty) - X(0) = -X(0) = \int_0^\infty \frac{dX(t)}{dt} dt \quad (2.44)$$

⁴行列の対角和は線型性を持つ

が成り立つので、式 (2.43) は

$$B(\omega) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \frac{e^{i\omega t} - 1}{i\omega} \frac{dX(t)}{dt} dt \quad (2.45)$$

となる.

次に $X(t)$ を相関関数で表現する. 式 (2.41) を時間について微分すると,

$$\frac{dX(t)}{dt} = -\langle B(t)\dot{A}(0) - \dot{A}(0)B(t) \rangle \quad (2.46)$$

と表される. ただし,

$$\dot{A} = \frac{i}{\hbar} (H_0 A - A H_0) \quad (2.47)$$

である. 遅延グリーン関数の定義と対応するように, 遅延相関関数 $\mathcal{Q}^R(t)$ を

$$\mathcal{Q}^R(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle B(t)\dot{A}(0) - \dot{A}(0)B(t) \rangle \quad (2.48)$$

と定義する.⁵ 式 (2.46), (2.48) から, 式 (2.45) は

$$\begin{aligned} B(\omega) &= -\int_{-\infty}^\infty \frac{e^{i\omega t} - 1}{i\omega} \mathcal{Q}^R(t) dt \\ &= -\frac{\mathcal{Q}^R(\omega) - \mathcal{Q}^R(0)}{i\omega} \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\mathcal{Q}^R(\omega) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \theta(t) \langle B(t)\dot{A}(0) - \dot{A}(0)B(t) \rangle \quad (2.50)$$

となる.

電気伝導度

電荷 $-e$ ($e > 0$) の粒子の集団に対して外場 $\mathbf{E} \exp(-i\omega t)$ を作用させる場合を考える. この時, 式 (2.37) の摂動ハミルトニアン $H'(t)$ と演算子 \mathcal{A} は

$$H'(t) = -e \sum_n \mathbf{r}_n \cdot \mathbf{E} e^{-i\omega t} \quad (2.51)$$

$$\mathcal{A} = e \sum_n \mathbf{r}_n \cdot \mathbf{E} \quad (2.52)$$

⁵遅延グリーン関数 $G^R(t-t')$ は場の演算子 $\psi(t), \psi^\dagger(t')$ を用いて,

$$G^R(t-t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \langle \psi(t) \psi^\dagger(t') + \psi^\dagger(t') \psi(t) \rangle$$

と定義される. 括弧 $\langle \rangle$ の中が, $G^R(t-t')$ では反交換関係, $\mathcal{Q}^R(t)$ では交換関係という違いはあるが, $G^R(t-t')$ について $t' = 0$ とおくと, $G^R(t-t')$ と $\mathcal{Q}^R(t)$ の時刻に関する関係は対応する.

となる． \mathcal{A} についてのハイゼンベルク方程式は，(\mathcal{H}_0 は無摂動のハミルトニアン)

$$\begin{aligned}\dot{\mathcal{A}} &= \frac{1}{i\hbar}[\mathcal{A}, \mathcal{H}_0] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \frac{e}{2m} \sum_n [\mathbf{r}_n \cdot \mathbf{E}, \mathbf{p}_n^2] \\ &= \frac{e}{m} \sum_n \mathbf{p}_n \cdot \mathbf{E} \\ &= \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}\end{aligned}\tag{2.53}$$

となる． \mathbf{j} は系の全電流密度である ($\mathbf{j} = (e/m) \sum_n \mathbf{p}_n$)．外場の応答に対する物理量 \mathbf{B} を電流密度 \mathbf{j} の $\mu = x, y, z$ 方向の成分 j_μ と考えると，式 (2.49)，(2.53) から

$$j_\mu(\omega) = \sigma_{\mu\nu}(\omega) E_\nu\tag{2.54}$$

となり，電気伝導度テンソル $\sigma_{\mu\nu}$ は

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = -\frac{1}{i\omega} [\mathcal{Q}_{\mu\nu}^R(\omega) - \mathcal{Q}_{\mu\nu}^R(0)]\tag{2.55}$$

$$\mathcal{Q}_{\mu\nu}^R(\omega) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t) \langle j_\mu(t) j_\nu(0) - j_\nu(0) j_\mu(t) \rangle\tag{2.56}$$

である．

有限温度への拡張

前節までは， $T = 0$ を仮定した計算を行ってきた．しかし，現実の物性を議論するためには有限温度 ($T \neq 0$) での計算を行う必要がある．そこで，式 (2.55)，(2.56) を温度相関関数 \mathcal{Q} を用いて，次のように書き直す [30, 31]．

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = -\frac{1}{i\omega} [\mathcal{Q}_{\mu\nu}(\omega) - \mathcal{Q}_{\mu\nu}(0)]\tag{2.57}$$

$$\mathcal{Q}_{\mu\nu}(\tau) = -\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} \langle T_\tau \{ J_\mu(\tau) J_\nu(0) \} \rangle\tag{2.58}$$

ω_λ は松原振動数， τ は虚時間を表す．場の量子化から演算子 J_μ は，

$$J_i = e \sum v_i \psi_{k\sigma}^\dagger \psi_{k\sigma}\tag{2.59}$$

と表されるので，式 (2.58) は

$$\mathcal{Q}(i\omega_\lambda) = \frac{e^2 \hbar^2}{m^2} \sum_{kk'} k_\mu k'_\nu \mathcal{F}(i\omega_\lambda)\tag{2.60}$$

$$\mathcal{F} = -\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} \langle T_\tau \{ \bar{\psi}_{k\sigma}(\tau) \psi_{k\sigma}(\tau) \bar{\psi}_{k'\sigma'}(0) \psi_{k'\sigma'}(0) \} \rangle.\tag{2.61}$$

となる． ψ_k, ψ_k^\dagger は虚時間においてエルミート共役ではないので，式 (2.61) 中において $\psi_k^\dagger(\tau) \rightarrow \bar{\psi}_k(\tau)$ とした． \mathcal{F} は二粒子グリーン関数にあたる部分である．二粒子グリーン関数を正確に計算することは難しいことから，ここでは $\tau > 0$ のもと，二粒子グリーン関数を独立した二つの一粒子グリーン関数 ($\mathcal{F} = \mathcal{G}(k, -\tau)\mathcal{G}(k, \tau)$) に近似する．フーリエ展開 ($\mathcal{G}(\tau) = \beta^{-1} \sum e^{-i\xi_n \tau} \mathcal{G}(i\xi_n)$) から，温度相関関数は次式で表すことができる

$$\mathcal{Q}_{\mu\nu}(i\omega_\lambda) = e^2 k_B T \sum_{n,k,\sigma} v_\mu v_\nu \mathcal{G}(k, -i\xi_n) \mathcal{G}(k, i\xi_n - i\omega_\lambda) \quad (2.62)$$

ξ_n は松原振動数と呼ばれ， $\xi_n = (2n+1)\pi k_B T$ の値をとる．松原振動数の和 \sum_n を計算することで，温度相関関数 \mathcal{Q} は遅延グリーン関数 G^R と先進グリーン関数 G^A で表され，電気伝導度 (2.57) が計算可能になる．

ξ_n の和をとる際に，複素関数と留数定理を用いることで計算を容易に行うことができる．まず，以下のような複素積分を考える．

$$\oint_C \frac{dz}{2\pi i} f(z)g(z) \quad (2.63)$$

$g(z)$ は任意の複素関数， $f(z)$ はフェルミ分布関数

$$f(z) = \frac{1}{e^{z/k_B T} + 1} \quad (2.64)$$

である． $f(z)$ は $z = i(2n+1)\pi k_B T$ に極を持つ．この極が，前述の松原振動数 $i\xi_n$ と一致することから，留数定理を用いると，

$$k_B T \sum_n g(i\xi_n) = - \oint_C \frac{dz}{2\pi i} f(z)g(z) \quad (2.65)$$

が成り立つ⁶．

式 (2.65) の積分経路は，極を個別に囲むと経路全てを内側に収めるような大きな積分経路でも良い (図 2.1)．しかし，今回計算する相関関数 (式 (2.62)) では， $z = x, x + i\omega_\lambda$ の直線を境に解析性が変化する (x は任意の実数)．このような場合， $\text{Im}(z) = 0, \omega_\lambda$ の直線を横切るような経路をとれないことから，図 2.2 のような積分経路を考える．図 2.2 の点線は，無限遠方にあると仮定している．半径が無限大の周回積分部分の寄与はゼロになるから⁷，図 2.2 の実線部分の経路 C_1, C_2, C_3, C_4 について， $-\infty$ から $+\infty$ 範囲の積分だ

⁶ $e^{z/k_B T}$ を $z = i(2n+1)\pi k_B T$ の周りで，展開すると，

$$\frac{1}{e^{z/k_B T} + 1} \simeq -k_B T \frac{1}{z - i(2n+1)\pi k_B T}$$

となるので，フェルミ分布関数 $f(z)$ の留数は $-k_B T$ である

⁷ 例えば， $(z^2 + 1)^{-1}$ という関数について $\text{Im}(z) > 0$ 領域の周回積分を考えた場合， $z = re^{i\phi} (0 \leq \phi \leq \pi)$ とすると，

$$\int_C \frac{1}{z^2 + 1} dz = \int_0^\pi \frac{ire^{i\phi}}{r^2 e^{i2\phi} + 1} d\phi$$

となる． r が十分大きいと，上式は近似的に $\int_0^\pi ir^{-1} e^{-i\phi} d\phi$ と表せるので， $r \rightarrow \infty$ でゼロになる [33]．

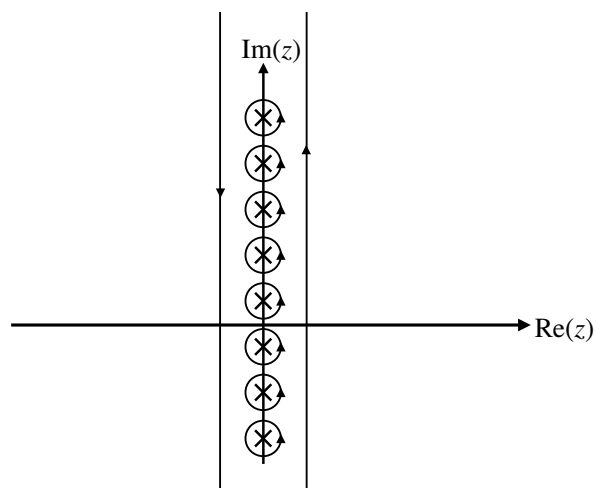


図 2.1: (上) フェルミ分布関数 $f(z)$ の極の位置 (×) と極を囲む積分経路

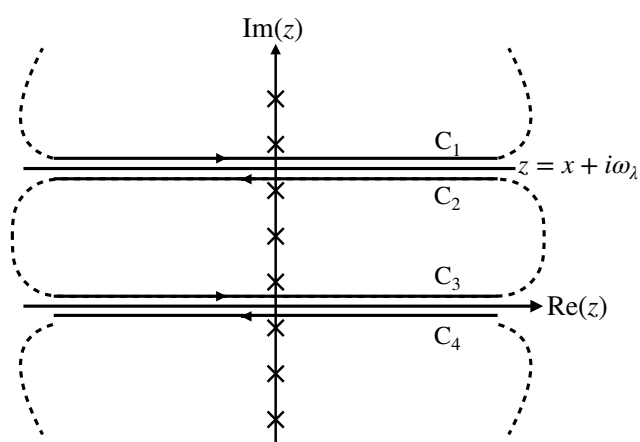


図 2.2: $i\xi_n$ の和をとるための積分経路

けを考えればよい。

ここからは、式 (2.62) のグリーン関数部分 $\mathcal{F} = k_B T \sum_n \mathcal{G}(k, -i\xi_n) \mathcal{G}(k, i\xi_n - i\omega_\lambda)$ に具体的な関数を代入して、実際に計算していく。ここでは、 $\mathcal{G}(k, -i\xi_n) = 1/(i\xi_n - \varepsilon_2 + i\Gamma \text{sgn}(\xi_n))$, $\mathcal{G}(k, i\xi_n - i\omega_\lambda) = 1/(i\xi_n - i\omega_\lambda - \varepsilon_1 + i\Gamma \text{sgn}(\xi_n - \omega_\lambda))$ として、 \mathcal{F} を以下のよう表す

$$\mathcal{F} = k_B T \sum_n \frac{1}{i\xi_n - \varepsilon_2 + i\Gamma \text{sgn}(\xi_n)} \frac{1}{i\xi_n - i\omega_\lambda - \varepsilon_1 + i\Gamma \text{sgn}(\xi_n - \omega_\lambda)}. \quad (2.66)$$

Γ は不純物散乱を表す ($\Gamma = \hbar/2\tau$)。式 (2.65) と図 2.2 の積分経路から、式 (2.66) は

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = \frac{1}{2\pi i} & \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{1}{x + \hbar\omega - \varepsilon_2 + i\Gamma} \frac{1}{x + \hbar\omega - \varepsilon_1 + i\Gamma} \right. & (C_1) \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{1}{x + \hbar\omega - \varepsilon_2 + i\Gamma} \frac{1}{x - \varepsilon_1 - i\Gamma} & (C_2) \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{1}{x - \varepsilon_2 + i\Gamma} \frac{1}{x - \hbar\omega - \varepsilon_1 - i\Gamma} & (C_3) \\ & \left. - \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{1}{x - \varepsilon_2 - i\Gamma} \frac{1}{x - \hbar\omega - \varepsilon_1 - i\Gamma} \right] & (C_4). \end{aligned} \quad (2.67)$$

となる⁸⁹。 $T \rightarrow 0(\text{K})$ で $df(x)/dx$ はデルタ関数 $\delta(x - \varepsilon_F)$ と等しくなることから、式 (2.67) の (C₁) + (C₄) について部分積分を行うと、

$$\begin{aligned} (C_1) + (C_4) &= \frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_2 - \varepsilon_1 + 2i\Gamma} \\ &\times \left[\ln(\varepsilon_F - \varepsilon_2 - i\Gamma) - \ln(\varepsilon_F - \hbar\omega - \varepsilon_2 - i\Gamma) \right. \\ &\quad \left. + \ln(\varepsilon_F - \varepsilon_1 + i\Gamma) - \ln(\varepsilon_F + \hbar\omega - \varepsilon_1 + i\Gamma) \right] \end{aligned} \quad (2.68)$$

が得られる。(C₂) + (C₃) についても部分積分を行うと、

$$\begin{aligned} (C_2) + (C_3) &= -\frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_2 - \varepsilon_1} \\ &\times \left[\ln(\varepsilon_F - \varepsilon_2 + i\Gamma) - \ln(\varepsilon_F - \hbar\omega - \varepsilon_2 - i\Gamma) \right. \\ &\quad \left. + \ln(\varepsilon_F - \varepsilon_1 - i\Gamma) - \ln(\varepsilon_F + \hbar\omega - \varepsilon_1 + i\Gamma) \right] \end{aligned} \quad (2.69)$$

⁸ 式 (2.66) からの変換の際に、 $i\omega_\lambda \rightarrow \omega$ とし、経路 C₁ と C₂ では $z = x + \omega$ 、経路 C₃ と C₄ では $z = x$ と置き換えを行なっている。積分は経路が実軸に対して平行であることから、積分変数を $z \rightarrow x$ と変換した。

⁹ 式 (2.66) は $z^{-1} = (x \pm i\Gamma)^{-1}$ の積を含んでいる。 $+i\Gamma$ を含む関数が遅延グリーン関数 G^R 、 $-i\Gamma$ を含む関数が先進グリーン関数 G^A に相当する。

が得られるので、式 (2.67) は

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(\omega, \varepsilon_1, \varepsilon_2) = & \frac{i}{2\pi} \left[\frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_2 - \varepsilon_1 + 2i\Gamma} \right. \\
& \times \left[\ln(\varepsilon_F - \varepsilon_2 - i\Gamma) - \ln(\varepsilon_F - \hbar\omega - \varepsilon_2 - i\Gamma) \right. \\
& \left. + \ln(\varepsilon_F - \varepsilon_1 + i\Gamma) - \ln(\varepsilon_F + \hbar\omega - \varepsilon_1 + i\Gamma) \right] \\
& - \frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_2 - \varepsilon_1} \left[\ln(\varepsilon_F - \varepsilon_2 + i\Gamma) - \ln(\varepsilon_F - \hbar\omega - \varepsilon_2 - i\Gamma) \right. \\
& \left. \left. + \ln(\varepsilon_F - \varepsilon_1 - i\Gamma) - \ln(\varepsilon_F + \hbar\omega - \varepsilon_1 + i\Gamma) \right] \right]. \quad (2.70)
\end{aligned}$$

となり、 \mathcal{F} の具体的な形を得ることができた．あとは、ハミルトニアンから速度の行列成分 v_{ij} を計算することで、式 (2.57)、(2.62)¹⁰、(2.70) から、電気伝導度の値を計算することができる.¹¹

2.2 磁場中自由電子

磁場中の電子は磁場と速度に垂直な方向にローレンツ力を受け、サイクロトロン運動を行う．この古典的な解釈により、磁場中電子の運動を直感的に理解することが可能である．一方、この古典的な解釈では、ド・ハース-ファン・アルフェン振動 (dHvA) やシュブニコフ-ド・ハース振動 (SdH) など、磁場による振動現象を説明することはできない．これらの現象を理解するためには、磁場中電子状態の量子論的な理解が必要になる．この節では自由電子を例に磁場中電子の一般的な性質について触れる．本節を書くにあたり、[34,35] を参考にした．

¹⁰式 (2.70) を用いて、式 (2.62) を書き直すと次のようになる

$$\mathcal{Q}_{\mu\nu}(\omega) = -e^2 \sum_{i,j} \langle i | v_\mu | j \rangle \langle i | v_\nu | j \rangle \mathcal{F}(\omega, \varepsilon_i, \varepsilon_j)$$

$|i\rangle, |j\rangle$ はエネルギー $\varepsilon_i, \varepsilon_j$ の固有状態、 v_μ は速度演算子、 \mathcal{F} は式 (2.70) である．

¹¹実際に伝導度を数値計算する場合、式 (2.57) は次のように若干の修正を加える必要がある、

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = -\frac{1}{i\omega} [\mathcal{Q}_{\mu\nu}(\omega + i\delta) - \mathcal{Q}_{\mu\nu}(-i\delta)].$$

微小な虚数項 $i\delta$ を付加することで、式 (2.69) の係数部分 ($1/(\hbar\omega + \varepsilon_2 - \varepsilon_1)$) の発散を抑えられるからである．

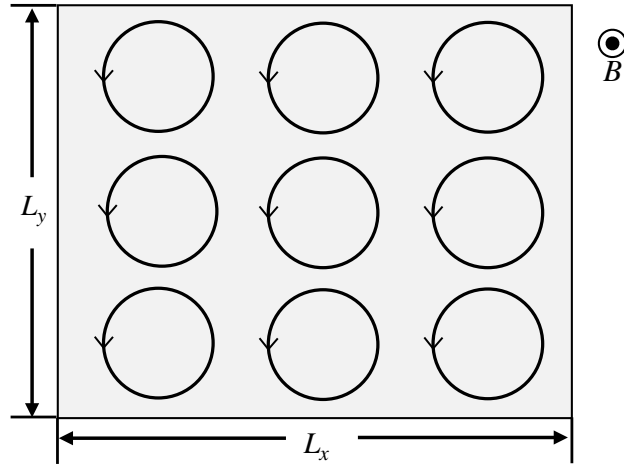


図 2.3: サイクロトロン運動

2.2.1 軌道運動と電子状態

磁場中電子の古典的な運動

大きさが $L_x \times L_y$ の平面内を運動する電子の運動方程式を考える．磁場 \mathbf{B} の向きが z 軸方向であるとする，電子の運動方程式は次式で表される．

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -e \mathbf{v} \times \mathbf{B}. \quad (2.71)$$

m は電子の質量， \mathbf{r} は電子の座標， t は時刻， e は素電荷 ($e > 0$)， \mathbf{v} は速度， \mathbf{B} は磁場を表す．この運動方程式の解は，次のように得られる

$$x_t = x_0 + x_c \quad (2.72)$$

$$y_t = y_0 + y_c \quad (2.73)$$

$$x_c = \frac{v_y}{\omega_c} \quad (2.74)$$

$$y_c = -\frac{v_x}{\omega_c} \quad (2.75)$$

$$v_x = v_0 \cos \omega_c t \quad (2.76)$$

$$v_y = v_0 \sin \omega_c t. \quad (2.77)$$

(x_c, y_c) は位置 (x_0, y_0) からの相対位置を表す．上式から磁場中の電子は，位置 (x_0, y_0) を中心に半径 v_0/ω_c ，角振動数 $\omega_c = eB/m$ でサイクロトロン運動することが分かる (図 2.3)．

量子力学的に磁場中電子を議論する準備として、磁場中電子のハミルトニアンを導出する。話を簡単にするために、電子に働く力はローレンツ力（式 (2.71) 右辺）のみとする。式 (2.71) の成分毎の式は $md^2x/dt^2 = eBv_y$, $md^2y/dt^2 = -eBv_x$ と表されるので、これを満たすラグランジアン L は次式で表される

$$L = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2) + \frac{eB}{2}(xv_y - yv_x). \quad (2.78)$$

磁場 \mathbf{B} はベクトルポテンシャル \mathbf{A} を用いて $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ と表すことができるから、 $\mathbf{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$ とおくと、上式は

$$L = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2) + e(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) \quad (2.79)$$

と変形できる。一般化運動量 p_i は

$$\frac{\partial L}{\partial v_i} = mv_i + eA_i \quad (2.80)$$

と表されるので、式 (2.79), (2.80) と、ハミルトニアン H の定義 ($H = \sum_i p_i v_i - L$) から、

$$H = \frac{1}{2m}(p_x - eA_x)^2 + \frac{1}{2m}(p_y - eA_y)^2 \quad (2.81)$$

が得られる¹²。

電子のスピン分裂を無視すれば、式 (2.81) 中の一般化運動 p_i を運動演算子に変換することで、量子力学的な磁場中自由電子のハミルトニアンを得ることができる¹³。本学位論文で計算している磁気抵抗や de Haas-van Alphen 効果の基本的な性質を理解するのに、スピンは重要ではない¹⁴。量子力学的に磁場中電子を議論する準備ができたので、磁場中自由電子ガスの量子力学的な性質について見ていく。¹⁵

ランダウ量子化

平面内を運動するスピン縮退した磁場中自由電子のハミルトニアン \mathcal{H} は、式 (2.81) から、

$$\mathcal{H} = \frac{(p_x - eA_x)^2}{2m} + \frac{(p_y - eA_y)^2}{2m}. \quad (2.82)$$

と表される¹⁶。

¹² 古典的な磁場中電子のハミルトニアンの導出は、参考文献 [36] など解析力学の一般的な教科書に詳しく記述されているので、そちらも参考にすると良い。

¹³ スピンは完全に量子力学的な効果であるから、古典的な荷電粒子の運動からハミルトニアンを導出して、スピンの効果は現れない。

¹⁴ 基本的な性質を理解するのにスピンが重要ではないだけで、実験データの解析ではスピンを無視できない。

¹⁵ 量子論に基づいて磁場中自由電子ガスの理論を最初に提案したのは、Landau である [37]。

¹⁶ 式 (2.81) と式 (2.82) は全く同じ式に見えるが、式 (2.82) の p_x, p_y は演算子である。

ベクトルポテンシャル \mathbf{A} には任意性がある．ここでは，例としてランダウゲージ $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ を考える．このとき，ハミルトニアン（式 (2.82)）は x 依存性を持たないことから $p_x = \hbar k_x$ とおきかえが可能なので，式 (2.82) は

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \frac{(\hbar k_x - eBy)^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} \\ &= \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2 (y - l_B^2 k_x)^2\end{aligned}\quad (2.83)$$

となる．上式は， $(x_0, y_0) = (0, l_B^2 k_x)$ を中心に，サイクロトロン振動数 ω_c で y 方向に振動する調和振動子と同じハミルトニアンである．式 (2.83) から磁場中自由電子の固有値はすぐに，

$$\varepsilon_l = \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2}\right) \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.84)$$

と離散化された値をとることがわかる．このように磁場で電子のエネルギーが離散化されることをランダウ量子化，離散化されたエネルギー準位をランダウ準位と呼ぶ．自由電子においてランダウ準位間のエネルギー幅 $\hbar\omega_c$ は，ボーア磁子 $\mu_B = \hbar e/2m$ を用いて， $\hbar\omega_c = 2\mu_B B$ と表される．

式 (2.83) は， $p_x = \hbar k_x$ と置き換えができることから，固有関数に $e^{ik_x x}$ を含むことがわかる．また， y 方向は調和振動子と同じふるまいをすることから，式 (2.83) の固有関数 ψ_{l,k_x} は次式で表される，

$$\psi_{l,k_x} = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} H_l(y - y_0). \quad (2.85)$$

H_l はエルミート関数である．

ランダウ準位（式 (2.84)）は k_x, k_y を含まない．よって，各ランダウ準位は縮重していることがわかる（図 2.4）．図 2.4 からわかるように，ランダウ準位 ε_l の縮重度 $N_L(B)$ は $B = 0$ における連続したバンド $\varepsilon(B = 0) = (p_x^2 + p_y^2)/2m$ の $2\mu_B l$ から $2\mu_B(l + 1)$ にある状態密度に等しい．つまり，

$$N_L(B) = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \int_{2\mu_B B l \leq \varepsilon(B=0) < 2\mu_B(l+1)} dk_x dk_y \quad (2.86)$$

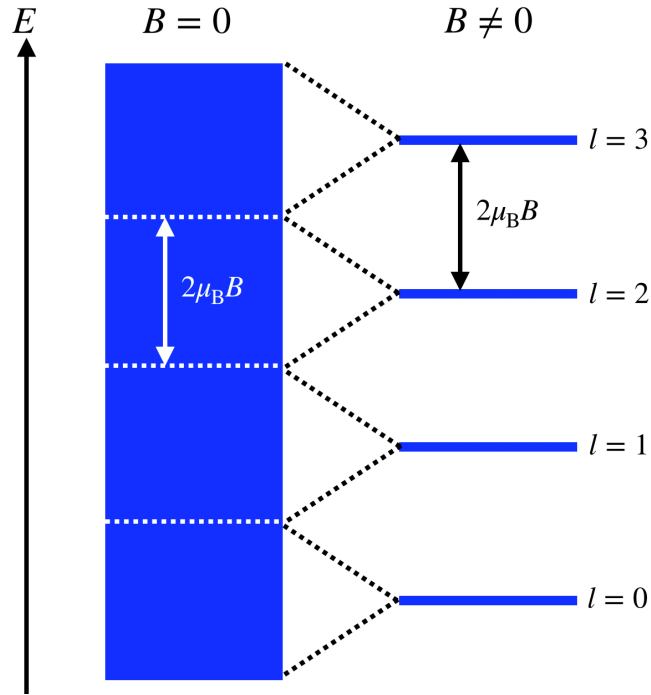


図 2.4: ゼロ磁場と有限磁場におけるエネルギーの関係

を計算すれば良い． $k_l = \sqrt{4m\mu_B l / \hbar^2}$ とすると， $\mu_B = \hbar e / 2m$ から式 (2.86) は，

$$\begin{aligned}
 N_L(B) &= \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \int_{k_l}^{k_{l+1}} k dk d\phi \\
 &= \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \frac{1}{2} (k_{l+1}^2 - k_l^2) \times 2\pi \\
 &= \frac{L_x L_y}{2\pi} \frac{2m\mu_B B}{\hbar^2} \\
 &= \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y \\
 &= \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2}
 \end{aligned} \tag{2.87}$$

となる． $N_L(B)$ をランダウ縮重度と呼ぶ． $N_L(B)$ は系の大きさに依存するが ($N_L(B) \propto L_x, L_y$)，以降では特に断らない限り全て単位体積を仮定する ($L_x = L_y = L_z = 1$)．

ここからは三次元の自由電子ガスについて考える．二次元の場合と同様に磁場 \mathbf{B} は z 軸に平行な場合を仮定すると，磁場に対して平行な運動はゼロ磁場の場合と同じになる．このとき，ベクトルポテンシャルを $\mathbf{A} = (A_x, A_y, 0)$ とおくと，三次元自由電子ガスのハミ

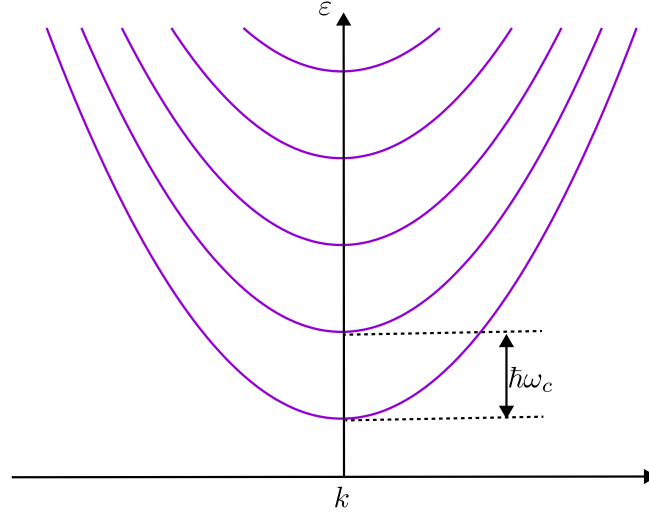


図 2.5: 三次元自由電子のランダウ準位：準位間のギャップ $\varepsilon_{l+1,k_z} - \varepsilon_{l,k_z}$ と縮重度 N_L は $\hbar\omega_c$ に依存する

ルトニアンとランダウ準位は次式で表される,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(p_x + eA_x)^2 + \frac{1}{2m}(p_y + eA_y)^2 + \frac{1}{2m}p_z^2 \quad (2.88)$$

$$\varepsilon_{l,k_z} = \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2m}\hbar^2 k_z^2. \quad (2.89)$$

式 (2.89) から分かるように, ランダウ準位毎に 1 次元的なふるまいを示す (図 2.5). また, ランダウ準位毎の状態密度 $D_l(\varepsilon, B)$ は, 一次元系と同様の形をする. スピン縮重度を考慮すると, $D_l(\varepsilon, B)$ は次式で表される

$$\begin{aligned} D_l(\varepsilon, B) &= \frac{1}{\pi} N_L(B) \int_{\text{B.Z.}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{lk_z}) dk_z \\ &= \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} N_L \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2} \right)}}. \end{aligned} \quad (2.90)$$

ランダウ準位について状態密度の和を取ることで, 系全体の状態密度 $D(\varepsilon, B)$ を得る,

$$D(\varepsilon, B) = \sum_l \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} N_L \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2} \right)}} \Theta \left(\varepsilon - \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2} \right) \right) \quad (2.91)$$

$$\Theta(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & (\varepsilon \geq 0) \\ 0 & (\varepsilon < 0) \end{cases} \quad (2.92)$$

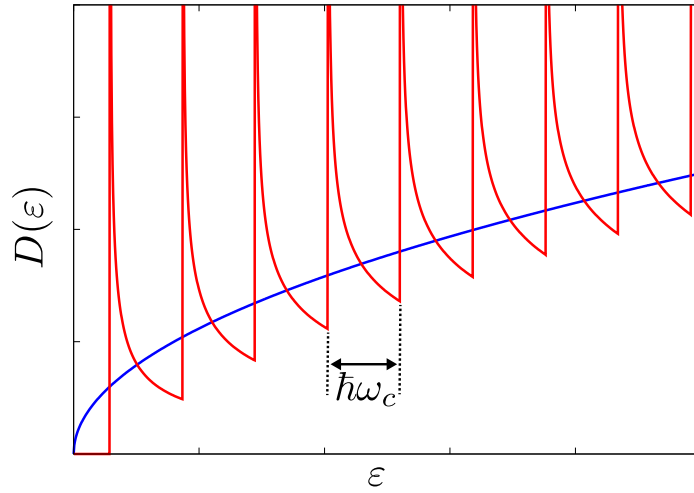


図 2.6: 三次元自由電子の状態密度：(赤) 有限磁場 $B \neq 0$ (青) ゼロ磁場 $B = 0$ ．有限磁場の状態密度に関し，ピークを無視するとゼロ磁場の状態密度と同じように増加することが分かる

式中の $\Theta(\epsilon)$ は階段関数である．磁場中の三次元自由電子ガスの状態密度は，各ランダウ準位の下端で強いピークを持ち（図 2.6），状態密度のピークはエネルギーに対して $\hbar\omega_c$ の周期的に現れる．周期 $\hbar\omega_c \propto B$ であることから，ピークの周期は磁場の一次に比例する（ $\propto B$ ）．

任意の系の磁場中キャリア密度 n を導く．キャリア密度 n は任意の状態密度 $D(\epsilon)$ とフェルミ-ディラック分布関数 $f_F(\epsilon)$ を用いて次のように表される．

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) f_F(\epsilon) \quad (2.93)$$

式 (2.90) の一行目と \sum_l から、磁場中電子のキャリア密度 $n(B)$ を計算すると

$$\begin{aligned}
 n(B) &= \sum_l \frac{1}{\pi} N_L(B) \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f_F(\varepsilon) \int_{\text{B.Z.}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{lk_z}) dk_z \\
 &= \sum_l \frac{eB}{2\pi^2\hbar} \int_{\varepsilon_l(k_z=0)}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \int_{\text{B.Z.}} dk_z \frac{2\delta(k_z - k_0)}{\left| \left(\frac{\partial \varepsilon_{lk_z}}{\partial k_z} \right)_{k_z=k_0} \right|} \\
 &= \frac{eB}{\pi^2\hbar} \sum_l \int_{\varepsilon_l(k_z=0)}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \frac{1}{\left| \left(\frac{\partial \varepsilon_{lk_z}}{\partial k_z} \right)_{k_z=k_0} \right|} \\
 &= \frac{eB}{\pi^2\hbar} \sum_l \int_0^{k_{Fl}} dk_z \\
 &= \frac{eB}{\pi^2\hbar} \sum_l k_{Fl}
 \end{aligned} \tag{2.94}$$

となる． k_{Fl} は各ランダウ準位のフェルミ波数を表す．磁場中電子のキャリア密度は、ランダウ準位毎のフェルミ波数の和に比例することが分かる ($n \propto \sum_l k_{Fl}$)．

これまではスピン磁気モーメントと磁場の相互作用については無視してきた．この相互作用を考慮すると磁場中自由電子のハミルトニアンとエネルギー準位は次のように表される．

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(p_x + eA_x)^2 + \frac{1}{2m}(p_y + eA_y)^2 + \frac{1}{2m}p_z^2 - g\mu_B \mathbf{s} \cdot \mathbf{B} \tag{2.95}$$

$$\varepsilon_{l,k_z,\sigma} = \left(l + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \sigma \frac{1}{4} g\beta_0 B \tag{2.96}$$

$$\beta_0 = 2\mu_B \tag{2.97}$$

\mathbf{s} はスピン演算子， g は g 因子（自由電子では， $g = 2$ である）， σ はスピンの符号 ($\sigma = \pm 1$)， μ_B はボーア磁子を表す．スピン縮退をしていたランダウ準位は幅 $g\beta_0 B/2$ で分裂することが分かる．この分裂をゼーマン分裂と呼ぶ．ゼーマン分裂は伝導電子の常磁性や、次節で紹介する量子振動に影響を与える．

2.2.2 量子振動

金属や半金属で電気抵抗や磁化の磁場依存性を測定すると、磁場に依存して値が振動する．この振動現象を量子振動と呼ぶ．磁場中電子の状態密度は図 2.6 で示したように、エネルギー間隔 $\hbar\omega_c$ 毎に大きなピークを持つ．磁場が変化すると、ランダウ準位間のギャップが大きくなり、バンド端とフェルミエネルギーが交差する．このとき、フェルミエネルギーでの状態密度がピークを持つので、抵抗や磁化で極大値や極小値が生じる．この現象はランダウ準位とフェルミエネルギーの大小関係が変化するたびに生じ、振動として観

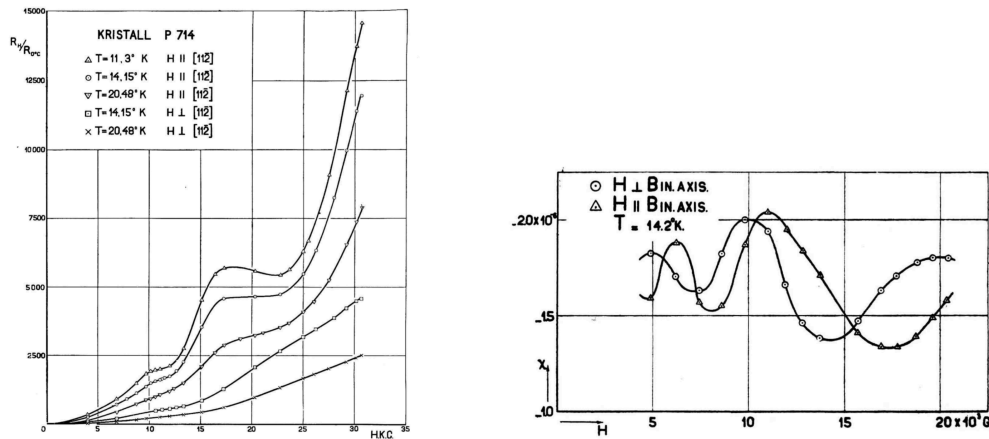


図 2.7: 量子振動の発見 : (左) SdH 効果 [38] (右) dHvA 効果 [39]

測される (図 2.7). 量子振動は, 電気抵抗や磁化においてシュブニコフド・ハース効果 (Shubnikov-de Haas effect, SdH) [38] や, ド・ハースーアルフェン効果 (de Haas-van Alphen effect, dHvA) [39] と呼ばれる. 量子振動は抵抗や磁化以外の物理量でも観測される (図 2.8).

2.2.3 量子極限

印加磁場を大きくするとランダウ分裂幅 $\hbar\omega_c$ やゼーマン分裂幅 $g\beta_0 B/2$ が増大し, フェルミエネルギーにかかるランダウ準位の数が増加する. 磁場を大きくし続けると量子極限と呼ばれる, すべてのキャリア電子 (正孔) が最低ランダウ準位の上に閉じ込められる状態に到達する (図 2.9). 三次元系のフェルミエネルギーは弱磁場で磁場に依存しないが, 量子極限に近づくと, フェルミエネルギーが磁場に依存するようになる (図 2.10). 弱磁場ではランダウギャップの幅が狭く, 多くのランダウ準位がフェルミエネルギーにかかる. また, ランダウ縮重度も小さいことから, 準位一つあたりの影響は非常に小さい. 磁場の増加によってフェルミエネルギーにかかる準位の数が増加しても, フェルミエネルギーに与える影響は小さい. 一方, 量子極限近傍ではランダウ縮重度が大きくなり, フェルミエネルギーにかかるランダウ準位も数個しか存在しないことから, 準位一つあたりの影響が大きくなる. その結果, 各ランダウ準位の磁場依存性がフェルミエネルギーに強く影響を与えるようになる.

50T の磁場中自由電子のランダウ分裂やゼーマン分裂幅は数 meV 以下 ($\hbar\omega_c \sim 5\text{meV}$) である. これは, 一般的な金属のフェルミエネルギーが数 eV ($\epsilon_F^{\text{Na}} = 3.23\text{ eV}$, $\epsilon_F^{\text{Cu}} = 7.00\text{ eV}$) であるのに対し, 非常に小さい [43]. 一般的な三次元系金属では量子極限に到達するのに数百テスラ以上の磁場が必要である. しかし, 半金属や狭ギャップ半導体などは, ランダウギャップとゼーマン分裂幅が大きく, フェルミエネルギーが数 meV から数十 meV

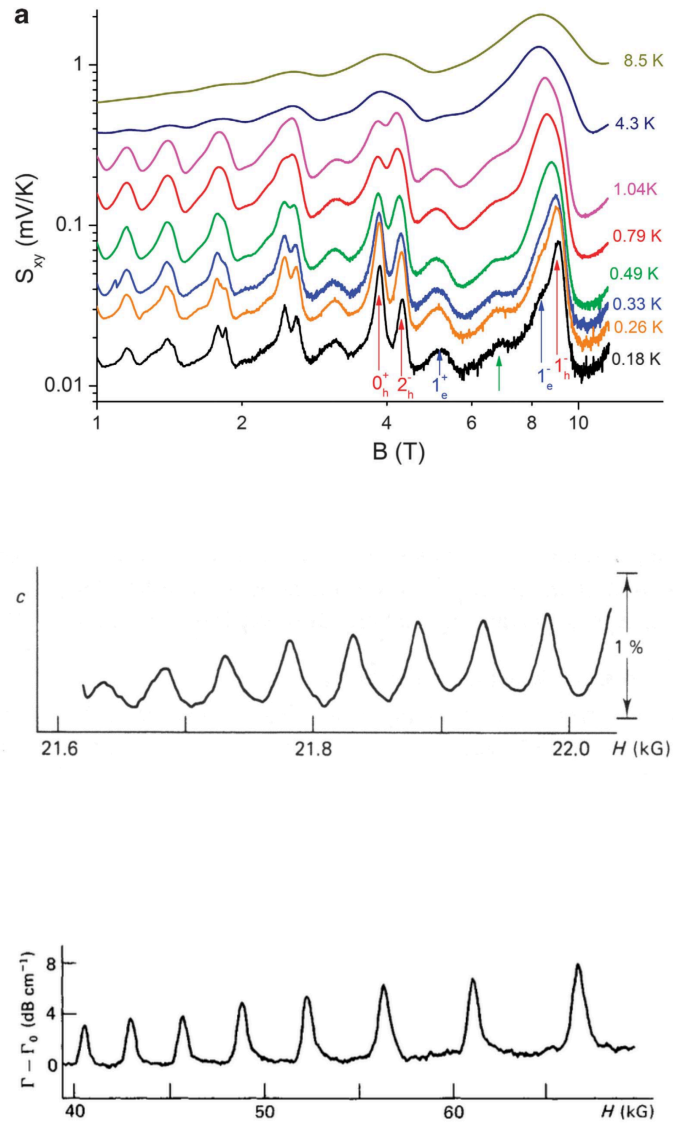


図 2.8: 様々な量子振動 : (上) Bi のネルンスト係数 [40] (中) Be の比熱 [41] (下) Hg の超音波吸収 [42]

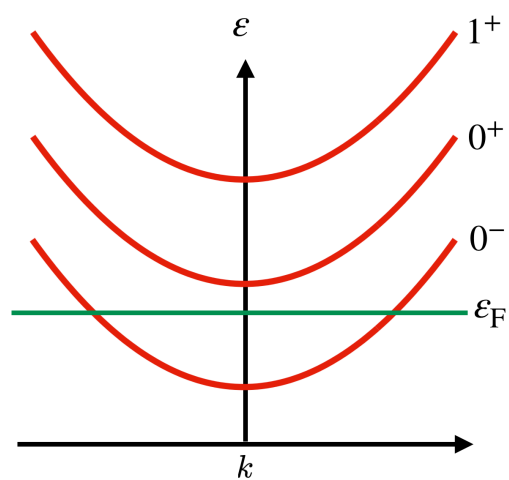


図 2.9: 量子極限概念図 : n^\pm はランダウ準位である.

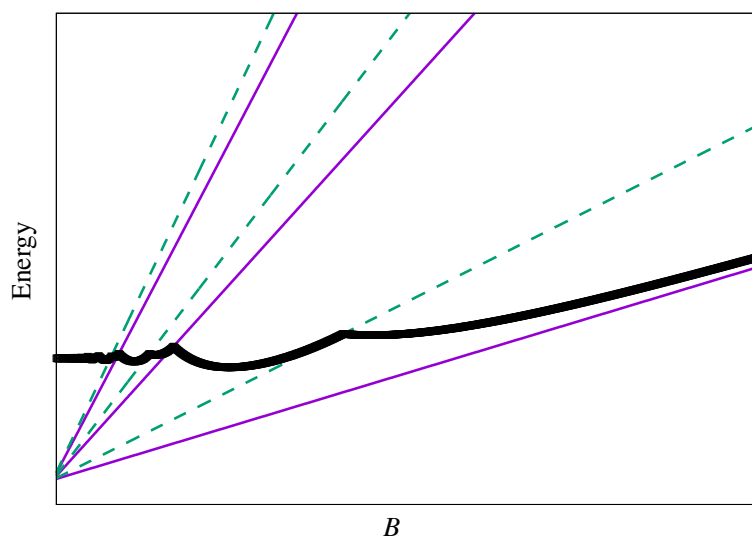


図 2.10: 磁場中三次元自由電子のエネルギー磁場依存性 : (細線) $\sigma = -1$ (破線) $\sigma = +1$ (太線) フェルミエネルギー.

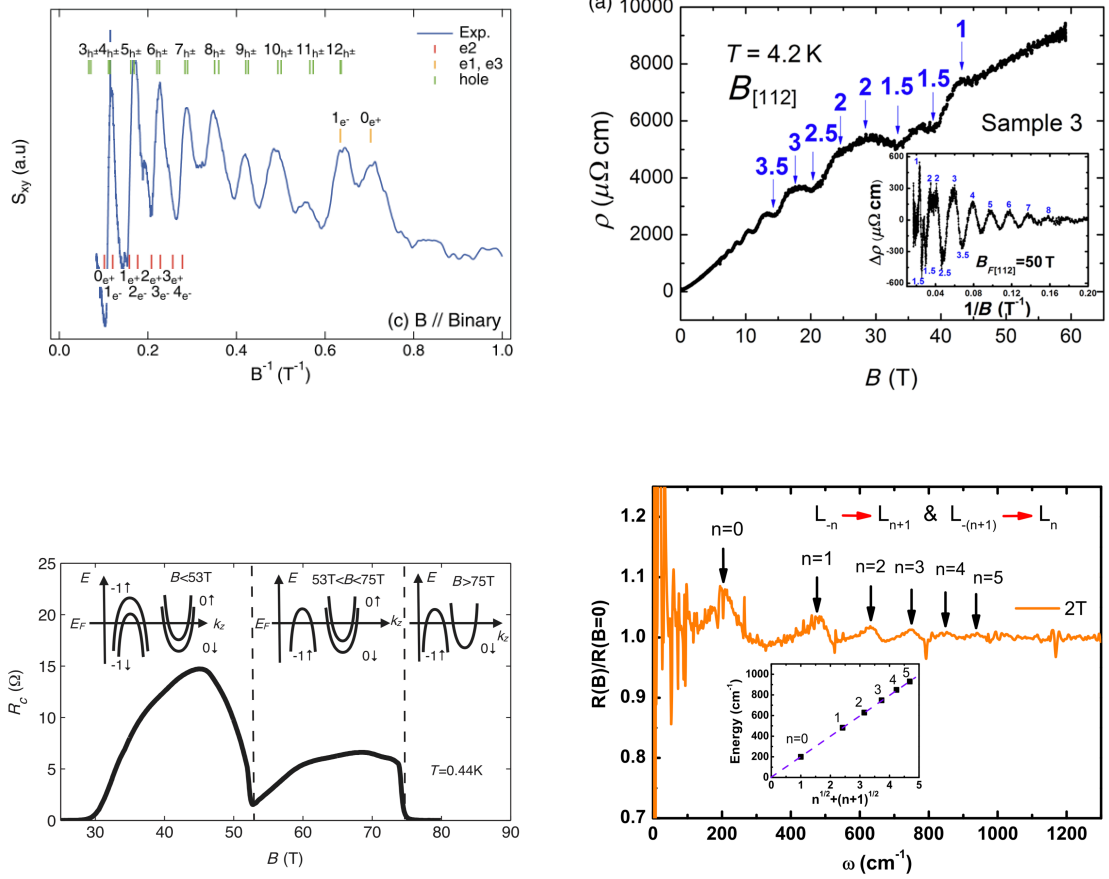


図 2.11: 量子極限領域における測定：(左上) Bi のネルンスト係数 [14] (右上) Cd_3As_2 の磁気抵抗 [49] (左下) グラファイトの磁気抵抗 [45] (右下) ZrTe_5 の磁気赤外分光法 [48]

程度と小さい。よって、半金属や狭ギャップ半導体では、数テスラ程度の磁場が物性に大きな影響を与える。代表的な半金属の一つであるビスマスは、わずか 1.5 テスラの磁場で量子極限状態になる [14, 44–48]。図 2.11 は、量子極限状態の測定が行われた実験結果である。

2.3 ディラック電子と半金属

1928 年 P. A. M. Dirac は真空中の相対論的な電子に関する理論を発表した [50]。この相対論的な電子をディラック電子と呼ぶ。このディラック電子と同じ特徴を持った電子が結晶中にも存在する。真空中のディラック電子と区別するために、これらの電子を“固体中”ディラック電子と呼ぶ。初めて固体中ディラック電子であると同定されたのは、ビスマスの L 点電子である [51, 52]。現在はグラフェンや $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{I}_3$, A_3Bi (A は K,

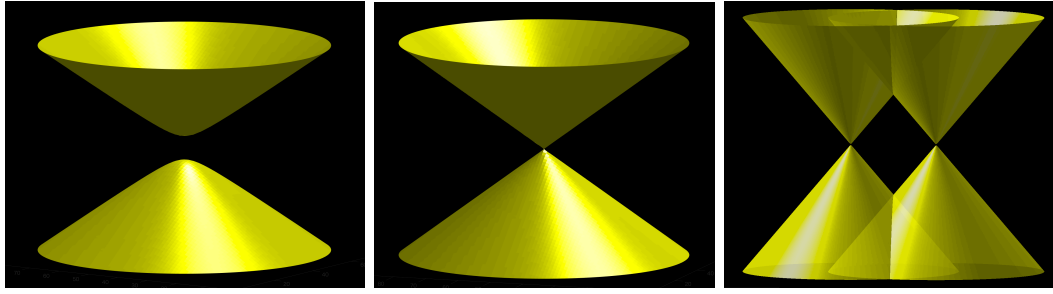


図 2.12: ディラック電子のエネルギー (左) 質量を持ったディラック電子 (massive Dirac) (中) 質量を持たないディラック電子 (massless Dirac, gapless Dirac) (右) ワイル電子.

Na, Rb) も固体中ディラック電子を持つことが知られている [2, 53, 54]. また近年では, 真空中ディラック電子の質量がゼロの場合のワイルフェルミオンと同じようにふるまう固体中の電子 (ワイル電子)¹⁷ も盛んに研究されている [55–59]. この節の前半では固体中ディラック電子について紹介し, 後半では本研究で磁気抵抗を計算した V 族半金属について紹介する. 以降では, 単に “ディラック電子” と記述されている場合, “固体中ディラック電子” のことを指す.

2.3.1 様々なディラック電子

“ディラック電子” と言っても, 質量が有限な値を持つディラック電子 (massive Dirac, 図 2.12(左)) と質量ゼロのディラック電子 (massless Dirac, 図 2.12(中)) がある. 質量ゼロのディラック電子の中には, ワイル電子 (図 2.12(右)) と呼ばれるものもあり, その物性が盛んに研究されている. 各ディラック電子はそれぞれ異なるモデルで表されるが, いずれもエネルギー分散が波数の一次に比例するという共通点を持つ ($\epsilon \propto k^1$).

どのようにディラック電子が存在するのかは物質毎に異なる. 例えば, ビスマスのディラック電子はスピン軌道結合が重要な役割を果たしている¹⁸ [14, 51]. ビスマスや PbTe のようにスピン軌道結合の強い物質がディラック電子を持つ [2, 63, 64] ことから, ディラック電子とスピン軌道結合の強さは密接な関係にあるように思えるが, グラファイト (C) のようにスピン軌道結合の小さな物質¹⁹ もディラック電子を持つ [66]. このことから, スピン軌道結合とディラック電子の有無は必ずしも関係があるわけではない [66]. 最近の研究で, 3次元系の質量ゼロのディラック電子 (図 2.12(中)) について新たに報告があり, 時

¹⁷ディラック方程式 [50]

$$\mathcal{H}\psi = (c\hat{\alpha} \cdot \mathbf{p} - c^2\hat{\beta}m)$$

に対して, $m = 0$ の場合をワイル方程式と呼ぶ.

¹⁸ここでいう, スピン軌道結合は, 孤立原子のスピン軌道結合に当たる. スピン軌道結合・スピン軌道相互作用について詳しく勉強したい場合は, 固体物理学の連載記事 “スピン軌道相互作用と結晶中の電子状態” [60–62] を参考にとすると良い.

¹⁹ビスマスのスピン軌道結合は 1.8eV, グラファイトは 0.005eV である [65].

間反転対称性と空間反転対称性、結晶対称性（回転対称性など）を持つブリルアンゾーン上の点に、有効質量ゼロのディラック電子が安定な状態で存在できることが明らかとなった [2, 67–69]。また、時間反転対称性と空間反転対称性のどちらかが破れると、有効質量ゼロのディラック電子はワイル電子になる（図 2.12(右)）。

本研究では、量子極限におけるビスマスの磁気抵抗を明らかにするという点から、ビスマスの有効模型である Wolff 模型を用いて、ディラック電子の磁気抵抗を議論する。Wolff 模型は図 2.12(左) で示す、質量を持ったディラック電子の有効模型である。次節では Wolff 模型について、簡単に紹介する。

2.3.2 Wolff 模型

ビスマスはスピン軌道結合が大きいことから、Cohen–Blount はビスマスの L 点電子に対するスピン軌道結合を考慮した 2 バンド模型を構築した [70]。その後、Wolff が Cohen–Blount の模型のハミルトニアンを Dirac の理論手法 [50] を用いて表現し、Cohen–Blount の 2 バンド模型が本質的にディラック電子と等価であることを示した [51]。

Cohen–Blount の模型は一粒子の結晶ハミルトニアン

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V + \frac{1}{8m^2} \nabla^2 V + \frac{\hbar}{4m^2} [\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V] \quad (2.98)$$

に対して、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論を用いることで導出することができる（ V は結晶ポテンシャル、 $\boldsymbol{\sigma}$ はパウリのスピン行列を表す）[51, 52, 70]。式 (2.98) の固有関数はブロッホ波動関数 $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ の線型結合で表される。 $u_{n\mathbf{k}}$ は任意の波数に対して完全系をなすスピンの依存する周期関数である。今、バンドの極値をとる波数 \mathbf{k}_0 に対して、次の関数を考える

$$\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}_0} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (2.99)$$

ただし、 \mathbf{k} は波数 \mathbf{k}_0 を基準にした波数である。 $\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ も完全系をなすことから、

$$\langle \chi_{n'\mathbf{k}'} | \chi_{n\mathbf{k}} \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{n'n} \quad (2.100)$$

をとる。周期関数 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ を用いて、

$$u_{n\mathbf{k}} = \sum_{n'} b_{nn'}(\mathbf{k}) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.101)$$

と表現できる。式 (2.98) の固有関数 $\Psi(\mathbf{r})$ は、

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n \int d\mathbf{k} \psi_n(\mathbf{k}) \chi_{n\mathbf{k}} \quad (2.102)$$

と表される。ただし、上式は

$$\sum_{n'} \int d\mathbf{k}' \langle \chi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H} | \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle \psi_{n'}(\mathbf{k}') = \varepsilon \psi_n(\mathbf{k}) \quad (2.103)$$

を満たす。式 (2.98), (2.99), (2.100) から、ハミルトニアン²⁰の行列成分 $\langle \chi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H} | \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle$ は

$$\begin{aligned} \langle \chi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H} | \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle &= \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \left(\varepsilon_{n'\mathbf{k}_0} + \frac{1}{m} \hbar \mathbf{k}' \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \right) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}' - \mathbf{k}} \\ &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \left[\delta_{nn'} \left(\varepsilon_{n\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) + \frac{1}{m} \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'} \right] \end{aligned} \quad (2.104)$$

$$\mathbf{p}_{nn'} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \left[\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m^2} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V \right] u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.105)$$

となる。 Ω は単位胞の体積である。式 (2.104) より、式 (2.103) は

$$\sum_{n'} \left[\delta_{nn'} \left(\varepsilon_{n\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) + \frac{1}{m} \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'} \right] \psi_{n'}(\mathbf{k}) = \varepsilon \psi_n(\mathbf{k}) \quad (2.106)$$

となる。パリティの対称性と \mathbf{k}_0 がバンドの極値をとる波数であることから、速度演算子 $v_{nn}(=\mathbf{p}_{nn}/m=0)$ は、 $v_{nn}=0$ を満たす。

Cohen–Blount は式 (2.106) をビスマスの L 点の電子に対して用いた。L 点のバンド端近傍において、 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ が十分小さいと仮定し、伝導バンドと価電子バンドについてスピンを考慮した基底 $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ を用いると²⁰、式 (2.106) は、

$$\begin{pmatrix} \Delta & 0 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t} & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} \\ 0 & \Delta & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}^* \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}^* & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} & -\Delta & 0 \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t} & 0 & -\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (2.107)$$

となる。ただし、 $\varepsilon_{1\mathbf{k}_0} = \varepsilon_{1\mathbf{k}_0} = \Delta$, $\varepsilon_{3\mathbf{k}_0} = \varepsilon_{4\mathbf{k}_0} = -\Delta$ とし (2Δ はバンドギャップを表す), $v_{12,21} = v_{34,43} = 0$ を用いた²¹。また、 \mathbf{t}, \mathbf{u} は次式で表される速度の行列表示である²²

$$\mathbf{t} = \langle 1 | \mathbf{v} | 3 \rangle = \langle 4 | \mathbf{v} | 2 \rangle \quad (2.108)$$

$$\mathbf{u} = \langle 1 | \mathbf{v} | 4 \rangle = -\langle 3 | \mathbf{v} | 2 \rangle. \quad (2.109)$$

式 (2.107) はスピン軌道結合がない場合も含むが²³、以降はスピン軌道結合が大きい場合 ($|\mathbf{u}| \simeq |\mathbf{t}|$) のみを考える。

2 バンドモデルを指定するには4つのベクトル $\text{Re}(\mathbf{t}), \text{Im}(\mathbf{t}), \text{Re}(\mathbf{u}), \text{Im}(\mathbf{u})$ が必要である。ただし、適当に基底を選ぶことでベクトルの数を減らすことができる。Wolff は $\text{Re}(\mathbf{t}) = 0$

²⁰ ψ_1, ψ_2 が伝導バンドの基底 (ψ^c), ψ_3, ψ_4 が価電子バンドの基底 (ψ^v) を表す。各バンドの基底のスピンは互いに異なる ($\psi_1 = \psi_+^c, \psi_2 = \psi_-^c, \psi_3 = \psi_+^v, \psi_4 = \psi_-^v$)。

²¹ 時間反転演算子 K と空間反転演算子 J で作られる演算子 $C = JK$ について、 $\mathcal{A}^C = C\mathcal{A}C^{-1} = \mathcal{A}^\dagger$ を満たすような演算子 \mathcal{A} では、 $\langle \psi_{n\mathbf{k}-} | \mathcal{A} | \psi_{n\mathbf{k}+} \rangle = 0$ となる [65]。

²² 演算子 C は $C\psi_{n\mathbf{k}+} = \psi_{n\mathbf{k}-}$, $\langle \psi | \phi \rangle = \langle C\phi | C\psi \rangle$, $C^2\psi = -\psi$ を用いると、 $\mathbf{t} = \langle \psi_+^c | \mathbf{v} | \psi_+^v \rangle = \langle \psi_-^v | \mathbf{v} | \psi_-^c \rangle$ を得ることができる。

²³ $\text{Re}(\mathbf{t}) \neq 0$, $\text{Im}(\mathbf{t})=0, \mathbf{u}=0$ のときのみ、スピン軌道結合がない。

となるように基底を選び、式 (2.107) を

$$\mathcal{H} = \Delta\gamma_4 + i\hbar\mathbf{k} \cdot \left[\sum_{i=1}^3 \mathbf{W}(i)\gamma_4\gamma_i \right] \quad (2.110)$$

$$\mathbf{W}(1) = \text{Im}(\mathbf{u}) \quad (2.111)$$

$$\mathbf{W}(2) = \text{Re}(\mathbf{u}) \quad (2.112)$$

$$\mathbf{W}(3) = \text{Im}(\mathbf{t}) \quad (2.113)$$

と表した [51, 52]. γ_i は次式で表される 4×4 のディラック行列である

$$\gamma_{i=1,2,3} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.114)$$

$$\gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}. \quad (2.115)$$

σ_i はパウリのスピン行列を表す.

ここで、等方的な速度

$$\mathbf{W}(1) = (v_0, 0, 0) \quad (2.116)$$

$$\mathbf{W}(2) = (0, v_0, 0) \quad (2.117)$$

$$\mathbf{W}(3) = (0, 0, v_0) \quad (2.118)$$

とスピン行列 $\boldsymbol{\sigma}$ を用いて、式 (2.110) を行列表示すると次式が得られる

$$\mathcal{H}_{\text{iso}} = \begin{pmatrix} \Delta & iv_0\hbar\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -iv_0\hbar\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{pmatrix}. \quad (2.119)$$

上式はディラックハミルトニアン [50],

$$\mathcal{H}_{\text{Dirac}} = \begin{pmatrix} mc^2 & c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -mc^2 \end{pmatrix} \quad (2.120)$$

と本質的に等価である.

永年方程式 $|\mathcal{H} - \varepsilon| = 0$ を解くと、式 (2.110) のエネルギーバンド

$$\varepsilon = \pm \sqrt{\Delta^2 + \Delta\hbar^2\mathbf{k} \cdot \hat{\alpha} \cdot \mathbf{k}} \quad (2.121)$$

を得ることができる. $\hat{\alpha}$ は逆有効質量テンソル ($\hat{\alpha} = (\hat{m}^*)^{-1}$) を表し、 $\mathbf{W}(i)$ を用いて次式で表される.

$$\alpha_{\mu\nu} = \frac{1}{\Delta} \left[\sum_i W_\mu(i) W_\nu(i) \right] \quad (2.122)$$

式 (2.121) からわかるようにディラック電子のバンドは線形分散である ($\varepsilon \propto k^1$).

式 (2.121) はバンド端近傍 ($k \sim 0$) において $\Delta^2 \gg \Delta \hbar^2 \mathbf{k} \cdot \hat{\alpha} \cdot \mathbf{k}$ より,

$$\varepsilon \simeq \Delta + \frac{\hbar^2}{2} \mathbf{k} \cdot \hat{\alpha} \cdot \mathbf{k}. \quad (2.123)$$

と近似できる (非相対論近似). 後で, ディラック電子に対するボルツマン方程式に従った磁気抵抗を再導出するにあたり, 式 (2.121) が重要な式となる.

上述のように Wolff 模型について説明してきたが, Wolff 模型 (式 (2.110)) とその固有値 (式 (2.121)) の導出では, スピン軌道結合が大きい ($|\mathbf{u}| \simeq |\mathbf{t}|$) という仮定を除き, 一般性を保ったまま理論を展開している. このことから, Wolff 模型は以下の 1.-4. を満たす系であれば適応可能な, 模型と言える.

1. 時間反転対称性とパリティ対称性を持つ.
2. 伝導バンドと価電子バンドが, 他のバンドから孤立している.
3. バンドギャップが十分小さい²⁴.
4. スピン軌道結合が強い²⁵.

2.3.3 磁場中 Wolff 模型

磁場中では, 運動量演算子 p_i を $\pi_i = p_i - eA_i$ と置き換えることによってハミルトニアンを得ることができる. 磁場中 Wolff 模型のハミルトニアンは次式で表される [51, 52].

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \Delta \gamma_4 + i\boldsymbol{\pi} \cdot \left[\sum_{i=1}^3 \mathbf{W}(i) \gamma_4 \gamma_i \right] \\ &= \begin{pmatrix} \Delta & i\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}} \\ -i\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}} & -\Delta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.124)$$

$$\boldsymbol{\mathcal{L}} = \sum_{i=1}^3 \mathbf{W}(i) \sigma_i \quad (2.125)$$

²⁴ バンドギャップが十分小さいかどうかは, 物質毎に異なる. 例えば, ビスマスのバンドギャップは 15.3 meV に対して, 鉛テルル PbTe のバンドギャップは 190 meV とビスマスの十倍の大きさだが, ビスマスと鉛テルルは両方とも Wolff 模型で記述することができる [63, 64].

²⁵ 最近の研究で, スピン軌道結合の強さを定量的な評価するのに, ゼーマンサイクロトロンエネルギー比 $M_{ZC} = E_z / \hbar \omega_c$ を評価することが提案された [63, 71]. M_{ZC} が大きいほど, スピン軌道結合強いと. ゼロ磁場においてビスマスの電子 (L 点) と鉛テルルの M_{ZC} は, $M_{ZC}(\text{Bi}) = 0.9 - 1.0$ [71], $M_{ZC}(\text{PbTe}) = 0.8$ である.

このハミルトニアン固有値方程式 ($\mathcal{H}\psi = \varepsilon\psi$) は、次式のように変形すると容易に解を求めることができる,

$$\mathcal{H}^2\psi = \begin{pmatrix} \Delta^2 + (\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}})^2 & 0 \\ 0 & \Delta^2 + (\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}})^2 \end{pmatrix} \psi = \varepsilon^2\psi \quad (2.126)$$

$(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}})^2$ を変形すると

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}})^2 &= \sum_{i,j} \{(\pi_i \mathcal{L}_i)(\pi_j \mathcal{L}_j)\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \{\pi_i (\mathcal{L}_i \mathcal{L}_j + \mathcal{L}_j \mathcal{L}_i) \pi_j + \mathcal{L}_i \mathcal{L}_j [\pi_i, \pi_j]\} \\ &= 2\Delta \frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} - 2\Delta \left(\frac{\hbar e \Omega}{2\Delta} \sum_k \sum_i \sigma_i Q_k(i) B_k \right) \end{aligned} \quad (2.127)$$

$$\boldsymbol{Q}(i) = \frac{[\boldsymbol{W}(j) \times \boldsymbol{W}(k)]}{\Omega} \quad (i, j, k : \text{cyclic}) \quad (2.128)$$

と表現できる．ただし、 $\Omega = [W(1) \times W(2)] \cdot W(3)$ である．式 (2.127) を式 (2.126) に代入すると、次式が得られる

$$\mathcal{H}^2\psi = \begin{pmatrix} \Delta^2 + 2\Delta \mathcal{H}^* & 0 \\ 0 & \Delta^2 + 2\Delta \mathcal{H}^* \end{pmatrix} \psi = \varepsilon^2\psi \quad (2.129)$$

$$\mathcal{H}^* = \frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + \boldsymbol{\mu}^* \cdot \boldsymbol{B} \quad (2.130)$$

$$\boldsymbol{\mu}^* = \frac{\hbar e \Omega}{2\Delta} \sum_{\mu} \sigma_{\mu} \boldsymbol{Q}(\mu). \quad (2.131)$$

式 (2.130) は一般的な磁場中電子のハミルトニアンと等しい．第1項はランダウ準位を表しており、異方的な場合の式 (2.88) と等しい．第2項はゼーマン項を表しており、中身を詳しく見てみると、次式が得られる

$$(\boldsymbol{\mu}^* \cdot \boldsymbol{B})^2 = \left(\frac{\hbar e \Omega}{2\Delta} \right)^2 \boldsymbol{B} \cdot \hat{\boldsymbol{A}} \cdot \boldsymbol{B} \quad (2.132)$$

$$A_{ij} = \sum_{\mu} Q_i(\mu) Q_j(\mu) = \frac{\Delta^2}{\Omega^2} \frac{m_{ij}}{|\hat{m}|}. \quad (2.133)$$

また、サイクロトロン有効質量 m_c は、磁場の単位ベクトル \boldsymbol{b} と、有効質量テンソル \hat{m} を用いて

$$m_c^2 = \frac{|\hat{m}|}{\boldsymbol{b} \cdot \hat{m} \cdot \boldsymbol{b}} \quad (2.134)$$

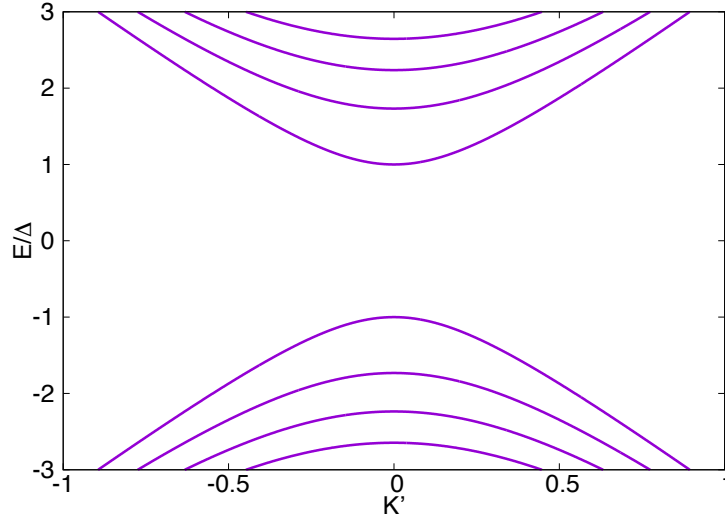


図 2.13: 等方的な磁場中ディラック模型のエネルギー分散. 横軸 K' は無次元化された波数 $K' = \sqrt{\hbar^2 k_{\parallel}^2 / m_{\parallel}} \Delta$ である.

と表すことができるから [72],

$$\mu^* \cdot \mathbf{B} = \pm \frac{\hbar e B}{2} \sqrt{\frac{m_{\parallel}}{|\hat{m}|}} = \pm \frac{1}{2} \hbar \omega_c \quad (2.135)$$

$$m_{\parallel} = \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{b} \quad (2.136)$$

より,

$$\varepsilon_{l,\pm} = \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta \left[\left(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} \right]}. \quad (2.137)$$

が得られる (図 2.13). 自由電子の場合 (式 (2.96)) とは異なり, 上式から二つのランダウ準位 $\varepsilon_{l,+}, \varepsilon_{l+1,-}$ は縮退し ($\varepsilon_{l,+} = \varepsilon_{l+1,-}$), スピン分裂がないことがわかる. 最低ランダウ準位 ε_{0-} は

$$\varepsilon_{0-} = \sqrt{\Delta^2 + \Delta \hbar^2 k_{\parallel}^2 / m_{\parallel}} \quad (2.138)$$

である. 式 (2.138) より, Wolff 模型の最低ランダウ準位は磁場に依存しないことがわかる. また, 図 2.13 からわかるように, ランダウ量子数が大きくなるほどバンド端におけるランダウ準位間の幅は小さくなる. これらの性質は, 自由電子とは大きく異なる点である.

固有関数を $\psi = (\phi_u, \phi_l)^T$ とおくと、式 (2.124) から固有値方程式 $\mathcal{H}\psi = \varepsilon\psi$ は [14, 51]

$$\Delta\phi_u + i(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}})\phi_l = \varepsilon\phi_u \quad (2.139)$$

$$-i(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}})\phi_u - \Delta\phi_l = \varepsilon\phi_l \quad (2.140)$$

上式より、

$$\phi_l = \frac{-i(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}})\phi_u}{\varepsilon + \Delta} \quad (2.141)$$

が得られる．規格化条件 ($|\psi|^2 = 1$) から固有関数 ψ は

$$\psi = \sqrt{\frac{\varepsilon + \Delta}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} \phi_u \\ \frac{-i(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}})\phi_u}{\varepsilon + \Delta} \end{pmatrix} \quad (2.142)$$

となる．式 (2.142) は式 (2.129) を自動的に満たす． ϕ_u は任意性があるが、Wolff は磁場中自由電子の固有関数（式 (2.85)）のような平面波とエルミート多項式の積で表される固有関数を用いた²⁶．

2.3.4 V 族半金属

ビスマス (Bi)，アンチモン (Sb)，ヒ素 (As)，グラファイト (C) などの単結晶の他、GeTe や Cd₃As₂，WTe など合金の半金属が存在する．ここでは、V 族半金属 (Bi, Sb, As) について紹介する．なお、ここで言う“半金属”とは、“電子と正孔のキャリアを持ち、電子と正孔の数が等しい結晶”と定義される（図 2.14）．

結晶構造

V 族半金属 (Bi, Sb, As) は菱面体構造をしている（図 2.15）．図 2.15(左) は、単位胞（primitive cell）と対称軸が示されており、物性を考える上で実用的な図である．一見すると、とても複雑な構造をしているが、実際は図 2.15(右) のように NaCl 型の結晶が歪んだ結晶構造をしている．図 2.15(右) の結晶は、赤（atom 1）と青（atom 2）の格子点で作られる立方晶を次のように変形させた構造である [74, 75]．

1. 青の格子点に対する赤の格子点の相対位置を $\langle 111 \rangle$ 方向へわずかに平行移動させ、
2. 結晶全体を $\langle 111 \rangle$ 方向に引き伸ばした．

²⁶Wolff 模型は 3 次元系のディラック電子であり、式 (2.85) は 2 次元系の磁場中自由電子の固有関数であることから、完全に一対一対応するわけではない．

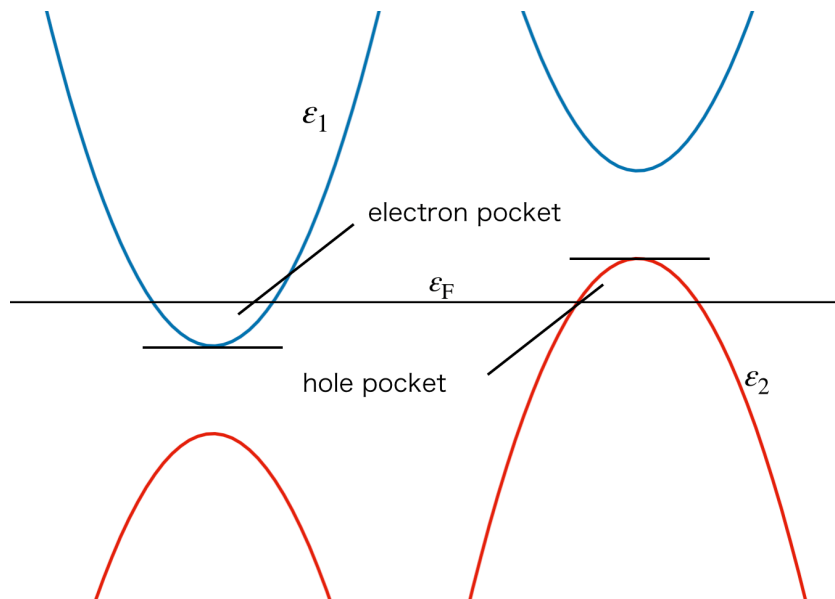


図 2.14: 半金属のバンド構造：電子と正孔のキャリア数は等しく，電子フェルミ面と正孔フェルミ面の体積は同じ．

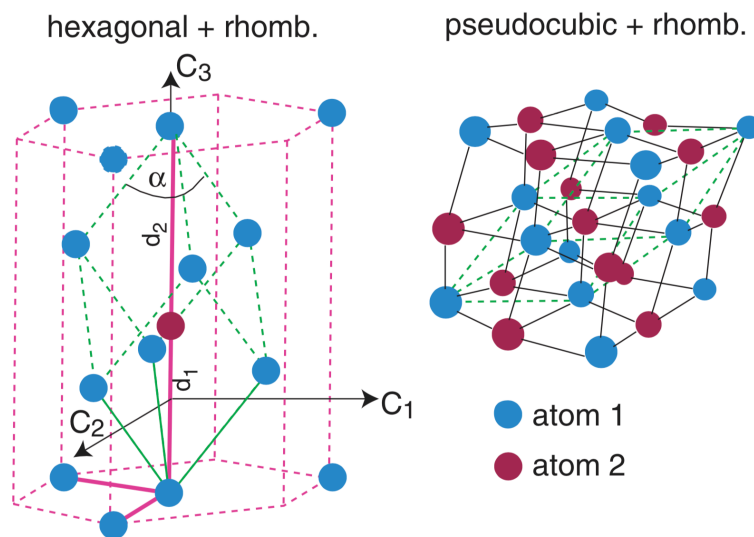


図 2.15: V 族単結晶の結晶構造：(左) 六方晶+菱面体 (右) 擬立方晶+菱面体 [73]

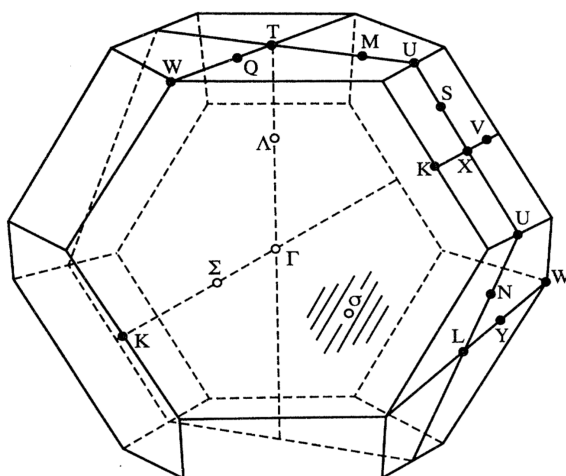


図 2.16: 菱面体構造のブリルアンゾーン

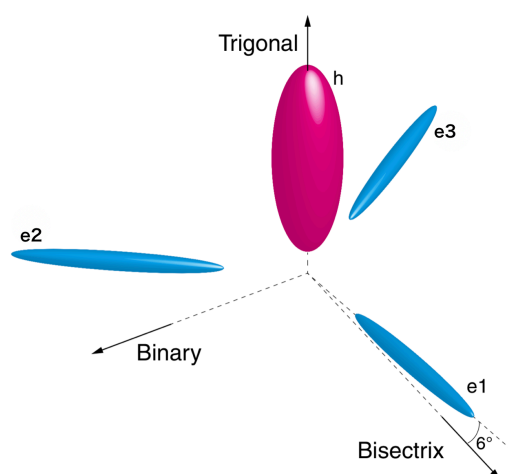


図 2.17: ビスマスのフェルミ面 [13]: (青) 電子 (赤) 正孔. 三つある電子フェルミ面は Trigonal 軸に対して 120° 回転させると互いに重なる.

V 族半金属のブリルアンゾーンは図 2.16 で示される形をしており, ビスマスは L 点に電子 (e_1, e_2, e_3), T 点に正孔 (h) が存在する (図 2.17). e_1 のフェルミ面を Trigonal 軸に対して $\pm 2\pi/3$ 回転させると, e_2 と e_3 のフェルミ面と一致する. 電子のキャリア密度の合計と正孔のキャリア密度は等しく, 電荷的に中性である.

電子構造

1958 年にスピン軌道相互作用の効果を含んだ V 族半金属の強束縛近似模型が初めて報告された [77, 78]. 1960 年代以降は APW 法や疑ポテンシャル法などを用いた第一原理計算が盛んに研究され [79–84], V 族半金属の電子構造の研究は大きく発展した. その後, 1993 年に Xu らが強束縛近似模型を新たに提案した [85]. この強束縛近似模型は, 第一原理計算 [80] と一致するように構築されており, フェルミ面近傍のバンドギャップが一致しないなどの問題があった. Liu–Allen はこの問題に対して, Xu らの模型をもとに実験結果に合うようにパラメータを変更した [76]. これにより, 実験とよく一致する模型が得られた. Liu–Allen 模型をもとにビスマスの薄膜のハミルトニアンが構築されるなど, [73, 86–88], ビスマスの電子状態を表す模型として Liu–Allen 模型は非常に信頼できる模型と言える (図 2.18).

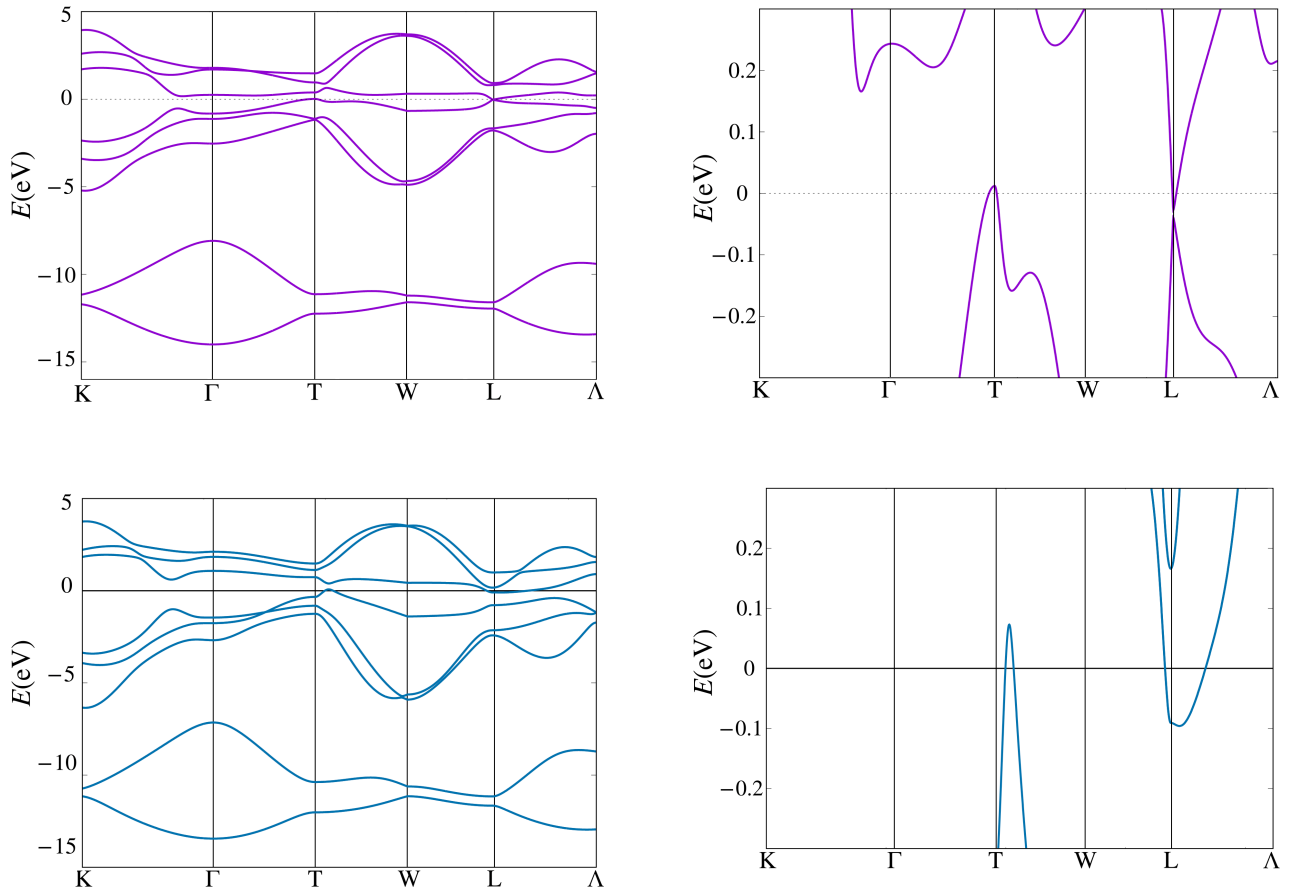


図 2.18: Liu–Allen 模型に基づく、ビスマスとアンチモンのバンド構造. (左) バンド全体 (右) フェルミ準位近傍 (上段) ビスマス (下段) アンチモン [76]

表 2.1: ビスマスを測定して初めて発見された物理現象

年	現象名	発見者
1778	反磁性	Brugmans
1886	ネルンスト効果	Ettingshausen, Nernst [89]
1928	巨大磁気抵抗	Kapitza [90]
1930	シュブニコフ-ド・ハース効果	Shubnikov, de Haas [38]
1930	ド・ハース-ファン・アルフェン効果	de Haas, van Alphen [39]
1955	金属におけるサイクロトロン共鳴	Galt [91]
1963	磁気ひずみの振動	Green, Chandrase [92]
⋮		
2011	磁場誘起による対称性の破れ	Zhu <i>et. al.</i> [9,93]

ビスマス

ビスマスの単体は銀白色の光沢をしており、同様の色をしているスズ、鉛、アンチモンと区別がつかなかった。ビスマスと鉛などの単結晶が異なる物性を示すことをフランスの薬学者 Geoffroy (1753 年) が報告したことで、単体の金属としてのビスマスが知られるようになった [75]。

ビスマスは主に化合物として自然界に存在し、銀・鉛・銅・亜鉛・タングステンなどの単体を錬成するときの副産物として算出される。ビスマスの融点は 271.30°C と低く、無鉛ハンダなどの低融点合金の材料の他、ビスマス化合物である次硝酸ビスマスは薬の原料としても使用されている。今後はナノワイヤーやビスマス-テルル合金を使用したペルティエ冷却素子や体温発電素子などの応用が期待されている。

ビスマスと固体物理研究との関わり

固体物理学において重要ないくつかの現象が、ビスマスで初めて観測された (表 2.1)。これは、ビスマスがディラック電子を持つことに由来する [75]。21 世紀に入った現在もビスマスで新たな現象が報告されている [9]。

アンチモン

アンチモンの単体はビスマスと同様、銀白色の光沢をしており、同様の色をしている鉛と混同されていた。ただし、単体のアンチモンが認識されたのはビスマスよりも早い。1615 年にドイツの化学者 Libavius がアンチモンの単体の生成法を確立されており、1701 年にスペインの物理学者 Zapata が “Crisis médica sobre el antimonio (アンチモンをめぐる医療危機)” という本を出版していたことから、17 世紀には単体のアンチモンが知られて

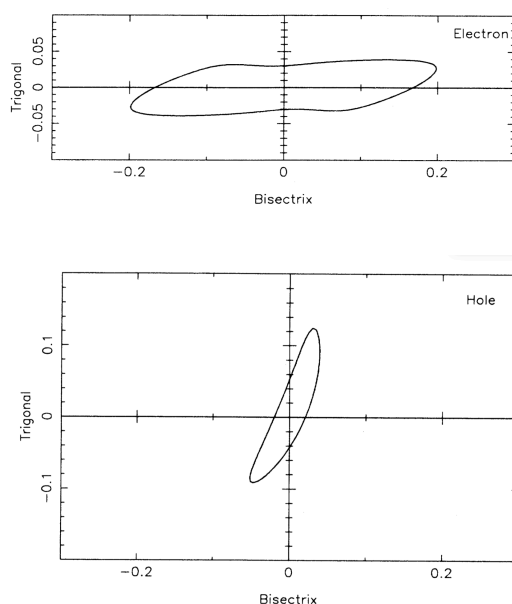


図 2.19: 強束縛近似模型によるアンチモンのフェルミ面 [76] (上) 電子フェルミ面 (下) 正孔フェルミ面.

いたことがうかがえる。日本では、最古の銅銭である富本銭にアンチモンが添加されている。現在、工業的なアンチモンの活用としては、鉛蓄電池の電極材料や、半導体の添加物などが主な用途である。

ビスマスと同様、アンチモンは古くから研究されている物質であり、ド・ハース-ファン・アルフェン効果 (dHvA) や磁気抵抗効果 (MR), 比熱の測定など様々な方法で研究されてきた [22, 94–100]. 実験データの解析を行う際、アンチモンのフェルミ面は図 1.2 のような模型を仮定されている。一方で、第一原理計算や強束縛近似模型では, [76, 80, 101] では歪んだ楕円体 (図 2.19) を示唆しており、アンチモンのフェルミ面の形状は未だ議論されている。

そのような状況の中、2007 年にアンチモンがトポロジカル的に非自明であることが Fu-Kane によって指摘された [102]. また、角度分解光電子分光法 (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy) によりアンチモンの (111) 面と (110) 面の電子状態が計算され (図 2.20), アンチモンの電子状態が再注目されている [103, 104].

2.4 磁気抵抗

磁場中に物質をおいた時に、電気抵抗が変化する現象を磁気抵抗効果と呼ぶ。抵抗が増加する場合を正の磁気抵抗効果と呼び、非磁性体の横磁気抵抗で多く観測される。正の磁

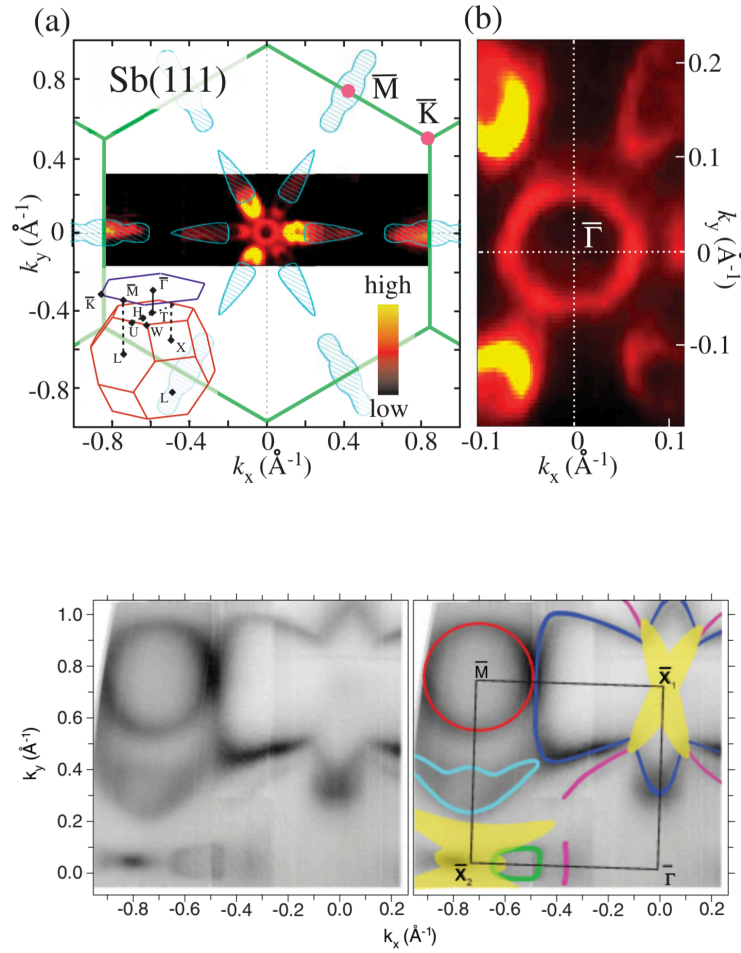


図 2.20: 角度分解光電子分光法によるアンチモンの (111) 面 [103] (上) と (110) 面 [104] (下) の表面状態. (111) 面の斜線部は Liu-Allen のパラメータを用いた第一原理的計算の結果であり, 実験で観測されている Γ 近傍の円環状のスペクトルが存在しない. (110) 面の黄色い部分は Liu-Allen 模型のパラメータを用いて得られるバルクのフェルミ面を (110) 面に射影した図である.

気抵抗は、フェルミ面のトポロジーに従って (1) 閉じたフェルミ面, (2) 開いたフェルミ面, (3) 電子と正孔が存在するフェルミ面, の三つに分類される. 本研究の対象としている半金属は, 電子フェルミ面と正孔フェルミ面を持つことから, (3) の磁気抵抗について触れる [13, 105, 106].

2.4.1 磁気抵抗研究の発展

磁気抵抗研究の歴史は非常に長く, 1857 年に William Thomson (初代ケルビン卿) が磁場中において Fe と Ni の抵抗が変化したことを報告した [107]. この報告が, 磁気抵抗の発見と言われている. 1928 年に, Kapitza は 30 テスラのパルス磁場を電流に対して垂直に印加し, ビスマスの横磁気抵抗が非常に大きくなることを報告した (図 2.21(a)). Kapitza は様々な非磁性金属 (Be, Cu, Ag, Au, Zn, Mg, Al, Cd, Hg, In, Ga, Ta, グラファイト, Ge, Pb, Sn, Tn, As, Sb, Bi, Mo, Cr, W, Te, Pt, Pd) に対しても磁気抵抗の測定を行い (図 2.21(b)), 非磁性金属の磁気抵抗が, 弱磁場で磁場の 2 乗に比例し ($\rho \propto B^2$), 強磁場で磁場の 1 乗に比例する性質を発見した (Kapitza 則). このとき, 液体窒素温度下 30 テスラで測定された磁気抵抗の増加は, ビスマスが 1360 倍, アンチモンは 40 倍である. これに対して金, 銀, 銅がそれぞれ, 0.28, 0.38, 0.47 倍と非常に小さい. 半金属の磁気抵抗が他の非磁性金属に比べて非常に大きいことがわかる.

Kapitza が線形磁気抵抗を報告した当時の理論では, 金属の磁気抵抗は磁場に依存せず, 半金属の磁気抵抗は磁場の 2 乗で増加すると考えられていた. この理論と実験の不一致から, 多くの研究者の関心を集め, 磁気抵抗の研究が盛んに行われた [38, 105, 106, 109–117]. 以下では, 磁気抵抗に関する基本的な理論と, 本研究と関係する先行研究について紹介する.

自由電子の磁気抵抗

導体に対して電場 \mathbf{E} , 磁場 \mathbf{B} を印加する. ドゥルーデ模型では電子の運動方程式が次式で表される

$$\hat{m} \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{1}{\tau} \hat{m} \cdot \mathbf{v}. \quad (2.143)$$

\hat{m} は電子の有効質量テンソル, τ は緩和時間を表す. 定常状態において $d\mathbf{v}/dt = 0$ より, 易動度 $\mu_{ij} = \frac{e\tau}{m_i^*} \delta_{ij}$ とおくと, 速度 \mathbf{v} は次式で表される

$$\mathbf{v} = -\hat{\mu}[\mathbf{E} + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})] \quad (2.144)$$

ここで, 磁場テンソル \hat{B} [13, 115],

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & -B_z & B_y \\ B_z & 0 & -B_x \\ -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.145)$$

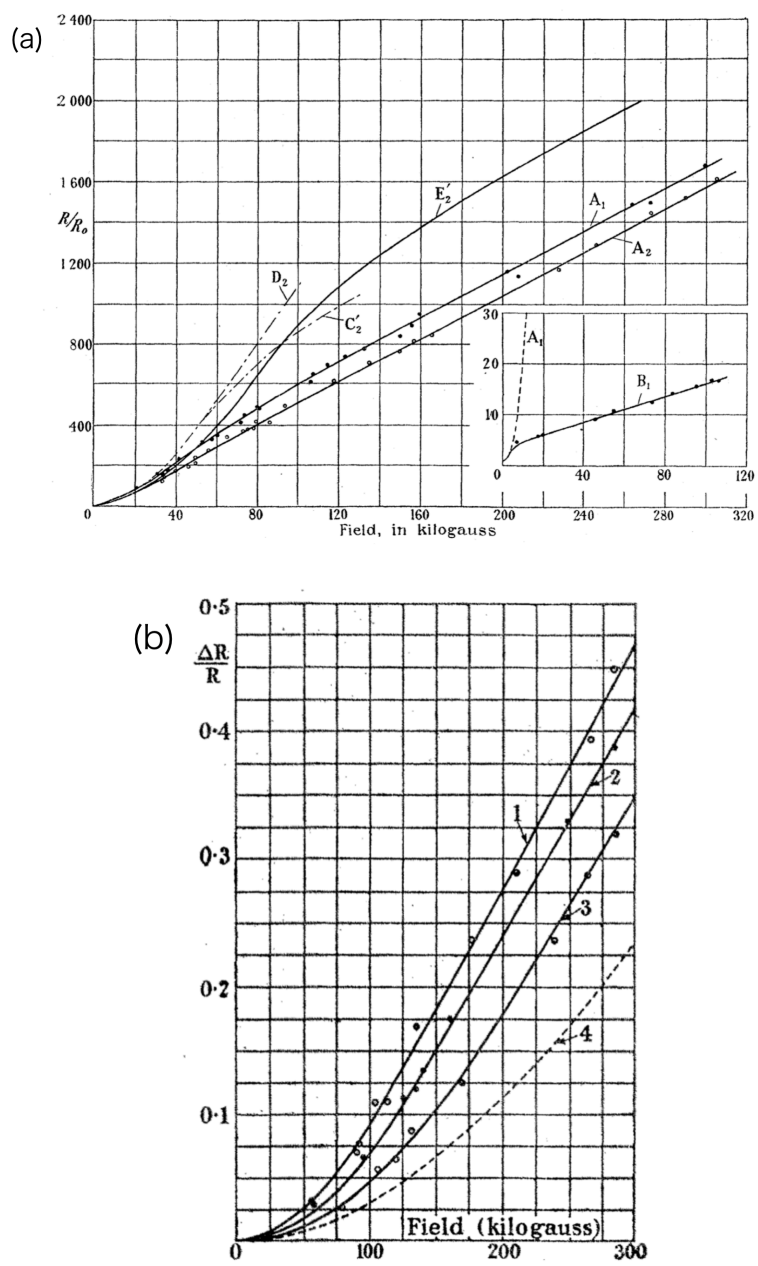


図 2.21: Kapitza による磁気抵抗の測定 : (a) ビスマス Bi [90] (b) 銅 Cu [108]

を用いると、 $\mathbf{v} \times \mathbf{B} = -\hat{B} \cdot \mathbf{v}$ と置き換えることができる。これを用いて、式 (2.144) を \mathbf{v} について解くと、

$$\mathbf{v} = -\left(\hat{\mu}^{-1} - \hat{B}\right)^{-1} \cdot \mathbf{E} \quad (2.146)$$

が得られる。式 (2.146) を電流密度式 $\mathbf{j} = -en\mathbf{v}$ に代入すると、

$$\mathbf{j} = ne\left(\hat{\mu}^{-1} - \hat{B}\right)^{-1} \cdot \mathbf{E} \quad (2.147)$$

となる。 $\mathbf{j} = \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E}$ から、磁気伝導度 $\hat{\sigma}(\mathbf{B})$ は次式で表される

$$\hat{\sigma}(\mathbf{B}) = ne\left(\hat{\mu}^{-1} - \hat{B}\right)^{-1}. \quad (2.148)$$

$\mathbf{B} = (0, 0, B)$ とすると、式 (2.148) の各成分は

$$\sigma_{xx} = \frac{ne\mu_x}{1 + \mu_x\mu_y B^2} \quad (2.149)$$

$$\sigma_{yy} = \frac{ne\mu_y}{1 + \mu_x\mu_y B^2} \quad (2.150)$$

$$\sigma_{zz} = ne\mu_z \quad (2.151)$$

$$\sigma_{yx} = \frac{ne\mu_x\mu_y B}{1 + \mu_x\mu_y B^2} \quad (2.152)$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0 \quad (2.153)$$

である。磁気抵抗 $\hat{\rho} = \hat{\sigma}^{-1}$ より、

$$\rho_{ii} = \frac{1}{ne\mu_i} \quad (i = x, y, z) \quad (2.154)$$

$$\rho_{yx} = -\rho_{xy} = -\frac{B}{ne} \quad (2.155)$$

$$\rho_{zx} = \rho_{xz} = 0 \quad (2.156)$$

となる。残りの磁気伝導度と磁気抵抗の成分については、オンサーガーの関係 ($\sigma_{ij}(B) = \sigma_{ji}(-B)$, $\rho_{ij}(B) = \rho_{ji}(-B)$) から得ることが可能である。式 (2.149)–(2.156) は、ボルツマン理論に従って自由電子の磁気抵抗を計算した場合と一致する。

Jones–Zener の近似解

ボルツマン方程式を解いて磁気伝導度を求める場合、楕円体や球体のような単純な模型に直す場合が多い。これら以外の模型になると、計算が非常に困難になるからである。この問題に対して、1934年に Jones–Zener が磁場中のボルツマン方程式の近似解を計算し、

任意の模型について使用可能な磁気伝導度を導出した [109, 110]. 電場 \mathbf{E} と磁場 \mathbf{B} を印加した場合のボルツマン方程式は、以下で表される

$$-\frac{e}{\hbar}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = -\frac{f - f_0}{\tau}. \quad (2.157)$$

式 (2.14)–(2.17) と同様の手順で計算すると、

$$-e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar}[\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{B}] \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \Phi - \frac{1}{\tau} \Phi = 0 \quad (2.158)$$

が得られる. 上式が式 (2.157) の代わりに解くべき方程式となる.

次のような演算子を用意する

$$\begin{aligned} \Omega &= \frac{1}{\hbar}[\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{B}] \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{1}{\hbar} \sum_{\mu\nu\lambda} \epsilon_{\mu\nu\lambda} v_{\mu} B_{\nu} \frac{\partial}{\partial k_{\lambda}} \quad (\mu, \nu, \lambda = x, y, z). \end{aligned} \quad (2.159)$$

$\epsilon_{\mu\nu\lambda}$ は Levi-civita シンボルである, 問題を簡単にするため, 緩和時間 τ は定数とする. 式 (2.158) を Ω を持ちいて, 以下のように書き直す

$$\frac{1}{\tau} \Phi + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}} - e\Omega \Phi = 0. \quad (2.160)$$

これを Φ について解くと、

$$\Phi = -e\tau(1 - e\tau\Omega)^{-1} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \quad (2.161)$$

となる. Ω は磁場を含む演算子であり, $|e\tau\Omega| \ll 1$ として冪級数展開すると, ボルツマン方程式の近似解が得られる,

$$\Phi = -e\tau \left(1 + e\tau\Omega + (e\tau\Omega)^2 \cdots \right) \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}}. \quad (2.162)$$

式 (2.162) を $\mathbf{j} = \frac{e}{4\pi^3} \int \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \Phi \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\mathbf{k}$ に代入すると

$$j_i = \sigma_{il} E_l + \sigma_{ilp} E_l B_p + \sigma_{ilps} E_l B_p B_s \quad (2.163)$$

$$\sigma_{il} = -\frac{e^2 \tau}{4\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} v_i v_l d\mathbf{k} \quad (2.164)$$

$$\sigma_{ilp} = \frac{e^3 \tau^2}{4\pi^3 \hbar^2} \int \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} v_i v_m \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_n \partial k_l} \epsilon_{pmn} d\mathbf{k} \quad (2.165)$$

$$\sigma_{ilps} = -\frac{e^4 \tau^3}{4\pi^3 \hbar^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} v_i v_m \frac{\partial}{\partial k_n} \left(v_t \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_u \partial k_l} \right) \epsilon_{smn} \epsilon_{ptu} d\mathbf{k} \quad (2.166)$$

が得られる. 上式は Ω の 2 次まで展開した場合の計算である. $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ のとき, σ_{ilp} がホール伝導度, $\sigma_{il}, \sigma_{ilps}$ が伝導度の対角成分に寄与する. Abeles と Meiboom は, 自由電子模型に対して上述の計算を行い, ビスマスの磁気抵抗について議論した [118].

Aubrey によるビスマス磁気抵抗の計算

ビスマスは三つの電子フェルミ面を持ち、Trigonal 軸に対して $\pm 2\pi/3$ 回転させるとそれぞれ重なる (図 2.17). このフェルミ面の特徴を考慮して計算したのが Aubrey である [119].

Aubrey はビスマスの電子フェルミ面が図 2.17 の構造をしていることに着目し、各電子 (e_1, e_2, e_3) の易動度 $\hat{\mu}^{e_1, e_2, e_3}$, を次式で表した.

$$\hat{\mu}^{e_1} = \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_2 & \mu_4 \\ 0 & \mu_4 & \mu_3 \end{pmatrix} \quad (2.167)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mu}^{e_2, e_3} &= \hat{R}_{\text{tri}}^{-1} \left(\mp \frac{2\pi}{3} \right) \hat{\mu}^{e_1} \hat{R}_{\text{tri}} \left(\mp \frac{2\pi}{3} \right) \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(\mu_1 + 3\mu_2) & \mp \frac{\sqrt{3}}{4}(\mu_1 - \mu_2) & \mp \frac{\sqrt{3}}{2}\mu_4 \\ \mp \frac{\sqrt{3}}{4}(\mu_1 - \mu_2) & \frac{1}{4}(3\mu_1 + \mu_2) & -\frac{1}{2}\mu_4 \\ \mp \frac{\sqrt{3}}{2}\mu_4 & -\frac{1}{2}\mu_4 & \mu_3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.168)$$

$$\hat{R}_{\text{tri}}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.169)$$

この模型は、ビスマスの磁気抵抗を計算するのに標準的な模型として用いられる [9, 12, 13].

量子極限の磁気抵抗：非ボルン散乱

最低ランダウ準位にのみ電子が存在する量子極限状態では (図 2.9), ボルン近似は使えないとされている. この問題に対し, 1969 年に Abrikosov は高次の不純物散乱を考慮した磁気抵抗の理論を提唱した [116].

電子をキャリアに持つ磁場中の等方的な金属を考える. ランダウゲージ $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ とし, 磁場中自由電子の不純物効果を含まないグリーン関数は, 次式で表される

$$G_{ss'}^{(0)}(k_z, k_y, x, x') = \sum_l \frac{\psi_{ls}(k_z, k_y, x - \hbar k_y/eB) \psi_{ls'}^*(k_z, k_y, x' - \hbar k_y/eB)}{i\omega_m + \xi - \varepsilon_l(k_z, s)} \quad (2.170)$$

$$\psi_{ls}(k_z, k_y, x) = \frac{2^{-l/2}}{\sqrt{l!}} \sqrt{\frac{eB}{\hbar\pi}} \exp\left(ik_y y + ik_z z - \frac{eB}{2\hbar^2} x^2\right) H_l\left(\sqrt{\frac{eB}{\hbar}} x\right) \chi_s. \quad (2.171)$$

ω_m は松原振動数, ξ はフェルミエネルギー, $\varepsilon_l(k_z, s)$ はランダウ準位 (式 (2.96)), s はスピンの符号, H_l はエルミート多項式, χ_s はスピンの固有状態を表す. 不純物の散乱振幅を V_0 とし, 不純物散乱によってスピンは変化しないものとする. 非ボルン散乱 (図 2.22)



図 2.22: 非ボルン散乱のダイアグラム

におけるグリーン関数 $G(k_z, k_y, x, x')$ と自己エネルギー Σ を計算すると次式が得られる.

$$G(k_z, k_y, x, x') = \sum_{ls} \frac{\psi_{ls}(k_z, k_y, x - \hbar k_y / eB) \psi_{ls'}^*(k_z, k_y, x' - \hbar k_y / eB)}{i\omega_m + \xi - \varepsilon_n(k_z, s) - \Sigma(\omega_m)} \quad (2.172)$$

$$\Sigma(\omega_m) = N_i V_0 \left(1 + \text{sign}(\omega_m) i V_0 \frac{eB m_c}{2\hbar} \sum_{ls} k_{Fls}^{-1} \right)^{-1} \quad (2.173)$$

N_i は不純物濃度, m_c はサイクロトロン有効質量, k_{Fls} は各ランダウ準位のフェルミ波数である. 式 (2.172) を元に, 電子の散乱確率 $\tau^{-1} = -2\text{Im}\Sigma$ と磁気伝導度の対角成分 σ_{ii} を計算すると,

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \sigma_{yy} \\ &= \frac{e^2 m_c}{2\pi^2 \hbar} \sum_{s=\pm} \tau_s^{-1} \sum_l (l + 1/2) k_{Fls}^{-1} \end{aligned} \quad (2.174)$$

$$\sigma_{zz} = \frac{e^2}{m_c} \sum_s (n_s \tau_s) \quad (2.175)$$

$$\tau_s^{-1} = \frac{1 + \left(V_0 \frac{eB m_c}{2\pi \hbar} \sum_l k_{Fls}^{-1} \right)^2}{N_i V_0^2 \frac{eB m_c}{\pi \hbar} \sum_l k_{Fls}^{-1}} \quad (2.176)$$

となる. n_s はスピン s のキャリア密度を表す. 量子極限 $((eB/m_c)/(\hbar^2 k_{F0-}^2/2m_c) \gg 1, (l, s) = (0, -))$ で, 式 (2.94) から $n = \hbar k_{F1-} eB/2\pi \hbar$ より式 (2.176) は,

$$\tau_-^{-1} = \frac{4\pi \hbar k_{F0-} N_i}{eB m_c N_i} = \frac{(2\pi)^3 n N_i}{(eB)^2 m_c} \quad (2.177)$$

となる. 上式を, 式 (2.174), (2.175) に代入すると次式が得られる

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{e N_i}{\pi B} \quad (2.178)$$

$$\sigma_{zz} = \frac{e^4 B^2}{(2\pi)^3 N_i} \quad (2.179)$$

量子極限状態においてホール伝導度は $\sigma_{yx} = ne/B$ であるから [116], 磁気抵抗の対角成分 ρ_{ii} は,

$$\begin{aligned}\rho_{xx} = \rho_{yy} &= \frac{\sigma_{yy}}{\sigma_{yx}^2} \\ &= \frac{N_i B}{\pi n^2 e}\end{aligned}\tag{2.180}$$

$$\begin{aligned}\rho_{zz} &= \sigma_{zz}^{-1} \\ &= (2\pi)^3 N_i e^4 B^{-2}\end{aligned}\tag{2.181}$$

となる. このように, Abrikosov は量子極限で線形磁気抵抗 $\rho_{xx,yy} \propto B^1$ を示した. Abrikosov は 1998 年にこの理論を拡張し, $\text{Ag}_{2+\delta}\text{Se}$ で観測された線形磁気抵抗を説明した [120–122].

角度依存磁気抵抗

磁気抵抗研究では磁場の大きさ依存性だけでなく, 角度依存性も重要である. 磁気抵抗はテンソル量であり磁場や電場を印加する方向で値が変化する. 磁気抵抗の角度依存性を解析することで, 易動度 $\hat{\mu}$ や緩和時間 τ の角度依存性を解析することができる. また, フェルミ面近傍の電子が磁気抵抗に対して強い寄与をすることから, フェルミ面の異方性と磁気抵抗の異方性は密接に関わっている. 磁気抵抗の角度依存性調べることで, フェルミ面の異方性を調べるのが可能である [123].

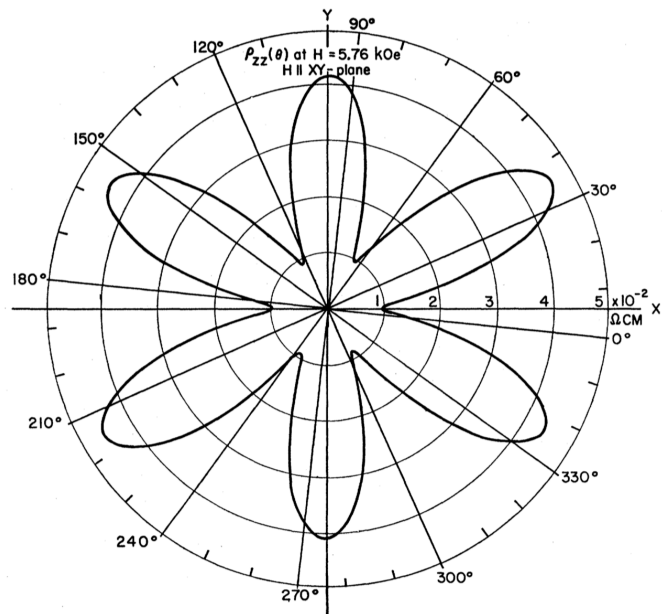


図 2.23: ビスマスの角度依存磁気抵抗 [123]. 電流を Trigonal 軸と平行に流し, 磁場は Trigonal 軸に垂直な面内で回転させている.

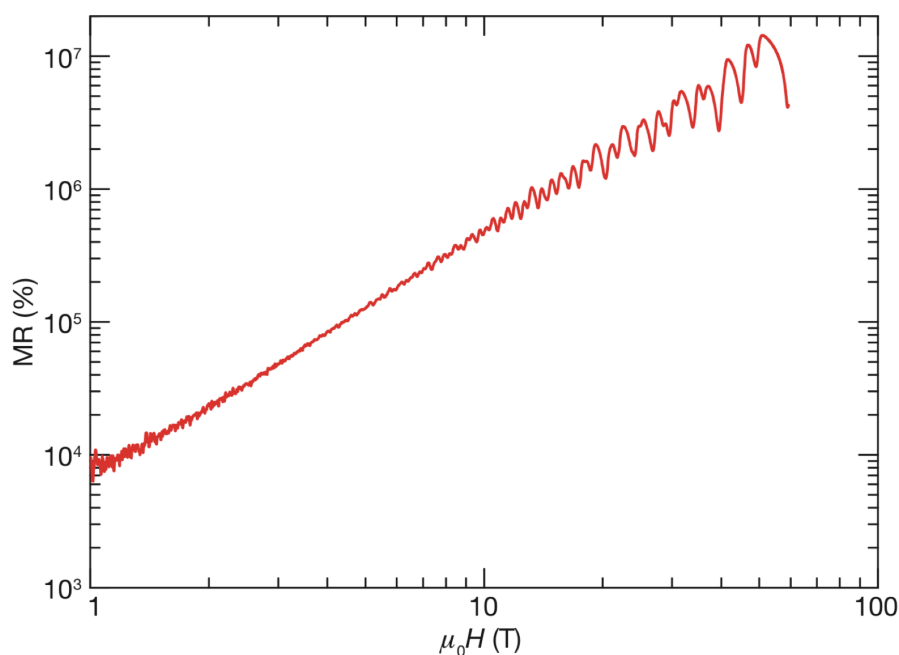


図 2.24: Ali らによる WTe_2 の磁気抵抗測定結果 [5]. 図は両対数のグラフである. 抵抗が磁場の 2 乗に比例している ($\rho \propto B^2$).

2.4.2 近年の磁気抵抗研究

21 世紀に入り, Ali らが WTe_2 で非飽和磁気抵抗を報告した [5]. 60 テスラの磁場中で WTe_2 の磁気抵抗は磁場の 2 乗に比例し ($\rho \propto B^2$), 最大で 1300 万 % もの磁気抵抗を示した (図 2.24). $\rho \propto B^2$ の非飽和磁気抵抗を示した半金属は WTe_2 が初めてである. Ali らの報告後, 半金属の磁気抵抗が再注目された. その後, 磁気抵抗研究は, ディラック電子系物質 (NbP [3], WP_2 [4], Cd_3As_2 [8], LaBi [124]) の電子状態との関係にまで興味を持たれ, 盛んに研究されている (図 2.25).

また, 角度依存磁気抵抗でも, ビスマスにおける磁気抵抗の“対称性の破れ”など (図 2.26), 新たな現象が報告されている. ビスマス以外の物質でも磁気抵抗の角度依存性が測定され, フェルミ面との関係 [15] や易動度の角度依存性 [21] などが調べられている (図 2.27).

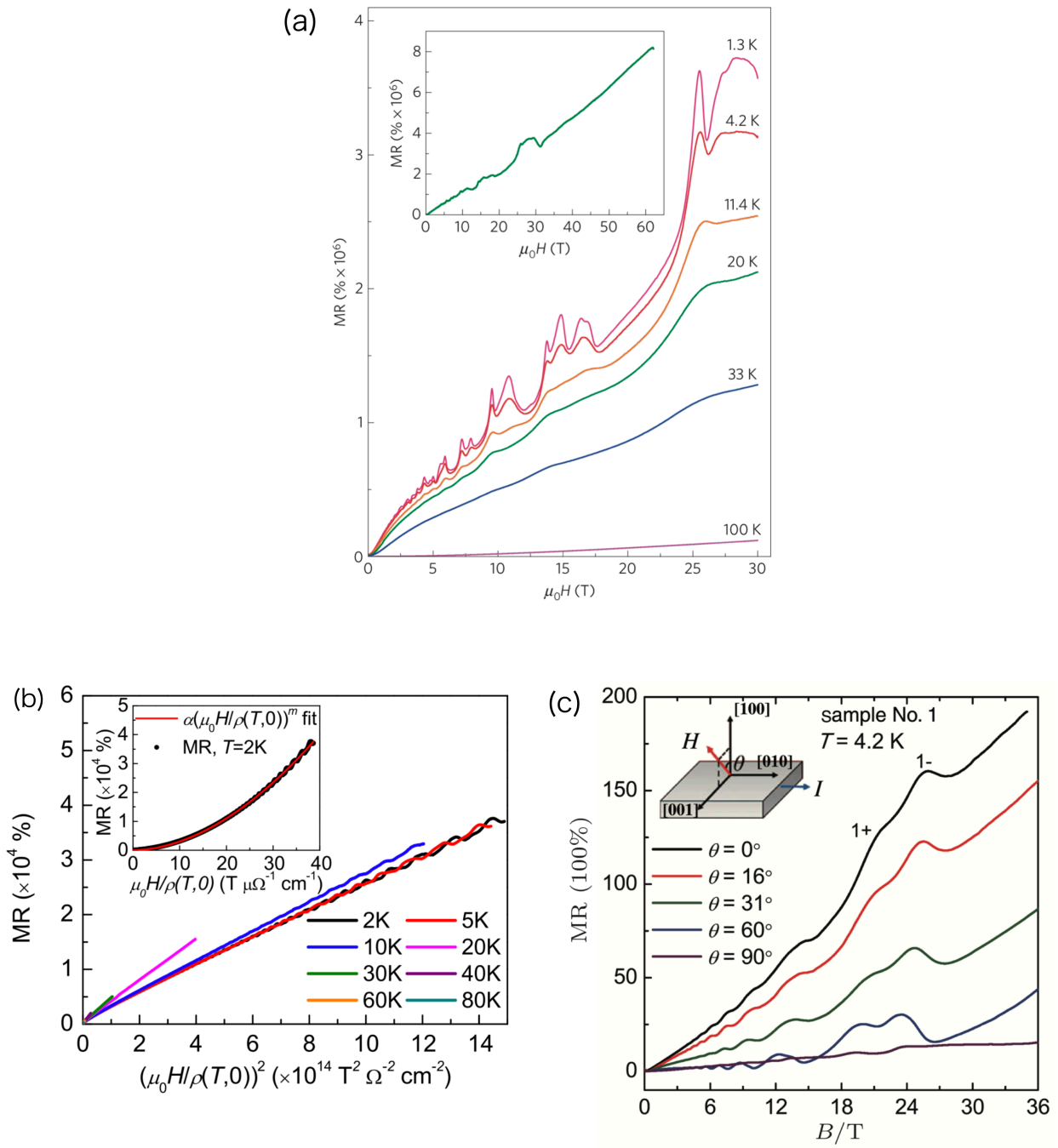


図 2.25: ディラック電子系物質の磁気抵抗 (a)NbP [3], (b)LaBi [124], (c)Cd₃As₂ [8] . NbP は挿入図で示されているように, $B > 30$ T の領域で線形増加し, LaBi は磁場の 2 乗で増加している.

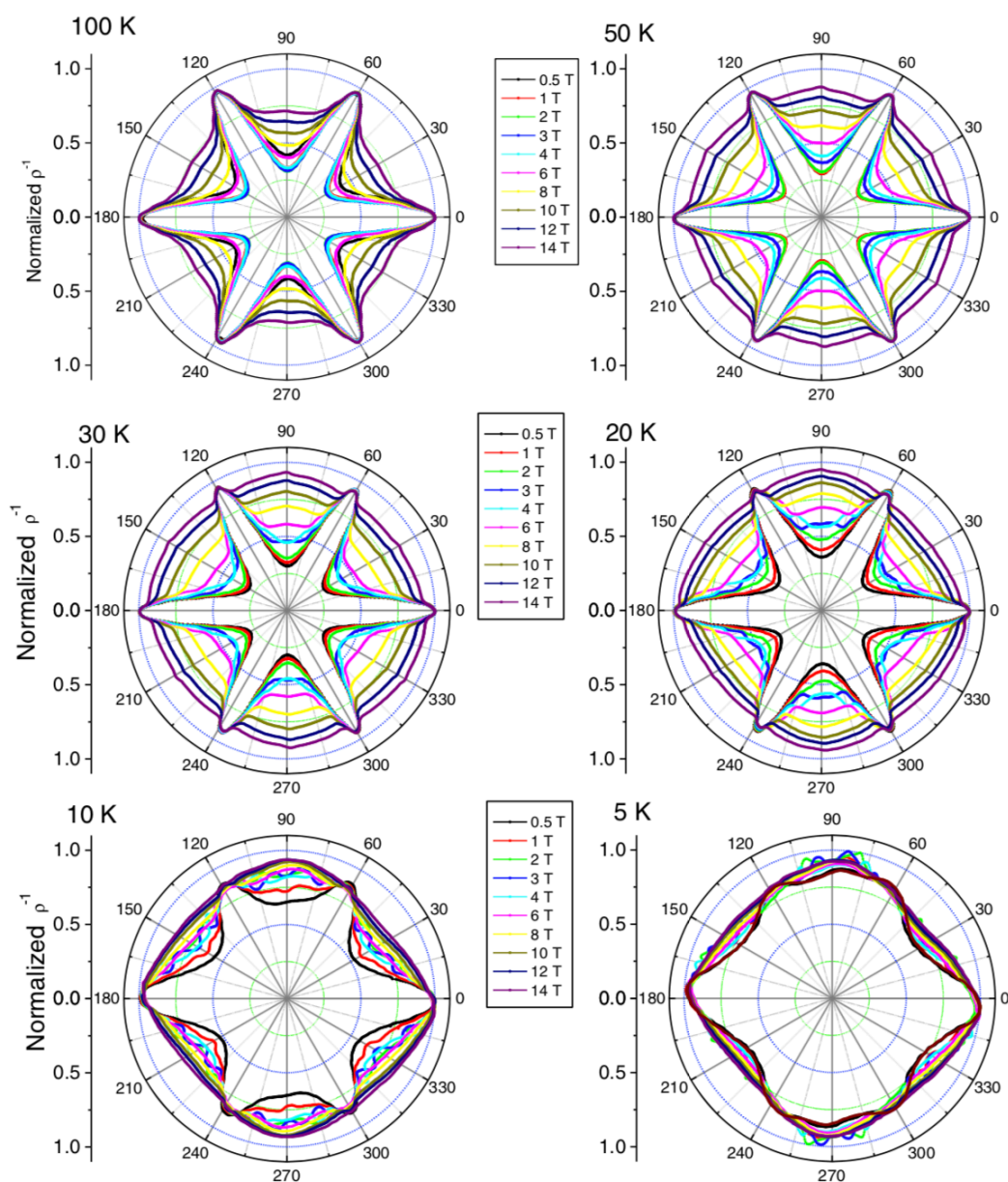


図 2.26: Bi の角度依存磁気抵抗の測定結果 [9]. 図は、電流を Trigonal 軸方向に流し、磁場を電流に対して垂直な面内で回転させて測定した結果である. ビスマスのフェルミ面は Trigonal 軸に対して 3 回対称性を持つ. このことから, Bin-Bis 平面内で磁場を回転させると, 理論的には磁気抵抗が 6 回対称性を持つ. ρ^{-1} の角度依存性を見ると, $T = 30\text{K}$ 以上では, 全ての磁場 ($B = 0.5, 4, 10, 14\text{T}$) で 6 回対称性を示すが, $T = 10\text{K}$ 以下では 6 回対称性が失われ始める. $T = 5\text{K}$ では, 全ての磁場に対して ρ^{-1} が 2 回対称性を示す. このように, 低温, 強磁場の条件で磁気抵抗の対称性の破れが観測された.

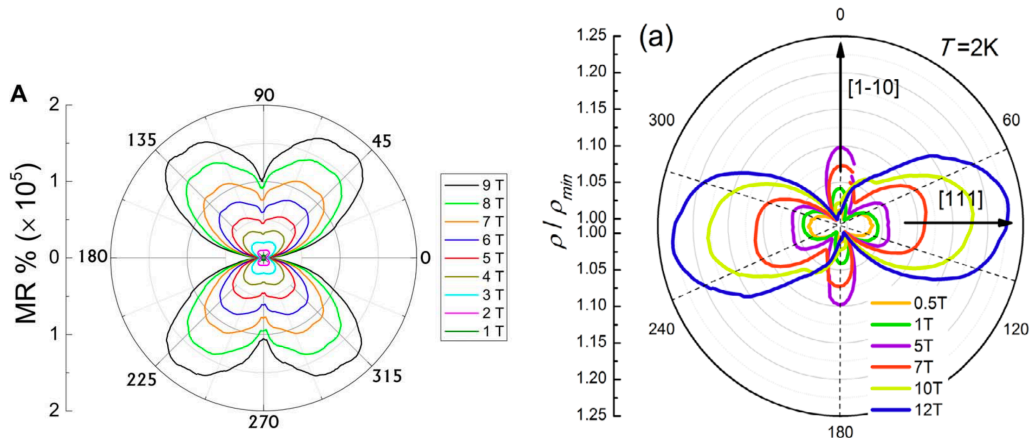


図 2.27: 角度依存磁気抵抗 (左) ZrSiS [15] (右) LuPtBi [21].

2.4.3 問題提起

半古典的と量子論的な磁気抵抗の定量性

キャリアの輸送現象の理論には、古典的なドルーデ理論、半古典的なボルツマン理論、量子論的な久保理論の三つがある。自由電子の磁気抵抗は、弱磁場極限 ($B \rightarrow 0$) において、三つの理論に基づく計算結果が定量的に一致する。しかし、久保理論に基づくディラック電子の磁気抵抗 [125] の計算結果²⁷と、従来の式 (2.148) は定量的に一致しない (図 2.28)。半古典的なボルツマン理論の磁気抵抗が、量子論的な久保理論の磁気抵抗と弱磁場で一致しないというのは、重大な問題である²⁸。何故なら、ボルツマン理論と久保理論、両方の磁気抵抗が一致しないということは、どちらかの理論 (あるいは、両方) に不十分な点が存在することを意味する。ディラック電子の磁気抵抗のデータ解析について、信頼性が保証されないことになる。以上のような理由から、理論的にディラック電子の磁気抵抗を研究することで、ボルツマン理論に基づく磁気抵抗と久保理論に基づく磁気抵抗の間に存在するギャップを取り除く必要がある。

量子極限における半金属の磁気抵抗

半金属や狭ギャップ半導体で量子極限における磁気抵抗の研究がおこなわれ (図 2.11(b), (c)), ビスマスの磁気抵抗についても量子極限における異常なふるまいが報告されている (図 1.1) [10–13]。しかし、従来の理論ではビスマスの量子極限における磁気抵抗のふるまいを十分に説明することができず、議論が残されている。

²⁷ 久保理論に基づくディラック電子の磁気抵抗の式については、第4章で詳しく紹介する。

²⁸ 式 (2.148) は古典的なドルーデ理論だが、ボルツマン理論に基づく自由電子の磁気抵抗も式 (2.148) と等しい。

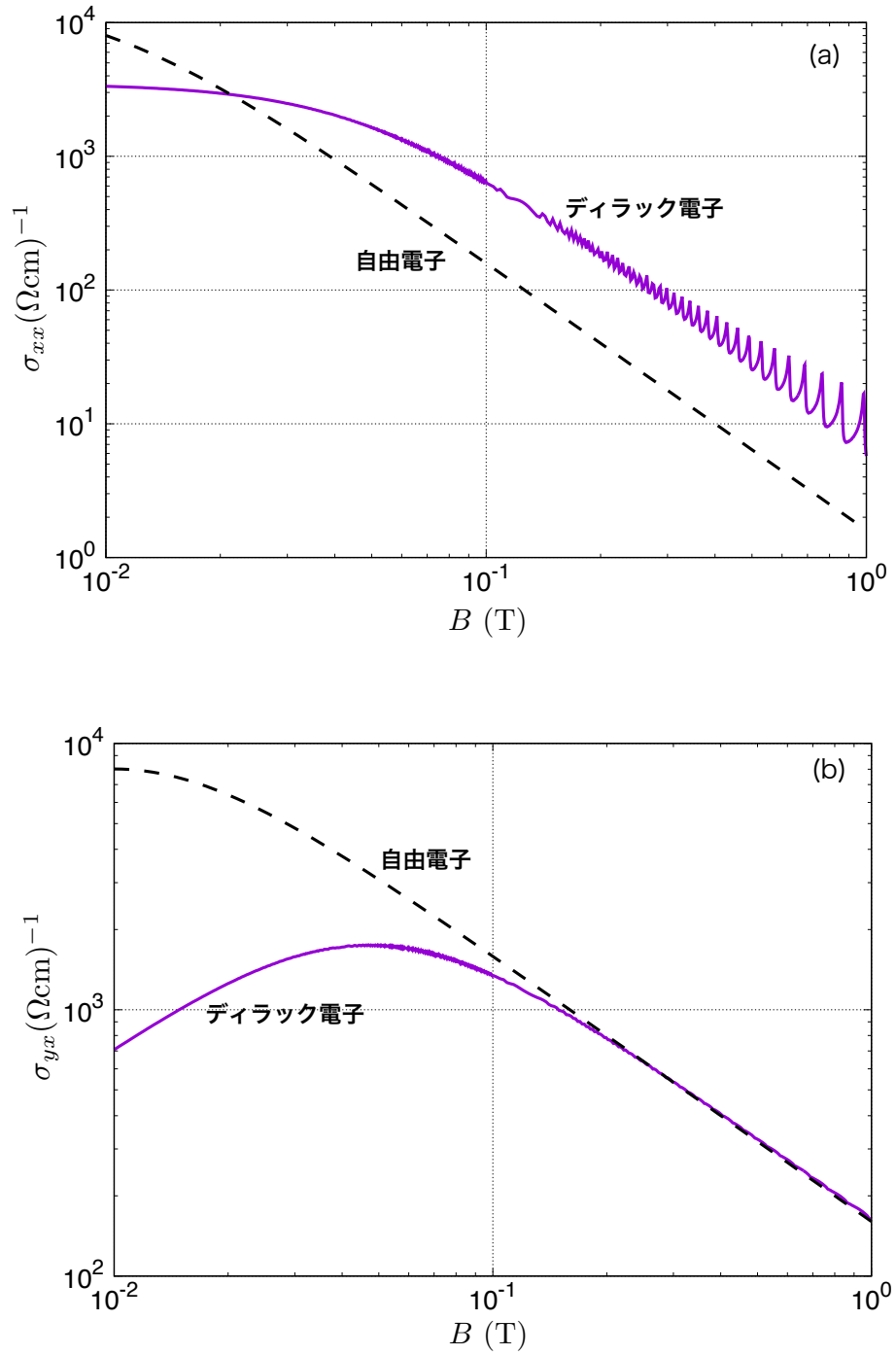


図 2.28: ディラック電子と自由電子の伝導度の比較 (a) 磁気伝導度 σ_{xx} , (b) ホール伝導度 σ_{yx} . (実線) 久保公式に基づくディラック電子の伝導度 (破線) ボルツマン理論に基づく自由電子の伝導度. キャリア密度 n と易動度 μ は $n = 1.0 \times 10^{17}(\text{cm}^{-3})$, $\mu = 100(\text{T}^{-1})$ を仮定している. 図が示すように, 久保公式に基づくディラック電子の伝導度とボルツマン理論に基づく自由電子の伝導度は, 弱磁場において定量的に一致しない.

量子極限におけるビスマスの磁気抵抗が十分に説明できない原因には、磁場中の電子状態を磁気抵抗の解析に十分反映させられていないことが原因だと考えられる。強磁場中のビスマスのキャリア密度とフェルミエネルギーは磁場に大きく依存する²⁹ [14]。式 (2.148) からわかるように、磁気抵抗はキャリア密度に依存することから、キャリア密度の磁場依存性は無視できない。また、ビスマスはディラック電子をキャリアに持つことから、自由電子を仮定した式 (2.148) を用いた場合に、ディラック電子の電子状態を計算に反映させることができるかどうか疑問である。以上の理由から、強磁場中の電子状態をボルツマン理論に基づく磁気抵抗に反映させる理論が必要である³⁰。

アンチモンにおける実験と理論のギャップ

前述したように、アンチモンのフェルミ面の形は明らかとなっておらず、未だ議論されている。そのような状況の中、アンチモンの正孔フェルミ面について、Fauque らが新たな報告をした [17]。彼らは Liu–Allen 模型を用いてアンチモンの正孔フェルミ面を計算したところ、図 1.3(a) のような複雑なフェルミ面をしていることを発見した。従来の正孔フェルミ面は6つの楕円体がT点の周囲に孤立して存在する“非連結”なフェルミ面である（図 1.2）。一方、新たに報告されたフェルミ面（図 1.3(a)）は6つの楕円体が成長し、“連結”した形である（連結フェルミ面）。仮に、連結フェルミ面がアンチモンのフェルミ面であった場合、楕円体模型（以下、6楕円体模型³¹）を仮定して実験データを解析するのは適切ではない。このことから、連結フェルミ面と6楕円体模型のどちらがアンチモンのフェルミ面として適切か、明確にする必要がある。前述の目的を達成するためには、連結フェルミ面と6楕円体模型それぞれのトポロジーや異方性が、物理量の観測でどのように現れるかを調べれば良い。本研究では、角度依存磁気抵抗を計算することで、フェルミ面を決定する指標を立てる。

連結フェルミ面と6楕円体の磁気抵抗を比較する場合、それぞれのフェルミ面の異方性やトポロジーを十分に反映させなければならない。しかし、従来の解析で使用される磁気抵抗（式 (2.149)-(2.153)）は楕円体模型を仮定しており、連結フェルミ面の異方性を磁気抵抗の計算へ十分に反映させることができない。このことから、任意のフェルミ面に対して適応可能な解析手法を開発する必要がある。

²⁹ キャリア密度とフェルミエネルギーが強磁場で磁場に依存するのは、半金属の一般的な性質である。狭ギャップ半導体では、フェルミエネルギーだけが磁場に依存し、キャリア密度は磁場に依存しない。

³⁰ 久保理論に基づいた計算であれば、磁場中の電子状態を磁気抵抗の計算へ自然に反映させることができる。しかし、久保理論に基づいた計算は、式が複雑で実験データの解析に向かない。ゆえに、磁場中の電子状態をボルツマン理論に基づく磁気抵抗に反映させる理論が必要となる。

³¹ アンチモンの電子のフェルミ面は、従来の模型と大きな違いはない。アンチモンの正孔のフェルミ面だけを6楕円体模型と呼ぶ。

第3章 ディラック電子系の磁気抵抗

自由電子のエネルギーは波数の2次に比例し ($\varepsilon \propto k^2$)，ディラック電子のエネルギーは波数の一次に比例する ($\varepsilon \propto k^1$)．このバンド分散の違いを磁気抵抗の計算に反映させる必要がある．ディラック電子の有効模型のエネルギーから半古典的な磁気抵抗の式を再導出することで，ディラック電子の磁気抵抗のふるまいを議論する．

3.1 ディラック電子に対する半古典的な磁気抵抗の公式

今回我々は，ディラック電子系の有効模型である異方的な Wolff 模型 [51] を元に，磁気抵抗を導出した．電子の速度は $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \hbar^{-1} \partial \varepsilon / \partial \mathbf{k}$ より，式 (2.121) からディラック電子の速度 \mathbf{v}^D は次式で与えられる

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^D &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon^D}{\partial \mathbf{k}} \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \left(\sqrt{\Delta^2 + \Delta \hbar^2 \mathbf{k} \cdot \hat{\alpha} \cdot \mathbf{k}} \right) \\ &= \frac{\Delta}{\varepsilon^D} \hat{\alpha} \cdot \hbar \mathbf{k} \\ &= \lambda_{\varepsilon} \mathbf{v}^Q \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\lambda_{\varepsilon} = \frac{\Delta}{\varepsilon^D}. \quad (3.2)$$

\mathbf{v}^Q は自由電子の速度，

$$\mathbf{v}^Q = \hat{\alpha} \cdot \hbar \mathbf{k} \quad (3.3)$$

である．無次元量 λ_{ε} は，自由電子には見られないディラック電子特有の量である．ここでは，無次元量 λ_{ε} を相対論的補正と呼ぶ．式 (3.1)-(3.3) に出てくる右肩の添え字 “D” と “Q” は，それぞれディラック電子と自由電子を表す¹．式 (3.1)-(3.3) を用いて，磁場中におけるボルツマン方程式（式 (2.157)）を解く．非平衡状態における分布関数 f と平衡状態の分布関数 f_0 の差が小さいと仮定する．このとき f は f_0 と \mathbf{v}^D を用いて次のように表すことができる [126, 127]

$$f = f_0 + \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}^D \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}. \quad (3.4)$$

¹ 添字 “D” は “Dirac” の頭文字を用いた．添字 “Q” は，自由電子のエネルギー分散が波数の2乗に比例することから ($\varepsilon^Q \propto k^2$)，2乗を意味する “Quadratic” の頭文字を用いた．

\mathbf{v}^D が熱平衡状態における速度であるから、非平衡状態と熱平衡状態のズレはベクトル \mathbf{F} に含まれる．よって、 \mathbf{F} は電場 \mathbf{E} と磁場 \mathbf{B} に依存するベクトルである．式 (3.4) から

$$\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} f = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} f_0 + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}^D) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}^D) \mathbf{v}^D \frac{\partial^2 f_0}{\partial \varepsilon^2} \quad (3.5)$$

となる．ここで $\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}^D)$ を成分表示したものを以下に示す

$$\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}^D) = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} F_x \partial_x v_x^D + F_y \partial_x v_y^D + F_z \partial_x v_z^D \\ F_x \partial_y v_x^D + F_y \partial_y v_y^D + F_z \partial_y v_z^D \\ F_x \partial_z v_x^D + F_y \partial_z v_y^D + F_z \partial_z v_z^D \end{pmatrix} + \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} v_x^D \partial_x F_x + v_y^D \partial_x F_y + v_z^D \partial_x F_z \\ v_x^D \partial_y F_x + v_y^D \partial_y F_y + v_z^D \partial_y F_z \\ v_x^D \partial_z F_x + v_y^D \partial_z F_y + v_z^D \partial_z F_z \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

ただし、 $\partial_i = \partial / \partial k_i$ である．上式の x 成分について見てみると [126]

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\hbar} [\nabla_{\mathbf{k}} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}^D)]_x \\ &= \sum \alpha_{xj}^D F_j + \frac{1}{\hbar} (v_x^D \partial_x F_x + v_y^D \partial_x F_y + v_z^D \partial_x F_z) \\ &= \sum \alpha_{xj}^D F_j + \frac{1}{\hbar} \left(v_x^D \partial_x F_x + v_y^D \partial_x F_y + v_z^D \partial_x F_z + \sum_{s=\pm} s (v_x^D \partial_y F_y + v_x^D \partial_z F_z) \right) \\ &= \sum \alpha_{xj}^D F_j + \frac{1}{\hbar} ([\nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{F}] v_x^D + (v_y^D \partial_x - v_x^D \partial_y) F_y + (v_z^D \partial_x - v_x^D \partial_z) F_z) \\ &= \sum \alpha_{xj}^D F_j + \frac{1}{\hbar} ([\nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{F}] v_x^D + [(\mathbf{v}^D \times \nabla_{\mathbf{k}}) \times \mathbf{F}]_x). \end{aligned} \quad (3.7)$$

となる． $\alpha_{ij}^D = \hbar^{-2} \partial^2 \varepsilon^D / \partial k_i \partial k_j$ であるから、第一項は

$$\begin{aligned} \sum \alpha_{xj}^D F_j &= \sum_j \frac{1}{\hbar} \partial_x (\lambda_\varepsilon v_j^Q) F_j \\ &= \sum_j \left[\frac{1}{\hbar} (\partial_x \lambda_\varepsilon) v_j^Q F_j + \lambda_\varepsilon \frac{1}{\hbar} (\partial_x v_j^Q) F_j \right] \\ &= \sum_j \left[-\frac{\Delta}{(\varepsilon^D)^2} v_x^D v_j^Q F_j + \lambda_\varepsilon \alpha_{xj} F_j \right] \\ &= -\frac{\Delta}{(\varepsilon^D)^2} v_x^D (\mathbf{v}^Q \cdot \mathbf{F}) + \lambda_\varepsilon (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})_x \end{aligned} \quad (3.8)$$

となる．他の成分も同様に計算を行うと、式 (3.6) は次式に変形することができる

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}^D) &= -\frac{\Delta}{\varepsilon^D} \mathbf{v}^D (\mathbf{v}^Q \cdot \mathbf{F}) + \lambda_\varepsilon (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F}) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar} ([\nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{F}] \mathbf{v}^D + (\mathbf{v}^D \times \nabla_{\mathbf{k}}) \times \mathbf{F}). \end{aligned} \quad (3.9)$$

\mathbf{F} はエネルギー ε に依存することから

$$\begin{aligned} (\mathbf{v}^D \times \nabla_{\mathbf{k}}) \times \mathbf{F} &= \left(\mathbf{v}^D \times \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) \times \mathbf{F} \\ &= \left(\mathbf{v}^D \times \mathbf{v}^D \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) \times \mathbf{F} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

となる。上式より、式 (3.9) は次式のように表される

$$\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_k) = -\frac{\Delta}{\varepsilon^D} \mathbf{v}^D (\mathbf{v}^Q \cdot \mathbf{F}) + \lambda_\varepsilon (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F}) + \frac{1}{\hbar} [\nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{F}] \mathbf{v}^D. \quad (3.11)$$

式 (3.4), (3.5), (3.11) を式 (2.157) に代入すると、次のようになる

$$\begin{aligned} -e (\mathbf{E} + \mathbf{v}^D \times \mathbf{B}) \cdot \left[\frac{1}{\hbar} \mathbf{v}^D \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \left(-\frac{\Delta}{\varepsilon^D} \mathbf{v}^D (\mathbf{v}^Q \cdot \mathbf{F}) + \lambda_\varepsilon (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F}) + \frac{1}{\hbar} [\nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{F}] \mathbf{v}^D \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right. \\ \left. + \frac{1}{\hbar} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_k) \mathbf{v}^D \frac{\partial^2 f_0}{\partial \varepsilon^2} \right] = -\frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}^D}{\tau} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

電場に対する線形応答を考えていることから、 \mathbf{E} の 2 次以上は無視する。 \mathbf{F} は \mathbf{E} に比例するベクトルであるから、 \mathbf{F} と \mathbf{E} の積を含む項も \mathbf{E} の 2 次となるので無視できる。 $(\mathbf{v}^D \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{v}^D = 0$ を用いると

$$-e (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}^D) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} - e (\mathbf{v}^D \times \mathbf{B}) \cdot [\lambda_\varepsilon (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})] \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}^D}{\tau} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \quad (3.13)$$

上式の左辺第二項は公式 $(\mathbf{X} \times \mathbf{Y}) \cdot \mathbf{Z} = (\mathbf{Y} \times \mathbf{Z}) \cdot \mathbf{X}$ より、次式が得られる

$$-e (\mathbf{v}^D \times \mathbf{B}) \cdot (\lambda_\varepsilon (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \lambda_\varepsilon (\mathbf{B} \times [\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F}]) \cdot \mathbf{v}^D \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}. \quad (3.14)$$

これを式 (3.13) に代入し、 $\mathbf{v} \partial f_0 / \partial \mathbf{k}$ に対する恒等式と考えると

$$-e \mathbf{E} - e \lambda_\varepsilon [\mathbf{B} \times (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})] = -\frac{1}{\tau} \mathbf{F} \quad (3.15)$$

となる。ここで、 $\mathbf{B} \times (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})$ は

$$\mathbf{B} \times (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F}) = \begin{pmatrix} -B_z (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})_y + B_y (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})_z \\ B_z (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})_x - B_x (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})_z \\ -B_y (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})_x + B_x (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})_y \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -B_z & B_y \\ B_z & 0 & -B_x \\ -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})_x \\ (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})_y \\ (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F})_z \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

$$= \hat{B} \cdot (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{F}) \quad (3.18)$$

と表すことができる [115]. 式 (3.15), (3.16) から, \mathbf{F} は次式で表される

$$\mathbf{F} = e\tau \left(\hat{1} - e\tau\lambda_\varepsilon \hat{B} \cdot \hat{\alpha} \right)^{-1} \cdot \mathbf{E}. \quad (3.19)$$

\hat{B} は磁場テンソルである (式 (2.145)).

スピンの縮退を考慮した電流密度 (式 (2.18)) に式 (3.4), (3.19) を代入すると, ディラック電子の電流密度 \mathbf{j}^D は

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^D &= \frac{-2e}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \mathbf{v}_k^D (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_k^D) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \\ &= \frac{2e^2\tau}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{v}_k^D \left[\mathbf{v}_k^D \cdot \left[\left(\hat{1} - e\tau\lambda_\varepsilon \hat{B} \cdot \hat{\alpha} \right)^{-1} \cdot \mathbf{E} \right] \right] \end{aligned} \quad (3.20)$$

となる. $T = 0$ で, $\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \delta(\varepsilon^D - \varepsilon_F)$ であるから, 式 (3.1), (3.3), (3.20) より, ディラック電子に対する電流密度 \mathbf{j}^D は次式で表される.

$$\mathbf{j}^D = \lambda_{\varepsilon_F} n e \left(\mu^{-1} - \lambda_{\varepsilon_F} \hat{B} \right)^{-1} \cdot \mathbf{E} \quad (3.21)$$

ただし, 易動度 $\hat{\mu}$ は $\mu_{ij} = e\tau\alpha_{ij}$ である. $\mathbf{j} = \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E}$ より, 磁気伝導度 $\hat{\sigma}^D$ は

$$\hat{\sigma}^D(\mathbf{B}) = \lambda_{\varepsilon_F} n e \left(\mu^{-1} - \lambda_{\varepsilon_F} \hat{B} \right)^{-1} \quad (3.22)$$

この式は, $\lambda_{\varepsilon_F} \rightarrow 1 (\varepsilon_F \rightarrow \Delta)$ において, 自由電子の磁気伝導度,

$$\hat{\sigma}^Q = n e \left(\mu^{-1} - \hat{B} \right)^{-1} \quad (3.23)$$

と一致する [115]. ディラック電子の線形分散と自由電子の二乗分散の違いが, 補正 λ_{ε_F} として現れている.

ここからは, 等方的ディラック電子 ($\mu_{ij} = \mu_0 \delta_{ij}$) における場合について議論する. 等方的なディラック電子 ($\mu_{ij} = \mu_0 \delta_{ij}$) を仮定する. 式 (3.22) の各成分を以下に示す.

$$\sigma_{xx}^D = (\mu_0 + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \eta B_x^2) g^D \quad (3.24)$$

$$\sigma_{yy}^D = (\mu_0 + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \eta B_y^2) g^D \quad (3.25)$$

$$\sigma_{zz}^D = (\mu_0 + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \eta B_z^2) g^D \quad (3.26)$$

$$\sigma_{yx}^D = (\lambda_{\varepsilon_F} \mu_0^2 B_z + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \eta B_y B_x) g^D \quad (3.27)$$

$$\sigma_{zy}^D = (\lambda_{\varepsilon_F} \mu_0^2 B_x + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \eta B_z B_y) g^D \quad (3.28)$$

$$\sigma_{xz}^D = (\lambda_{\varepsilon_F} \mu_0^2 B_y + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \eta B_z B_x) g^D \quad (3.29)$$

$$g^D = \lambda_{\varepsilon_F} n e \left[1 + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \mu_0^2 (B_x^2 + B_y^2 + B_z^2) \right]^{-1} \quad (3.30)$$

$$\eta = \det(\hat{\mu}) = \mu_0^3. \quad (3.31)$$

他の成分については, オンサーガーの関係式 $\hat{\sigma}_{ij}^D(\mathbf{B}) = \hat{\sigma}_{ji}^D(-\mathbf{B})$ から導ける.

3.2 1 キャリア模型：ディラック電子 ($\hat{\rho}^D$)

始めに、キャリアがディラック電子のみの系について議論を行う。磁場が z 軸と平行な場合において ($\mathbf{B} \parallel z$ 軸), $\sigma_{xx}^D, \sigma_{yx}^D$ の磁場依存性を両対数プロットしたものを、図 3.1 に示す。 σ_{xx}^D は弱磁場 $B \rightarrow 0(\text{T})$ で一定値を示すが、強磁場 $B \gtrsim 0.1(\text{T})$ では $\sigma_{xx}^D \propto B^{-2}$ で変化している (図 3.1(a))。 σ_{yx}^D は弱磁場で $\sigma_{yx}^D \propto B^1$ を示し、強磁場で $\sigma_{yx}^D \propto B^{-1}$ である (図 3.1(b))。 $\sigma_{xx}^D, \sigma_{yx}^D$ の磁場依存性が変化する磁場の大きさは、 λ_{ε_F} の減少にしたがい大きくなる。この変化については、次のように理解が可能である。伝導度 σ_{xx}^D は、強磁場領域 ($1 + (\lambda_{\varepsilon_F} \mu B)^2 \approx (\lambda_{\varepsilon_F} \mu B)^2$) で、顕著に値が変化する。 λ_{ε_F} が減少すると $\lambda_{\varepsilon_F} \mu B$ の値も減少するので、強磁場領域にはより大きな磁場が必要になる。 $\sigma_{xx}^D, \sigma_{yx}^D$ の大きさに注目する。 σ_{xx}^D は弱磁場と強磁場で伝導度の大小関係が逆転している。一方、 σ_{yx}^D では $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.2 - 1.0$ のグラフが全てが同じ値をとる (図 3.1(b))。式 (3.24), (3.27) について、弱磁場近似 ($1 + (\lambda_{\varepsilon_F} \mu B)^2 \approx 1$) と強磁場近似 ($1 + (\lambda_{\varepsilon_F} \mu B)^2 \approx (\lambda_{\varepsilon_F} \mu B)^2$) を行うことで容易に理解できる。弱磁場と強磁場の近似を行うと、 $\sigma_{xx}^D, \sigma_{yx}^D$ は次式のように表せる

$$\sigma_{xx}^D = \begin{cases} \frac{\lambda_{\varepsilon_F} n e \mu_0}{n e} & (1 + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \mu^2 B^2 \approx 1) \\ \frac{\lambda_{\varepsilon_F} \mu_0 B^2}{\lambda_{\varepsilon_F} \mu_0 B^2} & (1 + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \mu_0^2 B^2 \approx \lambda_{\varepsilon_F}^2 \mu^2 B^2) \end{cases} \quad (3.32)$$

$$\sigma_{yx}^D = \begin{cases} \frac{\lambda_{\varepsilon_F}^2 n e \mu_0^2 B}{n e} & (1 + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \mu^2 B^2 \approx 1) \\ \frac{n e}{B} & (1 + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \mu_0^2 B^2 \approx \lambda_{\varepsilon_F}^2 \mu^2 B^2) \end{cases} \quad (3.33)$$

σ_{xx}^D は、弱磁場で $\sigma_{xx}^D \propto \lambda_{\varepsilon_F}$ 、強磁場では $\sigma_{xx}^D \propto \lambda_{\varepsilon_F}^{-1}$ を示す。また、 σ_{yx}^D は強磁場で $\lambda_{\varepsilon_F} \kappa$ に依存しなくなるので、任意の λ_{ε_F} において同じ値を示すようになる。

次に抵抗 $\hat{\rho}^D = (\hat{\sigma}^D)^{-1}$ のふるまいについて見てみる。 $\rho_{ij} = \hat{\sigma}^{-1}$ から、横磁気抵抗 ρ_{xx}^D 、ホール抵抗 ρ_{yx}^D 、ホール係数は次式で表される

$$\rho_{xx}^D = \frac{1}{\lambda_{\varepsilon_F} n e \mu_0} \quad (3.34)$$

$$\rho_{yx}^D = -\frac{B}{n e} \quad (3.35)$$

$$R_H^D = -\frac{1}{n e}. \quad (3.36)$$

上式より、ディラック電子の横磁気抵抗 ρ_{xx}^D は $\lambda_{\varepsilon_F}^{-1}$ の補正を受ける。 λ_{ε_F} の値が減少すると、ディラック電子の性質は強くなる。 ρ_{xx}^D は λ_{ε_F} に反比例 ($\rho_{xx} \propto \lambda_{\varepsilon_F}^{-1}$) することから、ディラック電子性が強い系ほど、補正による磁気抵抗の増加は大きい (図 3.2)。一方、ホール抵抗 ρ_{yx}^D とホール係数 R_H^D は自由電子と同じ式で表される (式 (3.35), (3.36))。 R_H^D の式はグラフェンの場合におけるホール係数と同じ結果を得ている [128]。

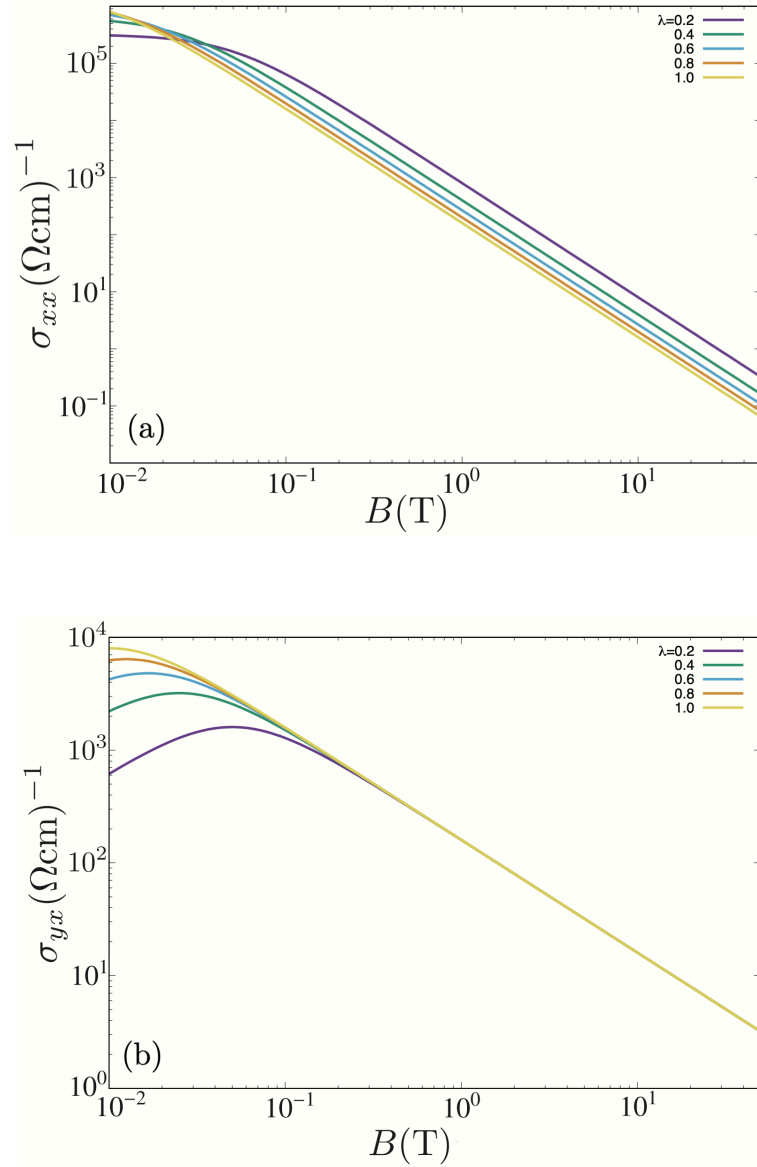
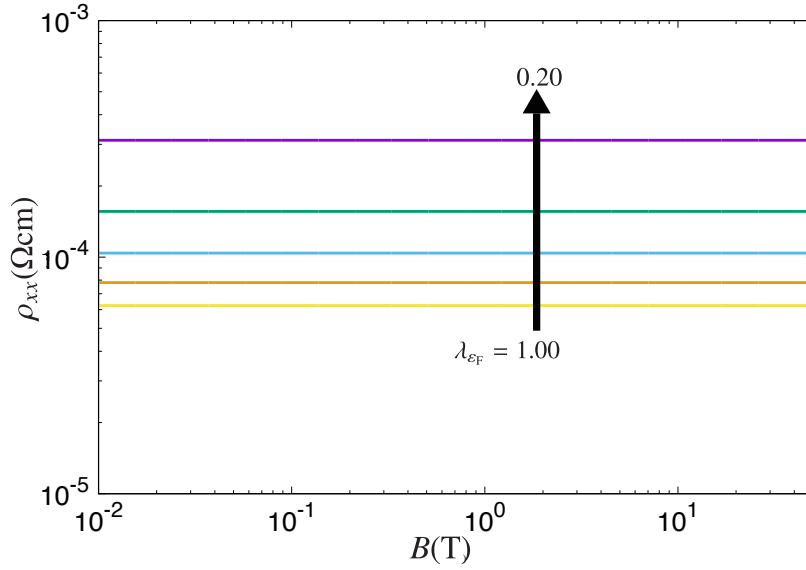


図 3.1: 磁気伝導度 σ_{ij}^D の磁場依存性: (a) σ_{xx}^D (b) σ_{yx}^D . 相対論的補正 λ_{ϵ_F} は $\lambda_{\epsilon_F} = 0.2 - 1.0$ で変化させた.

図 3.2: ρ_{xx}^D 磁場依存性 λ 変化 [129]

3.3 2 キャリア模型：ディラック電子と自由電子 ($\hat{\rho}^{D+Q}$)

この節では、ビスマスのように、エネルギーが線形分散のディラック電子とエネルギーが二乗分散の正孔をキャリアに持つ系について議論する．問題を簡単にするため、磁場 $\mathbf{B} \parallel z$ 軸とし、等方的な電子と正孔の模型を仮定する ($\mu_{ij} = \mu_0 \delta_{ij}, \nu_{ij} = \nu_0 \delta_{ij}$)． ν_{ij} は正孔の易動度を表す．仮定している系の伝導度 $\sigma_{ij}^{D+Q} = \sigma_{ij}^D + \sigma_{ij}^Q$ と抵抗 $\rho_{ij}^{D+Q} = (\hat{\sigma}^{D+Q})_{ij}^{-1}$ は、次のように与えられる²

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{D+Q} &= \sigma_{yy}^{D+Q} \\ &= \frac{e [n\lambda_{\varepsilon_F}\mu_0 + p\nu_0 + (p\lambda_{\varepsilon_F}\mu_0 + n\nu_0)\lambda_{\varepsilon_F}\mu_0\nu_0 B^2]}{(1 + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \mu_0^2 B^2)(1 + \nu_0^2 B^2)} \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\sigma_{yx}^{D+Q} = -\frac{e [(p\nu_0^2 - n\lambda_{\varepsilon_F}^2 \mu_0^2)B + (p - n)\lambda_{\varepsilon_F}^2 \mu_0^2 \nu_0^2 B^3]}{(1 + \lambda_{\varepsilon_F}^2 \mu_0^2 B^2)(1 + \nu_0^2 B^2)}. \quad (3.38)$$

²電子と正孔で磁場の寄与が正負逆になることから、正孔の伝導度 $\hat{\sigma}^Q$ は $\hat{\sigma}^Q = pe(\hat{\nu}^{-1} + \hat{B})^{-1}$ を用いている．

$$\begin{aligned}\rho_{xx}^{\text{D+Q}} &= \rho_{yy}^{\text{D+Q}} \\ &= \frac{1}{e} \frac{n\lambda_{\varepsilon_F}\mu_0 + p\nu_0 + \lambda_{\varepsilon_F}\mu_0\nu_0 B^2(n\nu_0 + p\lambda_{\varepsilon_F}\mu_0)}{(n\lambda_{\varepsilon_F}\mu_0 + p\nu_0)^2 + \lambda_{\varepsilon_F}^2\mu_0^2\nu_0^2 B^2(p-n)^2}\end{aligned}\quad (3.39)$$

$$\begin{aligned}\rho_{yx}^{\text{D+Q}} &= -\rho_{xy}^{\text{D+Q}} \\ &= \frac{1}{e} \frac{(p\nu_0^2 - n\lambda_{\varepsilon_F}^2\mu_0^2)B + \lambda_{\varepsilon_F}^2\mu_0^2\nu_0^2 B^3(p-n)}{(n\lambda_{\varepsilon_F}\mu_0 + p\nu_0)^2 + \lambda_{\varepsilon_F}^2\mu_0^2\nu_0^2 B^2(p-n)^2}.\end{aligned}\quad (3.40)$$

n, p は電子と正孔のキャリア密度, e は素電荷 ($e > 0$), 添字 “D” はディラック電子, 添字 “Q” は自由電子を表す.

図 3.3(a) は, キャリア密度 $n = p = 1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, 補正 $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.2, 1.0$, 易動度 $\mu_0 = 100 \text{T}^{-1}, \nu_0 = 10 \text{T}^{-1}$ における $\rho_{xx}^{\text{D+Q}}, \rho_{yx}^{\text{D+Q}}$ の磁場依存性を表している³. $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.2$ (実線) と $\lambda_{\varepsilon_F} = 1.0$ (破線) における $\rho_{xx}^{\text{D+Q}}$ の磁場依存性は, 定性的に同じふるまいを示すが³, 定量的には異なる値を示す. $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.2$ と $\lambda_{\varepsilon_F} = 1.0$ のグラフは, 弱磁場 ($B < 0.05 \text{T}$) で磁場に依存しない. $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.2$ における $\rho_{xx}^{\text{D+Q}}$ の大きさは, $\lambda_{\varepsilon_F} = 1.0$ の場合に比べ3倍以上大きな値を示し. 強磁場 ($B > 0.05 \text{T}$) では $\lambda_{\varepsilon_F} = 1.0$ よりも小さい値を示す. この定量的な違いは, $\rho_{xx}^{\text{D+Q}}$ の測定データを解析する際に大きく影響する. $n = p$ において, $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.2$ の $\rho_{yx}^{\text{D+Q}}$ は $\lambda_{\varepsilon_F} = 1.0$ の場合に比べ, 常に小さな値を示す. $n \neq p$ の場合, $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.2$ の $\rho_{yx}^{\text{D+Q}}$ が $\lambda_{\varepsilon_F} = 1.0$ の場合よりも小さな値を示すのは, 弱磁場領域だけである (図 3.4). $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.2$ と $\lambda_{\varepsilon_F} = 1.0$ の $\rho_{yx}^{\text{D+Q}}$ は, 約 0.6T と約 0.7T で符号が反転し, 50T 付近では定量的に同じ値を示す. 1 キャリアの時と同様に, 式 (3.39), (3.40) の弱磁場近似と強磁場近似を行うことで, これらのふるまいを理解できる.

弱磁場 ($\lambda_{\varepsilon_F}^2\mu_0^2 B^2 \ll 1, \nu_0^2 B^2 \ll 1$) において, 式 (3.39), (3.40) は次のように近似することができる

$$\rho_{xx}^{\text{D+Q}} = \frac{1}{e\nu_0} \frac{1}{(n\lambda_{\varepsilon_F}\kappa + p)} \quad (3.41)$$

$$\rho_{yx}^{\text{D+Q}} = \frac{1}{e} \frac{(p - n\lambda_{\varepsilon_F}^2\kappa^2) B}{(p + n\lambda_{\varepsilon_F}\kappa)^2}. \quad (3.42)$$

式中の κ は電子と正孔の易動度の比である ($\kappa = \mu_0/\nu_0$). 式 (3.41), (3.42) から, 明らかに λ_{ε_F} は κ を補正している. 式 (3.42) からホール係数 $R_{\text{H}}^{\text{D+Q}}$ は

$$R_{\text{H}}^{\text{D+Q}} = \frac{1}{e} \frac{p - \lambda_{\varepsilon_F}^2 n \kappa^2}{(p + \lambda_{\varepsilon_F} n \kappa)^2} \quad (3.43)$$

であることがわかる. この式は, 従来の自由電子のエネルギー分散で表される電子と正孔のホール係数 $R_{\text{H}}^{\text{Q+Q}}$ と同様な形をしている [43]

$$R_{\text{H}}^{\text{Q+Q}} = \frac{1}{e} \frac{p - n \kappa^2}{(p + n \kappa)^2}. \quad (3.44)$$

³ パラメータ $n, p, \lambda_{\varepsilon_F}, \mu_0, \nu_0$ の各値は, 現実のビスマスの値を参考に決めた.

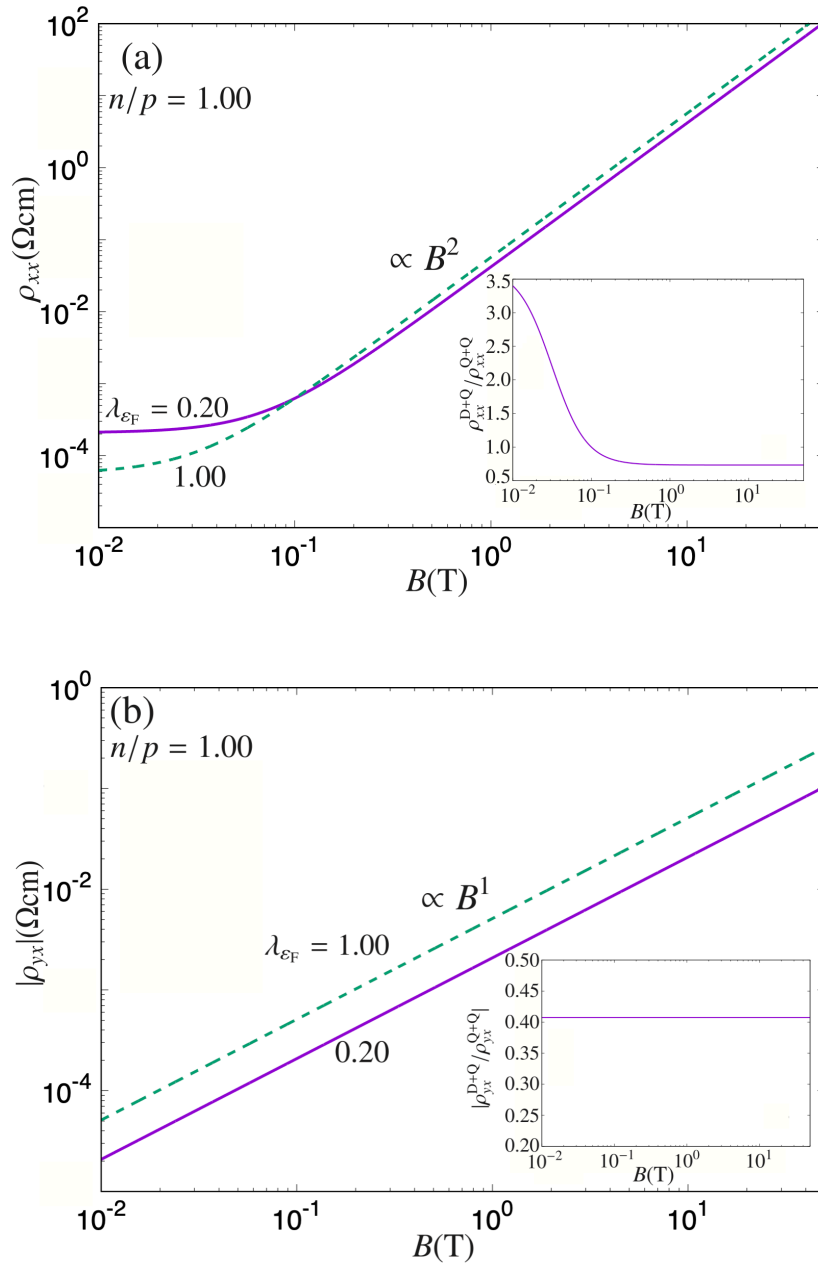


図 3.3: $n = p$ における (a) 横磁気抵抗 ρ_{xx}^{D+Q} と (b) ホール抵抗 ρ_{yx}^{D+Q} の磁場依存性：(実線) $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.2$ と (破線) $\lambda_{\varepsilon_F} = 1.0$ [129]

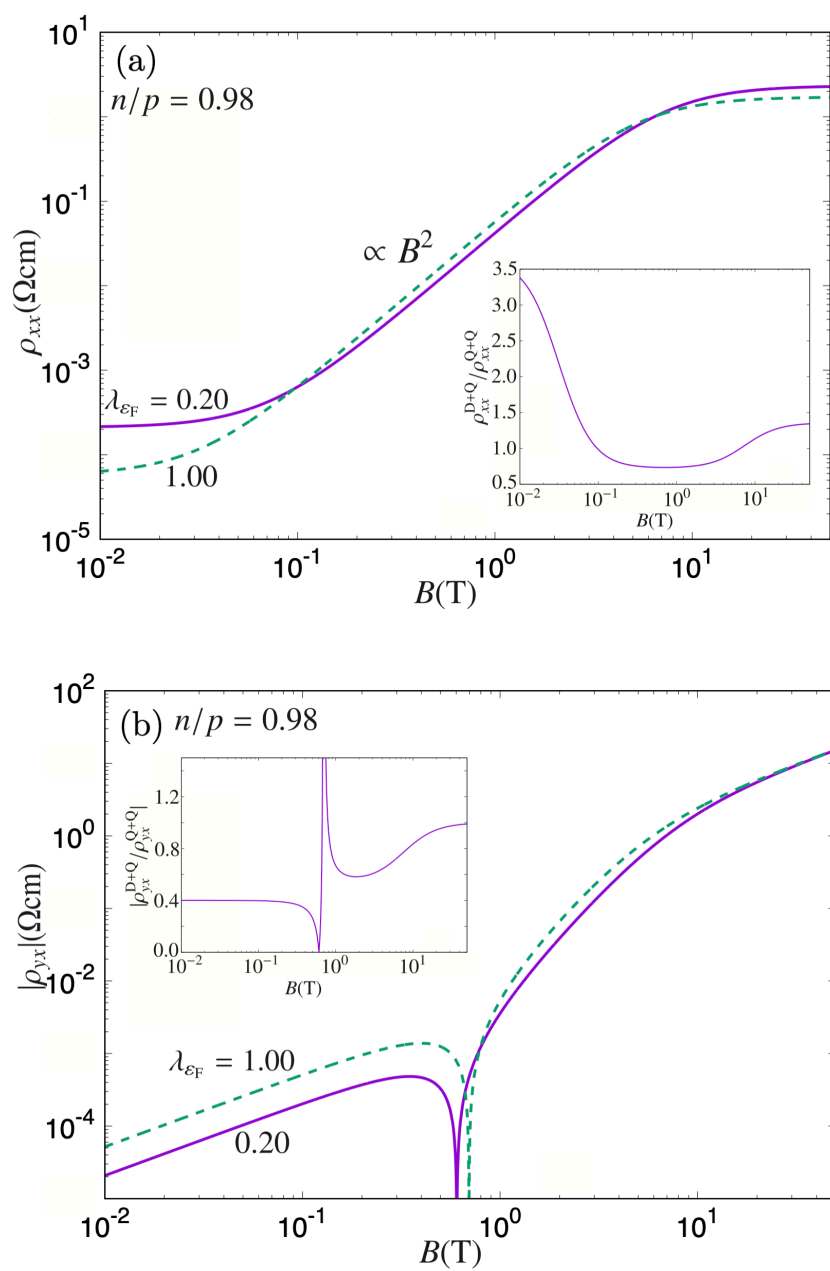


図 3.4: $n = 0.98 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, $p = 1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ における (a) 横磁気抵抗 ρ_{xx}^{D+Q} と (b) ホール抵抗 ρ_{yx}^{D+Q} の磁場依存性: (実線) $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.2$ と (破線) $\lambda_{\varepsilon_F} = 1.0$ [129]

表 3.1: 磁気抵抗 $\rho_{ij}^{D,D+Q}$ のまとめ. $\lambda_{\varepsilon_F} = \Delta/\varepsilon_F$ はディラック電子のバンド分散による補正を, $\kappa = \mu_0/\nu_0$ は電子と正孔の易動度に対する比を表す. [129]

	1 キャリア		2 キャリア			
			$n \neq p$		$n = p$	
	ρ_{xx}^D	ρ_{yx}^D	ρ_{xx}^{D+Q}	ρ_{yx}^{D+Q}	ρ_{xx}^{D+Q}	ρ_{yx}^{D+Q}
弱磁場	$\frac{1}{ne\lambda_{\varepsilon_F}\mu_0}$	$-\frac{B}{ne}$	$\frac{1}{e\nu_0} \frac{1}{p+n\lambda_{\varepsilon_F}\kappa}$	$\frac{1}{e} \frac{(p-n\lambda_{\varepsilon_F}^2\kappa^2)B}{(p+n\lambda_{\varepsilon_F}\kappa)^2}$	$\frac{1}{ne\nu_0} \frac{1}{1+\lambda_{\varepsilon_F}\kappa}$	$\frac{1}{ne} \frac{(1-\lambda_{\varepsilon_F}\kappa)B}{1+\lambda_{\varepsilon_F}\kappa}$
強磁場	$\frac{1}{ne\lambda_{\varepsilon_F}\mu_0}$	$-\frac{B}{ne}$	$\frac{1}{e\nu_0} \frac{n+p\lambda_{\varepsilon_F}\kappa}{(n-p)^2\lambda_{\varepsilon_F}\kappa}$	$-\frac{B}{(n-p)e}$	$\frac{\nu_0}{ne} \frac{\lambda_{\varepsilon_F}\kappa B^2}{1+\lambda_{\varepsilon_F}\kappa}$	$\frac{1}{ne\nu_0} \frac{(1-\lambda_{\varepsilon_F}\kappa)B}{1+\lambda_{\varepsilon_F}\kappa}$

$\kappa = \mu_0/\nu_0 = 10, n/p \sim 1.0, \lambda_{\varepsilon_F} = 0.2$ を上式に代入すると, $R_H^{D+Q} \approx 21(\text{m}^3/\text{C})$, $R_H^{Q+Q} \approx 51(\text{m}^3/\text{C})$ となり, 2 倍以上の違いが生じる. 1 キャリアのホール係数 R_H^D と異なり, ディラック電子と自由電子の正孔 R_H^{D+Q} の場合には, λ_{ε_F} の補正を考慮する必要がある.

強磁場 ($\lambda_{\varepsilon_F}^2\mu_0^2B^2, \nu_0^2B^2 \gg 1$) において, 式 (3.39) と (3.40) は

$$\rho_{xx}^{D+Q} = \begin{cases} \frac{\nu_0}{ne} \frac{\lambda_{\varepsilon_F}\kappa B^2}{1+\lambda_{\varepsilon_F}\kappa} & \text{for } n = p \\ \frac{1}{e\nu_0} \frac{n+p\lambda_{\varepsilon_F}\kappa}{(n-p)^2\lambda_{\varepsilon_F}\kappa} & \text{for } n \neq p \end{cases} \quad (3.45)$$

$$\rho_{yx}^{D+Q} = \begin{cases} \frac{1}{ne\nu_0} \frac{(1-\lambda_{\varepsilon_F}\kappa)B}{1+\lambda_{\varepsilon_F}\kappa} & \text{for } n = p \\ -\frac{B}{(n-p)e} & \text{for } n \neq p \end{cases}. \quad (3.46)$$

と近似される. 式 (3.45) から, キャリア密度 $n = p$ において ρ_{xx}^{D+Q} は B^2 で増加する. ディラック電子と自由電子のエネルギー分散は異なるにも関わらず, ρ_{xx}^{D+Q} と $\rho_{xx}^{Q+Q}(= \rho_{xx}^{D+Q}(\lambda_{\varepsilon_F} = 1.0))$ は共に B^2 に比例する. また, $n \neq p$ において, ρ_{xx}^{D+Q} は値が飽和し (図 3.4(a)), ρ_{yx}^{D+Q} は $\rho_{yx}^{Q+Q}(= \rho_{xx}^{D+Q}(\lambda_{\varepsilon_F} = 1.0))$ と同じふるまいを示す (図 3.4(b), 表 3.1). 補正 λ_{ε_F} は, 自由電子分散から定義される易動度を補正することで, 抵抗の大きさを変化させる効果を持つ.

実験結果から易動度を推定する場合, 補正 λ_{ε_F} の影響を受けることから, 式 (3.22) を用いるべきである. 自由電子に対する式 (3.23) によって推定された易動度 μ_{exp} を $1/\lambda_{\varepsilon_F}$ 倍することで, ディラック電子の本来の易動度 μ_{Dirac} が得られる ($\mu_{\text{Dirac}} = \mu_{\text{exp}}/\lambda_{\varepsilon_F}$). 例えば, ビスマスにおいて $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.215(\Delta = 7.65\text{meV}, \varepsilon_F = 35.5\text{meV}$ [14]) であることから, キャリア電子の“本来”の易動度 μ_{Dirac} は, 実験値の易動度 μ_{exp} を $1/\lambda_{\varepsilon_F} = 4.65$ 倍した値である. 具体的な値の変化については, Hartmann の値 [130] を例に, 表 3.2 としてまとめた. WTe_2 は, ディラック電子の正孔キャリアを持つ [5, 131]. 補正 $\lambda_{\varepsilon_F} \simeq 0.083$ ($\Delta \simeq 2.5$

表 3.2: $T=4.23\text{K}$ における, ビスマスの補正された易動度と緩和時間. 上段が自由電子に対する式を用いて, Hartmann が推定した値, 下段が $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.215$ によって補正された値である. [129]

	$\mu_1(\text{T}^{-1})$	$\mu_2(\text{T}^{-1})$	$\mu_3(\text{T}^{-1})$	$\tau_1 \times 10^{-10}(\text{s})$	$\tau_2 \times 10^{-10}(\text{s})$	$\tau_3 \times 10^{-10}(\text{s})$
Hartman [130]	11000	220	6780	4.4	21.6	4.4
補正後の値 μ_{Dirac}	51150	1023	31527	20	100	20

meV, $\varepsilon_F \simeq 30\text{meV}^4$) より, 正孔の“本来”の易動度は実験値を $1/\lambda_{\varepsilon_F} \simeq 12.0$ 倍した値となる.

自由電子の式を用いて解析した実験値の易動度 μ_{exp} とディラック電子本来の易動度 μ_{Dirac} は補正 λ_{ε_F} を用いて, $\mu_{\text{exp}} = \lambda_{\varepsilon_F} \mu_{\text{Dirac}}$ の関係にある. 一見すると, 従来の易動度 μ_{exp} をディラック電子の易動度と再定義し, フィッティングを行えば良いように思える⁵. しかし, 実際の磁気抵抗の解析では, 易動度 μ_{exp} の代わりにフェルミ速度 v_F とフェルミ波数 k_F を用いて解析がされることもある [3]. v_F, k_F で解析した結果はフェルミ面の寄与を考慮している. 一方, 易動度 $\mu_{\text{exp}} = e\tau/m$ はバンド端近傍で定義される. 自由電子の場合, v_F, k_F による解析と μ を用いた解析は一致するが (図 3.5(a)), ディラック電子では原理的に差異が生じる (図 3.5(b)). μ_{exp} で解析したデータを比較する場合, μ_{exp} で問題はないが, $v_F k_F$ で解析したデータと比較する場合, フェルミ面の効果を考慮するために, 補正 λ_{ε_F} を考慮して比較を行う必要がある.

⁴参考文献 [132] の “the Supplemental Material” を参照

⁵従来の自由電子の易動度を用いれば良いということ.

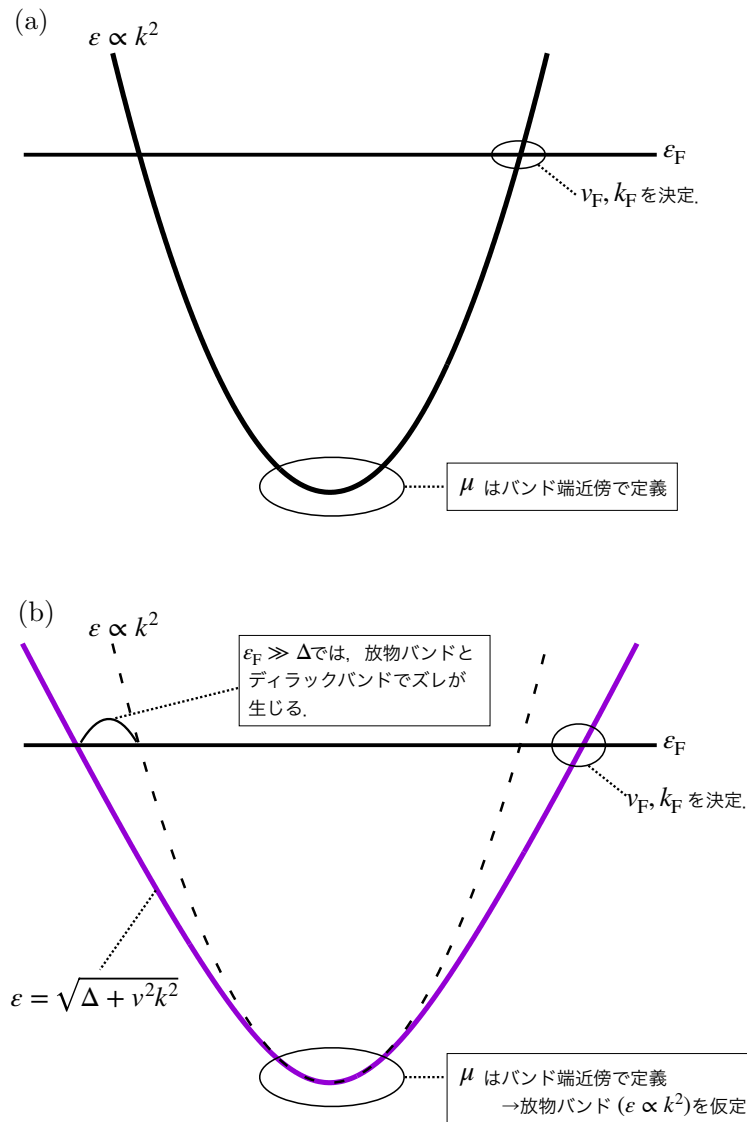


図 3.5: バンド分散と易動度の関係. 易動度はバンド端の分散で定義される. 自由電子バンド (a) では, バンド端近傍とフェルミエネルギー付近で波数の依存性に違いはない. ディラックバンド (b) では, バンド端近傍とフェルミ面付近で波数依存性に違いがある ($\epsilon_F \gg \Delta$). よって, v_F, k_F による解析と μ を用いた解析は原理的に差が生じる.

第4章 ディラック電子系半金属の磁気抵抗

ランダウ量子化が不明瞭な三次元系において、電子と正孔のキャリア密度 n, p は弱領域では磁場にほとんど依存しない。しかし、磁場の増大によって強くランダウ量子化される量子極限領域では、半金属中のキャリア密度 n, p は強く磁場に依存する。この現象は、キャリアの電氣的なバランスを中性に保とうとする性質（電荷中性条件）から生じる [12, 14, 133, 134]。キャリア密度の磁場依存性は、電子と正孔の易動度の差異が大きい物質（例：ビスマス）ほど強く現れる。この節では、磁場に依存するキャリア密度 $n(B), p(B)$ を考慮し、ディラック電子の伝導度 $\sigma_{xx}^D, \sigma_{yx}^D$ のふるまいを、ボルツマン理論に基づいて議論する。また、 $\sigma_{xx}^D, \sigma_{yx}^D$ と久保公式によるディラック電子の伝導度 $\sigma_{xx}^{KD}, \sigma_{yx}^{KD}$ を比較することで、ボルツマン理論に基づいた計算の妥当性について確認を行う。

4.1 等方的なディラック電子系半金属と強磁場中の電子状態

本研究では電子は磁場中 Wolff 模型のエネルギー（式 (2.137)）を、正孔は次式で表されるゼーマン分裂を考慮した磁場中のエネルギーを用いた

$$\varepsilon^D = \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta \left[\left(l + \frac{1}{2} + \sigma \frac{1}{2} \right) \frac{m_e}{m_c} \beta_0 B + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z} \right]} \quad (4.1)$$

$$\varepsilon_0 + \Delta - \varepsilon^Q = \left(l + \frac{1}{2} \right) \frac{m_e}{M_c} \beta_0 B + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2M_z} + \sigma \frac{g}{2} \mu_B B. \quad (4.2)$$

2Δ はバンドギャップ、 l はランダウ量子数、 σ はスピンの符号 $\sigma = \pm 1$ 、 $m_c (M_c)$ は電子（正孔）のサイクロトロン有効質量、 $m_z (M_z)$ は磁場に平行な方向の有効質量、 k_z は磁場に平行な波数成分の大きさ、 ε_0 はディラック電子のバンド端と正孔のバンド端のエネルギー差、 g は有効 g 因子、 m_e は電子の静止質量、 μ_B はボーア磁子、 β_0 は $\beta_0 = 2\mu_B$ である。ここでは、 $\Delta = 7.5 \text{ meV}$ 、 $\varepsilon_0 = 2\Delta$ 、 $g = 5$ 、 $m_c/m_e = m_z/m_e = 0.01$ 、 $M_c/m_e = M_z/m_e = 0.2$ とする。キャリア密度 $n(B)$ は式 (2.94) から

$$n(B) = \frac{eB}{2\pi^2 \hbar} \sum_{l\sigma} k_F(l, \sigma) \quad (4.3)$$

と表される¹．半金属の電荷中性条件 ($n = p$) から、電子と正孔の各ランダウ準位におけるフェルミ波数 $k_F^e(l, \sigma), k_F^h(l, \sigma)$ に対して

$$\sum_{l\sigma} k_F^e(l, \sigma) = \sum_{l'\sigma'} k_F^h(l', \sigma') \quad (4.4)$$

が成立する．特に量子極限では、最低ランダウ準位 $(l, \sigma) = (0, -1)$ にのみに電子は占有されることから、式 (4.4) は

$$k_F^e(0, -1) = k_F^h(0, -1) \quad (4.5)$$

となる．半金属のフェルミエネルギーを理論的に計算する場合は、式 (4.4) を満たすように、 ε_F を決める．式 (4.1), (4.2), (4.4) から計算されるエネルギーの磁場依存性とキャリア密度 $n(B), p(B)$ の磁場依存性を図 4.1, 4.2 に示す．図 4.1 から、電子は $B \simeq 7\text{T}$ 、正孔は $B \simeq 12\text{T}$ で量子極限に到達することがわかる．量子極限到達後、電荷中性条件 ($n = p$) を守るために ε_F は減少する²．一方、キャリア密度 $n(B), p(B)$ は式 (4.3) の係数 $eB/2\pi\hbar^2$ によって増加する (図 4.2)．キャリア密度の磁場依存性が増加と減少どちらの傾向を示すかは、 B と k_F のどちらが支配的かで決まる．以下では、式 (4.1), (4.4) から、量子極限におけるフェルミ波数を計算する．式 (4.5) が成り立つとき、式 (4.1), (4.4) 中の $\varepsilon^D, \varepsilon^Q = \varepsilon_F$ であることから $k_F^e(0, -1) = k_F^h(0, -1) = k_F$ とおくと

$$\varepsilon_F = \sqrt{\Delta^2 + \frac{\Delta\hbar^2 k_F^2}{m_z}} \quad (4.6)$$

$$\varepsilon_0 + \Delta - \varepsilon_F = \frac{1}{2} \frac{m_e}{M_c} \beta_0 B + \frac{\hbar^2 k_F^2}{2M_z} - \frac{g}{2} \mu_B B \quad (4.7)$$

が成り立つ．これを k_F について解くと次式が得られる

$$k_F = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2 \left(\zeta(B) + \frac{M_z}{m_z} \Delta \right) \pm 2M_z \sqrt{\frac{2M_z}{m_z} \Delta \zeta(B) + \left(\frac{M_z}{m_z} \right)^2 \Delta^2}} \quad (4.8)$$

$$\zeta(B) = \varepsilon_0 + \Delta + \frac{g}{2} \mu_B B - \frac{1}{2} \frac{m_e}{M_c} \beta_0 B. \quad (4.9)$$

$\zeta(B) \propto B^1$ から、 $k_F \propto \sqrt{a_0 + a_1 B}$ の形で表すことができる³．式 (4.3) から量子極限におけるキャリア密度は $n(B) \propto B k_F$ となり、 k_F よりも B の方が支配的であることがわか

¹ 式 (2.94) と式 (4.3) は一見すると同じ式に見えるが、式 (2.94) はスピンの縮退している場合、式 (4.3) はスピンの縮退していない場合のキャリア密度である．

² ε_F の変化は、電子と正孔のバンド分散が異なるために生じる．今回使用したモデルでは、量子極限において正孔の最低ランダウ準位だけが変化する．仮にフェルミエネルギーが変化しない場合、電子と正孔のフェルミ波数が一致しなくなり、電荷中性条件が破れてしまう．量子極限におけるフェルミエネルギーの磁場依存性は、電子と正孔のバンド分散が異なれば良いので、エネルギー分散が波数の2乗に比例する電子と正孔でも見られる現象である．

³ a_1, a_2 は有効質量などのパラメータで表される定数である．また、 $\pm 2M_z \sqrt{\frac{2M_z}{m_z} \Delta \zeta(B) + \left(\frac{M_z}{m_z} \right)^2 \Delta^2}$ の項については、寄与が小さいとして無視した．

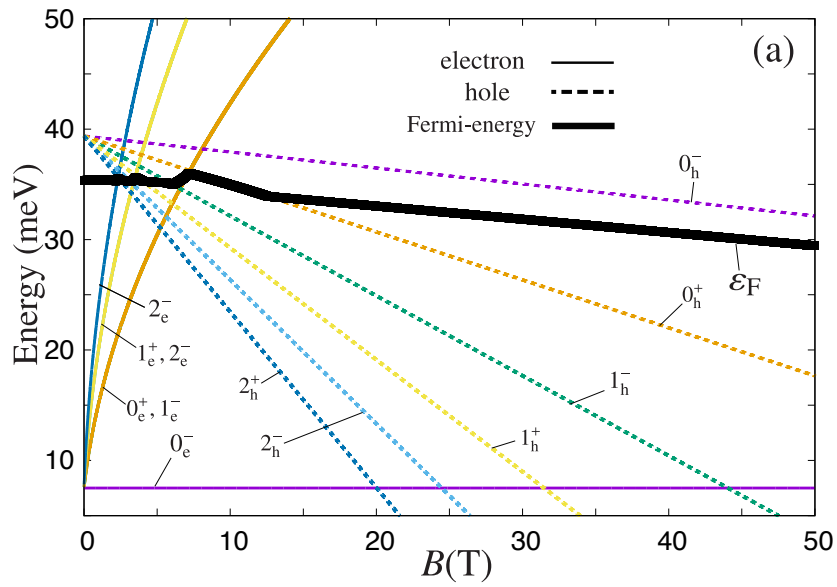


図 4.1: エネルギーの磁場依存性 [129] : (実線) ディラック電子, (破線) 正孔, (太線) フェルミエネルギー ε_F

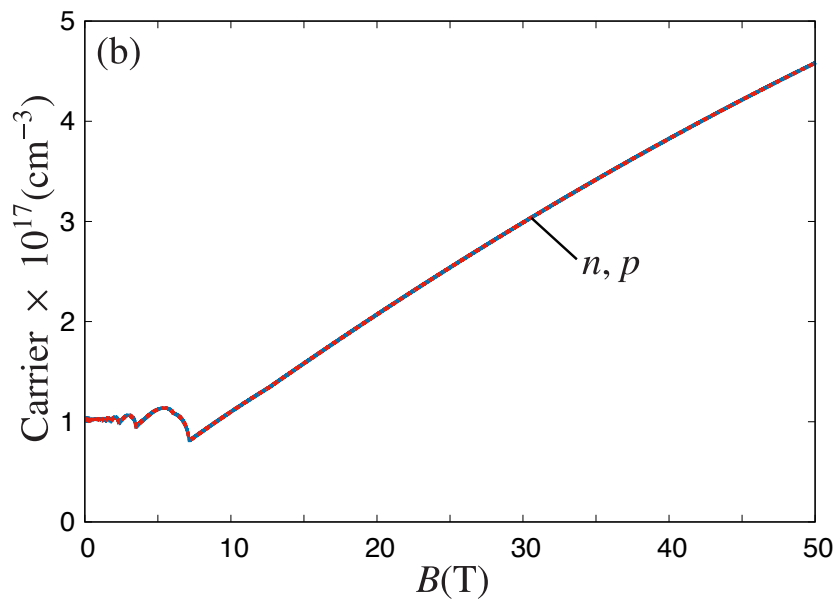


図 4.2: キャリア密度の磁場依存性 [129]

る⁴.

4.2 久保公式に基づいた磁気抵抗の計算

本論文で我々は、フェルミエネルギーとキャリア密度の磁場依存性（図 4.1, 4.2）を用いて、ボルツマン理論に基づいた磁気抵抗の計算（式 (3.37)–(3.40)）を行う。しかし、この計算は我々独自の計算であることから、得られる計算が正しいか確認が必要である。また、フェルミディラック分布関数と古典的なニュートンの運動方程式を出発点としているボルツマン方程式に基づいた計算は、半古典的な理論に基づいた計算である。量子性が顕著に現れる量子極限において、ボルツマン方程式に基づいた計算が適応可能かどうか疑問もあった。量子極限における計算は、量子論的な久保公式で行う必要があると考えられる。以上の理由から、ディラック電子に対する久保公式を用いて、磁気抵抗のふるまいを計算する。

4.2.1 選択則

磁場中における速度演算子は $\hat{v}_i = \hbar^{-1} \partial \mathcal{H} / \partial \pi_i$ である (m_c はサイクロトロン有効質量)。式 (2.82) から、 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ における自由電子の速度成分 \hat{v}_x, \hat{v}_y は

$$\hat{v}_i = \frac{\pi_i}{m_c} \quad (4.10)$$

である。生成消滅演算子 a^+, a^- を用いて \hat{v}_x, \hat{v}_y を表すと

$$\hat{v}_x = \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2m_c}}(a^+ + a^-) \quad (4.11)$$

$$\hat{v}_y = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2m_c}}(a^+ - a^-) \quad (4.12)$$

となる。式 (4.11) から、ランダウ量子数 l 、スピンの符号 σ の状態 $|l, \sigma\rangle$ の速度 $\langle l', \sigma' | \hat{v}_x | l, \sigma \rangle$, $\langle l', \sigma' | \hat{v}_y | l, \sigma \rangle$ は次式で表される

$$\langle l', k'_z, \sigma' | \hat{v}_x | l, k_z, \sigma \rangle = \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2m_c}}(\sqrt{l+1}\delta_{l'l+1} + \sqrt{l}\delta_{l'l-1})\delta_{\sigma'\sigma} \quad (4.13)$$

$$\langle l', k'_z, \sigma' | \hat{v}_y | l, k_z, \sigma \rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2m_c}}(\sqrt{l+1}\delta_{l'l+1} - \sqrt{l}\delta_{l'l-1})\delta_{\sigma'\sigma}. \quad (4.14)$$

ただし、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタを表す。式 (4.13), (4.14) から電場によるエネルギー遷移の選択則も理解することができる。式 (4.13), (4.14) は $l' = l \pm 1$ の場合だけ有限な値を持ち、許されるエネルギー遷移は $|l, \sigma\rangle \rightarrow |l \pm 1, \sigma\rangle$ であることがわかる。

⁴この結果は、2 キャリア模型の場合であり、ピスマスのように電子フェルミ面が3つ、正孔フェルミ面が1つのような場合では、キャリア密度が減少する磁場領域も存在する [12]。

4.2.2 磁気伝導度

式 (2.119), (2.142) から, 等方的な磁場中の Wollf 模型のハミルトニアンと固有関数は, 次式で表される [52, 125]

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \Delta & iv_0 \boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -iv_0 \boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

$$\psi = \sqrt{\frac{\varepsilon + \Delta}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} \phi_u \\ \frac{-iv_0(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma})\phi_u}{\varepsilon + \Delta} \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

ただし, $\sigma_i (i = x, y, z)$ はパウリスピ行列, v_0 は $v_0^2 = \Delta/m_c$ で定義される速度の大きさである [125]. 自由電子と同様に速度演算子 $\hat{v}_i = \partial \hat{\mathcal{H}} / \partial \pi_i$ から

$$\hat{v}_i = \begin{pmatrix} 0 & iv_0 \sigma_i \\ -iv_0 \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

である. 式 (4.16), (4.17) より速度成分 $\langle \psi_\xi | \hat{v}_x | \psi_\zeta \rangle$ は

$$\begin{aligned} \langle \psi_\xi | \hat{v}_x | \psi_\zeta \rangle &= \sqrt{\frac{(\varepsilon_\xi + \Delta)(\varepsilon_\zeta + \Delta)}{4\varepsilon_\xi \varepsilon_\zeta}} \\ &\times \begin{pmatrix} \phi_{\xi u}^* & \frac{iv_0 \phi_{\xi u}^* (\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma})}{\varepsilon_\xi + \Delta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & iv_0 \sigma_x \\ -iv_0 \sigma_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\zeta u} \\ \frac{-iv_0 (\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \phi_{\zeta u}}{\varepsilon_\zeta + \Delta} \end{pmatrix} \\ &= v_0^2 \sqrt{\frac{(\varepsilon_\xi + \Delta)(\varepsilon_\zeta + \Delta)}{4\varepsilon_\xi \varepsilon_\zeta}} \langle \phi_{\xi u} | \left(\frac{\sigma_x (\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma})}{\varepsilon_\zeta + \Delta} + \frac{(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sigma_x}{\varepsilon_\xi + \Delta} \right) | \phi_{\zeta u} \rangle \end{aligned} \quad (4.18)$$

となる. パウリスピに関する交換関係 $\sigma_\mu \sigma_\nu - \sigma_\nu \sigma_\mu = 2i\varepsilon_{\mu\nu\lambda} \sigma_\lambda$ と, 反交換関係 $\sigma_\mu \sigma_\nu + \sigma_\nu \sigma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}$ を用いると上式は

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\sigma_x (\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma})}{\varepsilon_\zeta + \Delta} + \frac{(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sigma_x}{\varepsilon_\xi + \Delta} \right) \\ &= \frac{(\varepsilon_\xi + \Delta) \sum_\mu \sigma_x (\pi_\mu \sigma_\mu) + (\varepsilon_\zeta + \Delta) \sum_\mu (\pi_\mu \sigma_\mu) \sigma_x}{(\varepsilon_\xi + \Delta)(\varepsilon_\zeta + \Delta)} \\ &= \frac{\frac{1}{2} [(\varepsilon_\xi + \varepsilon_\zeta + 2\Delta) \sum_\mu \pi_\mu (\sigma_x \sigma_\mu + \sigma_\mu \sigma_x) + (\varepsilon_\xi - \varepsilon_\zeta) \sum_\mu \pi_\mu (\sigma_x \sigma_\mu - \sigma_\mu \sigma_x)]}{(\varepsilon_\xi + \Delta)(\varepsilon_\zeta + \Delta)} \\ &= \frac{(\varepsilon_\xi + \varepsilon_\zeta + 2\Delta) \pi_x + i(\varepsilon_\xi - \varepsilon_\zeta) (\pi_y \sigma_z - \pi_z \sigma_y)}{(\varepsilon_\xi + \Delta)(\varepsilon_\zeta + \Delta)} \end{aligned} \quad (4.19)$$

となる． $\pi_x, \pi_y, \sigma_x, \sigma_y$ は

$$\pi_x = \frac{\pi^+ + \pi^-}{\sqrt{2}} \quad \pi_y = -i \frac{\pi^+ - \pi^-}{\sqrt{2}} \quad (4.20)$$

$$\sigma_x = \frac{1}{2}(\sigma^+ + \sigma^-) \quad \sigma_y = -\frac{i}{2}(\sigma^+ - \sigma^-) \quad (4.21)$$

と置き換えることが可能である． $\pi^+, \pi^-, \sigma^+, \sigma^-$ は、それぞれを $|n, k_z, \sigma\rangle$ に作用させると次式を満たす演算子である

$$\pi^+ |n, k_z, \sigma\rangle = \sqrt{m_c \hbar \omega_c (n+1)} |n+1, k_z, \sigma\rangle \quad (4.22)$$

$$\pi^- |n, k_z, \sigma\rangle = \sqrt{m_c \hbar \omega_c n} |n-1, k_z, \sigma\rangle \quad (4.23)$$

$$\sigma^+ |n, k_z, \sigma\rangle = \begin{cases} 0 & (\sigma = +1) \\ 2 |n, k_z, -\sigma\rangle & (\sigma = -1) \end{cases} \quad (4.24)$$

$$\sigma^- |n, k_z, \sigma\rangle = \begin{cases} 2 |n, k_z, -\sigma\rangle & (\sigma = +1) \\ 0 & (\sigma = -1) \end{cases} . \quad (4.25)$$

式 (4.19)–(4.25) から、 $\langle \psi_\xi | = \langle l', k'_z, \sigma' |$, $|\psi_\zeta\rangle = |l, k_z, \sigma\rangle$ とすると式 (4.18) は

$$\begin{aligned} \langle l', \sigma' | \hat{v}_x | l, \sigma \rangle &= \frac{v_0^2}{2} \mathcal{A}(\varepsilon_{l\sigma}, \varepsilon_{l'\sigma'}) \\ &\times \left[\sqrt{\frac{m_c \hbar \omega_c}{2}} \left[(\varepsilon_{l'\sigma'} + \varepsilon_{l\sigma} + 2\Delta) \left(\sqrt{l+1} \delta_{l'l+1} \delta_{\sigma'\sigma} + \sqrt{l} \delta_{l'l-1} \delta_{\sigma'\sigma} \right) \right. \right. \\ &+ \sigma (\varepsilon_{l'\sigma'} - \varepsilon_{l\sigma}) \left(\sqrt{l+1} \delta_{l'l+1} \delta_{\sigma'\sigma} - \sqrt{l} \delta_{l'l-1} \delta_{\sigma'\sigma} \right) \Big] \\ &\left. - \sigma (\varepsilon_{l'\sigma'} - \varepsilon_{l\sigma}) \hbar k_z \delta_{l'l} \delta_{\sigma'-\sigma} \right] \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\mathcal{A}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2 (\varepsilon_1 + \Delta) (\varepsilon_2 + \Delta)}} \quad (4.27)$$

である． \hat{v}_y についても計算を行うと

$$\begin{aligned} \langle l', \sigma' | \hat{v}_y | l, \sigma \rangle &= -i \frac{v_0^2}{2} \mathcal{A}(\varepsilon_{l\sigma}, \varepsilon_{l'\sigma'}) \\ &\times \left[\sqrt{\frac{m_c \hbar \omega_c}{2}} \left[(\varepsilon_{l'\sigma'} + \varepsilon_{l\sigma} + 2\Delta) \left(\sqrt{l+1} \delta_{l'l+1} \delta_{\sigma'\sigma} - \sqrt{l} \delta_{l'l-1} \delta_{\sigma'\sigma} \right) \right. \right. \\ &+ \sigma (\varepsilon_{l'\sigma'} - \varepsilon_{l\sigma}) \left(\sqrt{l+1} \delta_{l'l+1} \delta_{\sigma'\sigma} + \sqrt{l} \delta_{l'l-1} \delta_{\sigma'\sigma} \right) \Big] \\ &\left. - (\varepsilon_{l'\sigma'} - \varepsilon_{l\sigma}) \hbar k_z \delta_{l'l} \delta_{\sigma'-\sigma} \right] \end{aligned} \quad (4.28)$$

が得られる． $\varepsilon_{l\sigma}$ は状態 $|l, \sigma\rangle$ の固有エネルギーを表す．式 (4.13), (4.14) と式 (4.26), (4.28) をそれぞれ比較すると，ディラック電子の速度はとても複雑な式で表されている． $(\varepsilon_{l'\sigma'} - \varepsilon_{l\sigma}) \hbar k_z \delta_{l'l} \delta_{\sigma' - \sigma}$ の項は，自由電子の場合 (式 (4.13), (4.14)) には存在しない，ディラック電子特有の選択則の項である．この項は $\delta_{\sigma' - \sigma}$ を含むことから，ディラック電子は異なるスピンの固有状態間でエネルギー遷移が可能となる ($|l, \sigma\rangle \rightarrow |l, -\sigma\rangle$)．ランダウ量子数が変化するエネルギー遷移を“軌道遷移”，スピンが変化するエネルギー遷移を“スピン遷移”と呼ぶ．

式 (2.62), (2.70) から， σ_{xx}, σ_{yx} の相関関数 $\mathcal{Q}_{xx}, \mathcal{Q}_{yx}$ は⁵

$$\mathcal{Q}_{xx}^D = \frac{e^2 v^4 N_L}{8} \sum_{l, k_z, \sigma} (f_1 + f_2 + f_3) + f_4 \quad (4.29)$$

$$\mathcal{Q}_{yx}^D = i \frac{e^2 v^4 N_L}{8} \sum_{l, k_z, \sigma} (f_1 - f_2 - \sigma f_3) + i f_4 \quad (4.30)$$

$$f_1 = \mathcal{F}(\omega, \varepsilon_{l\sigma}, \varepsilon_{l+1\sigma}) (\mathcal{A}(\varepsilon_{l\sigma}, \varepsilon_{l+1\sigma}))^2 m_c \hbar \omega_c (l+1) [(\varepsilon_{l+1\sigma} + \varepsilon_{l\sigma} + 2\Delta) + \sigma(\varepsilon_{l+1\sigma} - \varepsilon_{l\sigma})]^2 \quad (4.31)$$

$$f_2 = \mathcal{F}(\omega, \varepsilon_{l\sigma}, \varepsilon_{l-1\sigma}) (\mathcal{A}(\varepsilon_{l\sigma}, \varepsilon_{l-1\sigma}))^2 m_c \hbar \omega_c l [(\varepsilon_{l-1\sigma} + \varepsilon_{l\sigma} + 2\Delta) - \sigma(\varepsilon_{l-1\sigma} - \varepsilon_{l\sigma})]^2 \quad (4.32)$$

$$f_3 = 2\mathcal{F}(\omega, \varepsilon_{l\sigma}, \varepsilon_{l, -\sigma}) (\mathcal{A}(\varepsilon_{l\sigma}, \varepsilon_{l, -\sigma}))^2 \hbar^2 k_z^2 (\varepsilon_{l, -\sigma} + \varepsilon_{l\sigma})^2 \quad (4.33)$$

$$f_4 = \frac{e^2 v^2}{2} \mathcal{F}(\hbar \omega, -\varepsilon_{0+}, \varepsilon_{0-}) \frac{(\varepsilon_{0+} + \varepsilon_{0-})}{\varepsilon_{0+}} \quad (4.34)$$

である． $\mathcal{F}(\omega, \varepsilon_1, \varepsilon_2)$ はグリーン関数部分 (式 (2.70))， f_1, f_2 は軌道遷移， f_3, f_4 はスピン遷移に相当する．ただし， f_4 は $\varepsilon = -\varepsilon_{0-}$ ($k_z = 0$) が選択則に関わる場合の寄与である．式 (4.29), (4.30) を式 (2.57) に代入することで久保公式に基づいた，ディラック電子の磁気伝導度を計算する．

4.3 磁気伝導度の比較：久保公式とボルツマン方程式

図 4.1, 4.2 のフェルミエネルギー ε_F とキャリア密度 $n(B)$ から，得られたディラック電子の伝導度 $\sigma_{xx}^D, \sigma_{yx}^D$ (式 (3.24), (3.27)) を図 4.3 に示す．⁶ 久保公式に基づいた磁気伝導度 $\sigma_{xx}^{KD}, \sigma_{yx}^{KD}$ も，図 4.3 に合わせて記載した．図 4.3 からわかるように，補正 λ_{ε_F} と磁場に依存するキャリア密度 $n(B)$ を考慮したボルツマン理論の計算と久保公式の計算は弱磁

⁵ 式 (2.62) のままだと，式 (2.70) との対応がわかりにくいので，次式を用いると良い．

$$\mathcal{Q}_{\mu\nu}(\omega) = -e^2 \sum_{i,j} \langle i | v_\mu | j \rangle \langle i | v_\nu | j \rangle \mathcal{F}(\omega, \varepsilon_i, \varepsilon_j)$$

⁶ ここでは，ディラック電子のボルツマン理論に基づいた伝導度 ($\sigma_{xx}^D, \sigma_{yx}^D$) と，久保公式に基づいた磁気伝導度 $\sigma_{xx}^{KD}, \sigma_{yx}^{KD}$ が一致することを強調するために，正孔の伝導度 $\sigma_{xx}^Q, \sigma_{yx}^Q$ は無視した．

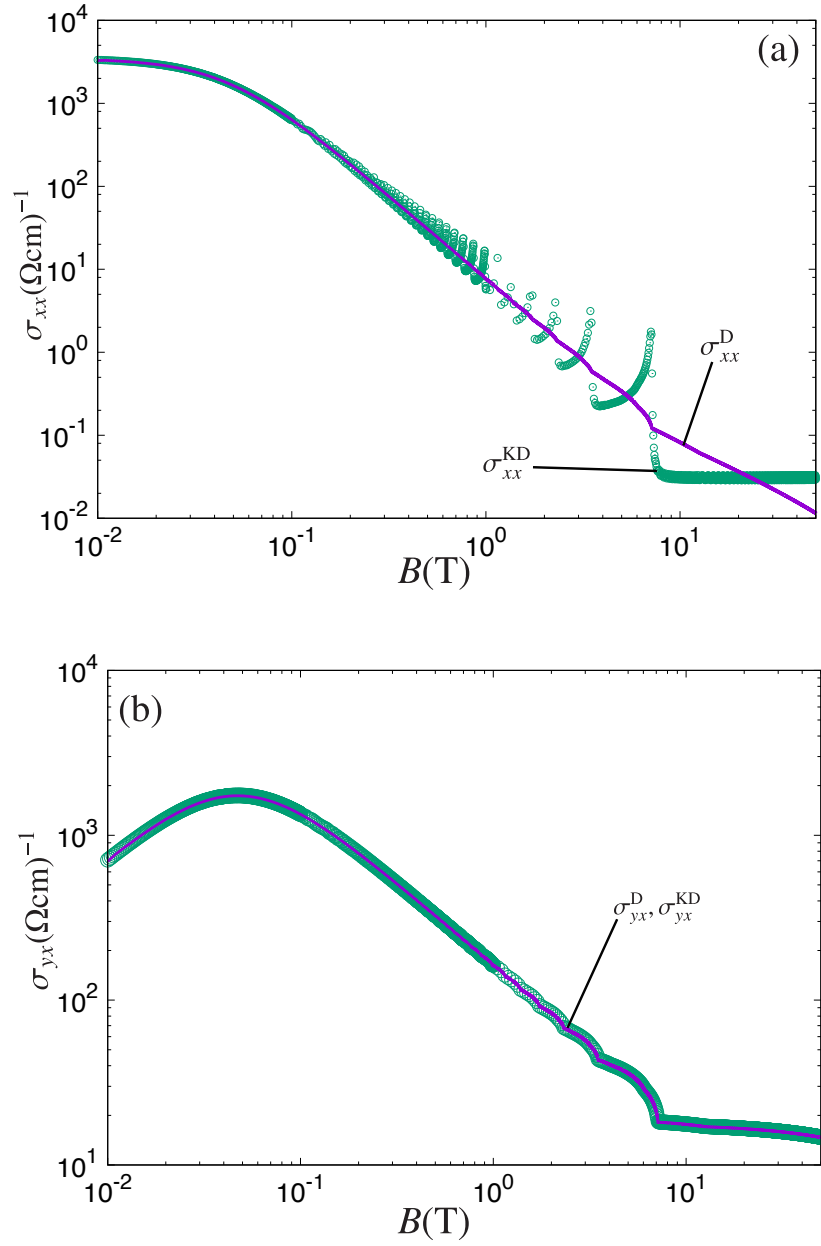


図 4.3: 磁場依存するキャリア密度を考慮したディラック電子における (a) 横磁気伝導度 $\sigma_{xx}^D, \sigma_{xx}^{KD}$, (b) ホール伝導度 $\sigma_{yx}^D, \sigma_{yx}^{KD}$ の磁場依存性. 添字 “KD” は久保公式による計算結果を表す. 計算パラメータは $\Delta = 7.5\text{meV}$, $m_c/m_e = m_z/m_e = 0.01$, $\mu = 100\text{T}^{-1}$ である. [129]

場において明らかに一致している ($\sigma_{ij}^D = \sigma_{ij}^{KD}$). 特に, ホール伝導度に関しては, 量子極限領域においても二つの値が完全に一致している ($\sigma_{yx}^D = \sigma_{yx}^{KD}$). 横磁気伝導度についても, 量子振動を無視すると, 強磁場でも値が一致する. 以上より, 補正 λ_{ε_F} とキャリア密度の磁場依存性を考慮したボルツマン理論に基づいた伝導度 σ_{ij}^D は, 量子振動を除き, 量子極限領域においても正しいと言える. 現実の物質における磁気抵抗の測定では, 熱雑音によるバンドのなまりや, 電子-電子相互作用, 電子-フォノン相互作用, 不純物効果などによって量子振動は不明瞭になる. このことから, 実験データの解析において, ボルツマン理論に基づいたアプローチは十分に有用である.

厳密に久保公式の計算ができるのであれば, 実験データの解析でボルツマン理論に基づいた計算を行う意味はないように思える. しかし, 久保公式の計算は非常に複雑で, 伝導度の磁場依存性やディラック電子の補正に関する効果を理解するのは, 困難である. これに対して, ボルツマン理論に基づいた計算は非常に明快であり, σ_{ij}^D の式から磁気抵抗のふるまいを容易に理解することができる. このような点から, ボルツマン理論の計算は実験データの解析において, 久保公式の計算よりも優れている.

4.4 量子極限における磁気抵抗

ここでは, 補正 λ_{ε_F} 及び磁場依存するキャリア密度 $n(B), p(B)$ を用いたボルツマン理論の計算から, 量子極限における磁気抵抗の性質を議論する. 図 4.2 で示したように, 量子極限における半金属のキャリア密度は強い磁場依存性を示す. この効果を考慮した磁気抵抗 ρ_{xx}^{D+Q} とホール抵抗 ρ_{yx}^{D+Q} を図 4.4 に示す. 電子が量子極限到達した $B > 7\text{T}$ で ρ_{xx}^{D+Q} は磁場に対して線形に増加する (図 4.4(a)). また, ホール抵抗 ρ_{yx}^{D+Q} の磁場依存性は, 量子極限到達後は小さくなる (図 4.4(b)). このふるまいの原因は, 次のように理解できる. 強磁場における $\rho_{xx}^{D+Q}, \rho_{yx}^{D+Q}$ の磁場依存性は, 式 (3.45), (3.46) から

$$\rho_{xx}^{D+Q} = \frac{\mu_0}{n(B)e} \frac{\lambda_{\varepsilon_F} B^2}{1 + \lambda_{\varepsilon_F} \kappa}, \quad (4.35)$$

$$\rho_{yx}^{D+Q} = \frac{1}{n(B)e} \frac{(1 - \lambda_{\varepsilon_F} \kappa) B}{1 + \lambda_{\varepsilon_F} \kappa}. \quad (4.36)$$

となる. 量子極限において, キャリア密度 $n(B)$ は磁場に対して線形に増加する ($n(B > 7\text{T}) \propto B^1$). これを式 (4.35), (4.36) に代入すると

$$\rho_{xx}^{D+Q} \propto \frac{B^2}{n(B)} = B^1 \quad (4.37)$$

$$\rho_{yx}^{D+Q} \propto \frac{B^1}{n(B)} = B^0. \quad (4.38)$$

となる.

以上のように, ディラック電子と自由電子的なふるまいをする正孔キャリアを持つ半金属の線形磁気抵抗について, 理論的に説明することができた. 本研究で導入した磁場に依

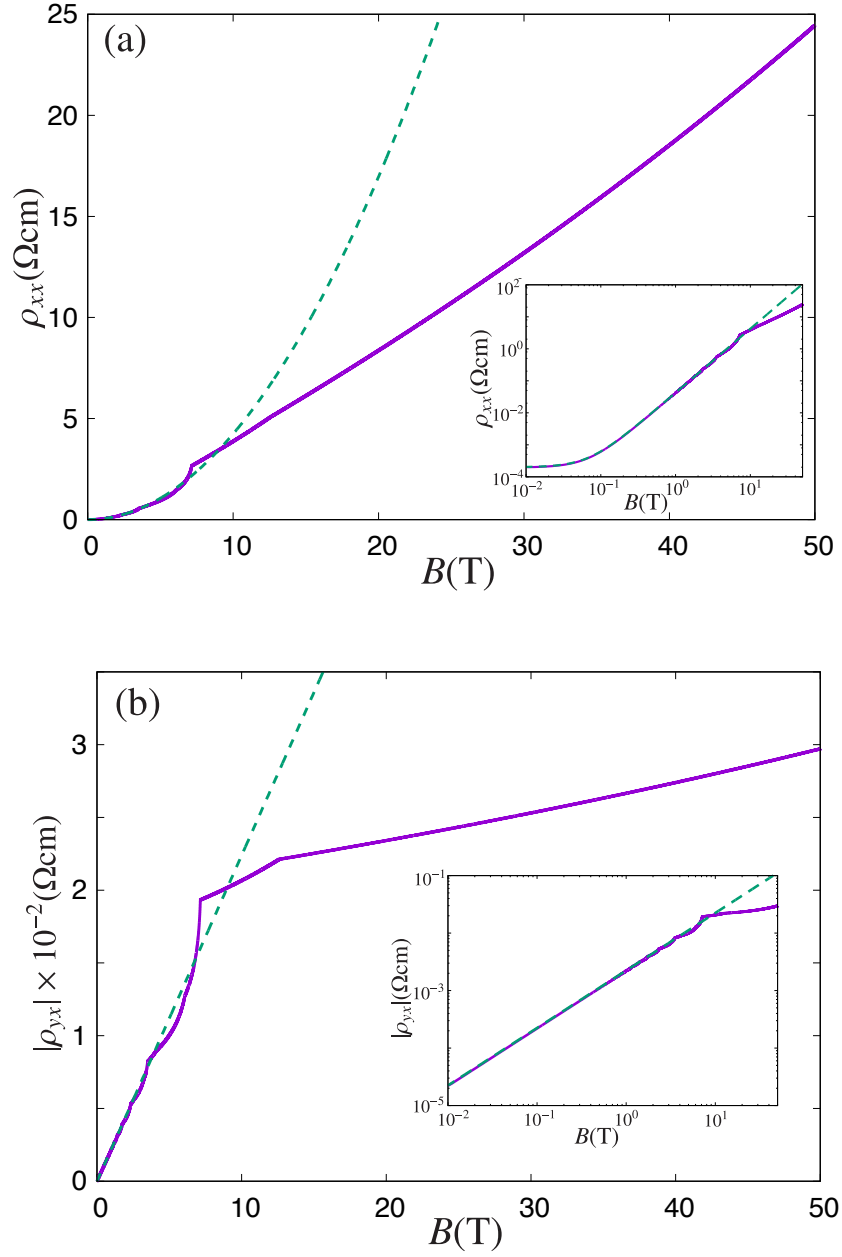


図 4.4: (a) 磁気抵抗 $\rho_{xx}^{\text{D+Q}}$ の磁場依存性, (b) ホール抵抗 $\rho_{yx}^{\text{D+Q}}$ の磁場依存性. (実線) キャリア密度 $n(B), p(B)$ 及び補正 λ_{ε_F} の磁場依存性を考慮した $\rho_{ij}^{\text{D+Q}}$ (破線) $n, p, \lambda_{\varepsilon_F}$ の磁場依存性を考慮しない $\rho_{ij}^{\text{D+Q}}$ ($n = p = 1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.2119$). 各図中の挿入図は, それぞれのグラフを両対数でプロットしたグラフである. すべての磁場で電子と正孔のキャリア密度は $n(B) = p(B)$ を満たす. 電子と正孔の易動度はそれぞれ $\mu_0 = 100 \text{T}^{-1}$, $\nu_0 = 10 \text{T}^{-1}$ とした. [129]

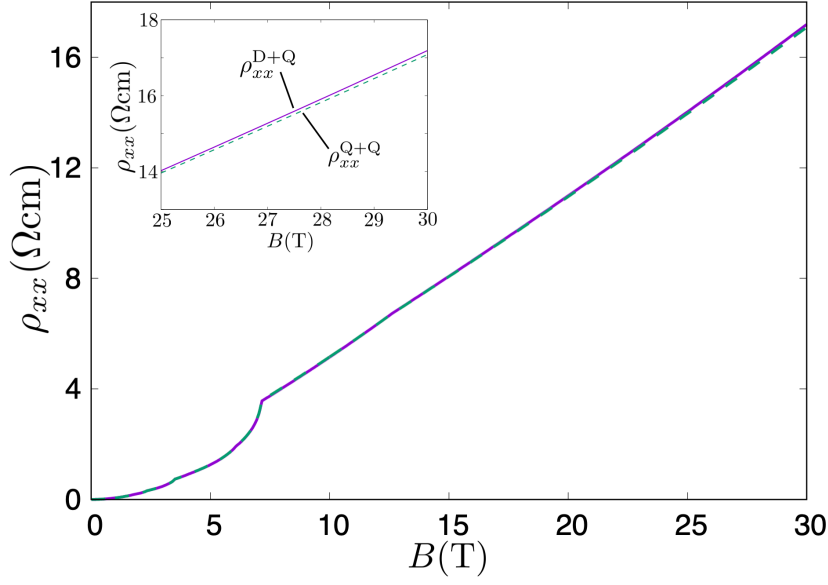


図 4.5: 量子極限における磁気抵抗の比較：(実線) ρ_{xx}^{D+Q} , (破線) ρ_{xx}^{Q+Q}

存するキャリア密度 $n(B)$ は、量子極限における半金属の一般的な性質であり、任意の半金属について対応可能である。

1969 年に Abrikosov は電荷中性条件から、量子極限におけるキャリア密度の磁場依存性を考慮していた [116]。しかし、当時の論文では、量子極限において半金属の磁気抵抗は磁場に依存しないと示唆された。2000 年と 2003 年の論文では半金属の磁気抵抗が線形に増加することを示しているが [121, 122]、キャリア密度の磁場依存性は考慮されていない。最近の研究では、Klier らがフェルミエネルギーの磁場依存性を考慮した計算を行っている [135]。しかし、彼らの理論では、キャリア密度をパラメータとして固定値にしていることから、キャリア密度の磁場依存性と線形磁気抵抗の関係について議論できない。以上のように、我々が提案した理論は先行研究における線形磁気抵抗の説明とは異なる、新たな理論と言える。[120, 136–143] また、我々の提案した理論は、弱磁場から強磁場までの磁気抵抗を連続的に見ることができるという点で、Abrikosov や Klier の理論よりも優れている。ただし、本研究では緩和時間の磁場依存性などを考慮していないなど、不十分な点も存在する。

本章の最後に、量子極限における ρ_{xx}^{D+Q} と ρ_{xx}^{Q+Q} の比較を行った (図 4.5)。磁場 ($B = 0\text{T}$) において二つの磁気抵抗 ρ_{xx}^{D+Q} , ρ_{xx}^{Q+Q} を一致させるため、 ρ_{xx}^{Q+Q} の易動度 μ に対して、 ρ_{xx}^{D+Q} の易動度 $\mu' = \mu/0.21$ とした。量子極限における λ_{EF} の磁場依存性から、 $\rho_{xx}^{D+Q} > \rho_{xx}^{Q+Q}$ という結果を得られた。ただし、その差は $B = 30\text{T}$ において、0.5% と非常に小さい。

第5章 ビスマスの磁気抵抗

前章までは等方的な模型を用いた計算を行ってきた。本章では現実のビスマスの有効模型から異方性を考慮した計算を行い、量子極限におけるビスマスの磁気抵抗のふるまいについて議論する。

5.1 磁場中ビスマスの有効模型

5.1.1 拡張ディラック模型

ビスマスの L 点電子は Cohen–Blount と Wolff によって有効模型が構築された。しかし、Wolff 模型で予測される角度分解量子振動のピーク磁場と、Behnia らのグループが報告したピーク磁場とはわずかな違いが見られた [14]。その違いは、式 (2.137) で表されるエネルギーバンドが、スピン分裂していることを示唆している。Behnia らのグループは新たに“拡張ディラック模型”を提案し、実験結果を理論的に説明した [52, 134]。

スピン分裂が磁場の一次摂動の効果によって生じたと考ええると、摂動項 H' の効果は次式で表される [74, 144–146]。

$$H' = \sigma \frac{g' \beta_0 B}{4}. \quad (5.1)$$

σ はスピンの符号， β_0 はボーア磁子の 2 倍 ($\beta_0 = 2\mu_B$)， B は磁場の大きさ， g' は付加 g 因子を表している。拡張ディラック模型は Wolff 模型 H_W と H' の和で表されるから ($H = H_W + H'$)，その固有値は

$$E_{l,\pm} = \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta \left[\left(l + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{m_e}{m_c} \beta_0 B + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z} \right]} + \sigma \frac{g' \beta_0 B}{4} \quad (5.2)$$

となる。サイクロトロン有効質量 m_c ，磁場方向の有効質量 m_z ，付加 g 因子 g' は，有効質量テンソル \hat{m} と付加 g 因子テンソル \hat{g}' を用いて，次式で表される。

$$m_z = \mathbf{b} \cdot \hat{m} \cdot \mathbf{b} \quad (5.3)$$

$$m_c = \sqrt{\frac{\det(\hat{m})}{m_z}} \quad (5.4)$$

$$g' = \mathbf{b} \cdot \hat{g}' \cdot \mathbf{b} \quad (5.5)$$

ビスマスの電子フェルミ面は、 e_1 のフェルミ面を Trigonal 軸に対して $\mp 120^\circ$ 回転させると e_2 , e_3 のフェルミ面と重なる (図 5.1). e_1 の有効質量テンソル \hat{m} と付加 g 因子テンソル \hat{g}' は次式で表される

$$\hat{m} = \begin{pmatrix} m_1 & 0 & 0 \\ 0 & m_2 & m_4 \\ 0 & m_4 & m_3 \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

$$\hat{g}' = \begin{pmatrix} g'_1 & 0 & 0 \\ 0 & g'_2 & g'_4 \\ 0 & g'_4 & g'_3 \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

上式に対して式 (2.168) の変換を行うことで、 e_2 と e_3 の有効質量テンソルと付加 g 因子テンソルを得られる [119].

(例)

$$\hat{m}_{e_2, e_3} = \hat{R}_{\text{tri}}^{-1} \left(\mp \frac{2\pi}{3} \right) \hat{m} \hat{R}_{\text{tri}} \left(\mp \frac{2\pi}{3} \right) \quad (5.8)$$

$$(5.9)$$

2011 年に報告された拡張ディラック模型は、理論計算で予測される振動ピークが実験結果とよく一致する模型である (図 5.2). その後、L 点における伝導帯と価電子帯間のバンド間結合効果と付加 g 因子に対する補正 V, V' が考慮され、最低ランダウ準位が次式のように変更された

$$E_{0,-}^{\text{inter}} = \pm \sqrt{\left(\varepsilon(k_z) - \frac{1}{4} \tilde{g}' \beta_0 B \right)^2 + (\beta_0 V B)^2}, \quad (5.10)$$

$$\tilde{g}' = g' \left(1 + V' \frac{|g'| \beta_0 B}{\Delta} \right). \quad (5.11)$$

ただし、 $\varepsilon(k_z) = \sqrt{\Delta^2 + \Delta \frac{\hbar^2 k_z^2}{m_z}}$ である. 拡張ディラック模型は、現在も実験結果をもとに更新されている [12].

5.1.2 Smith-Barraf-Rowell 模型 (SBR 模型)

1960 年に Brandt と Razumeenko が dHvA 効果を用いて正孔フェルミ面を観測した [147]. Brandt らの観測ではスピン分裂が観測されていなかったが、1964 年に Smith, Barraf, Rowell が dHvA 効果の観測を行い、正孔のスピン分裂を確認した (図 5.3) [133]. Smith らはこの論文において、実験結果をもとに有効模型を提案した (式 (4.2)). 彼らはビスマスの異方性をサイクロトロン有効質量と g 因子に反映させるために有効質量テンソルと、

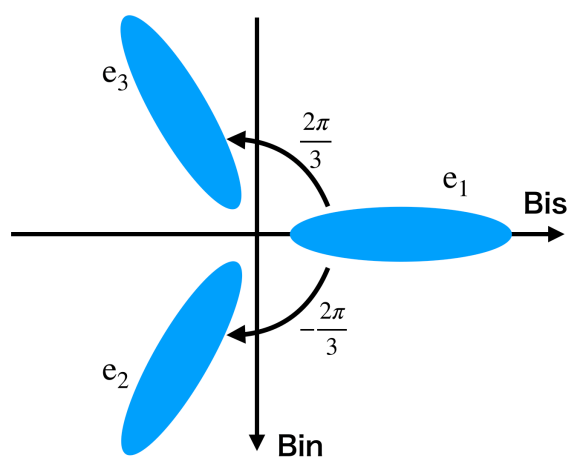


図 5.1: 電子フェルミ面の位置関係

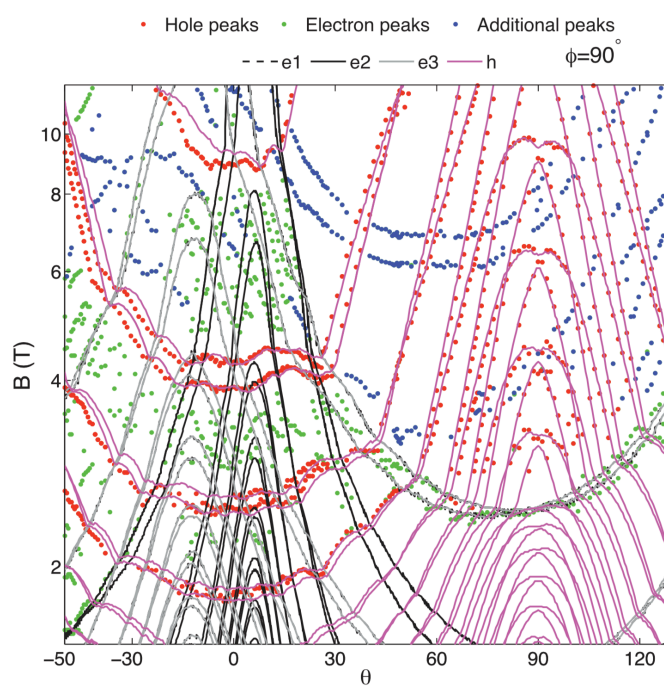


図 5.2: 拡張ディラック模型による理論的な量子振動のピークと、角度分解量子振動実験の比較 [14]

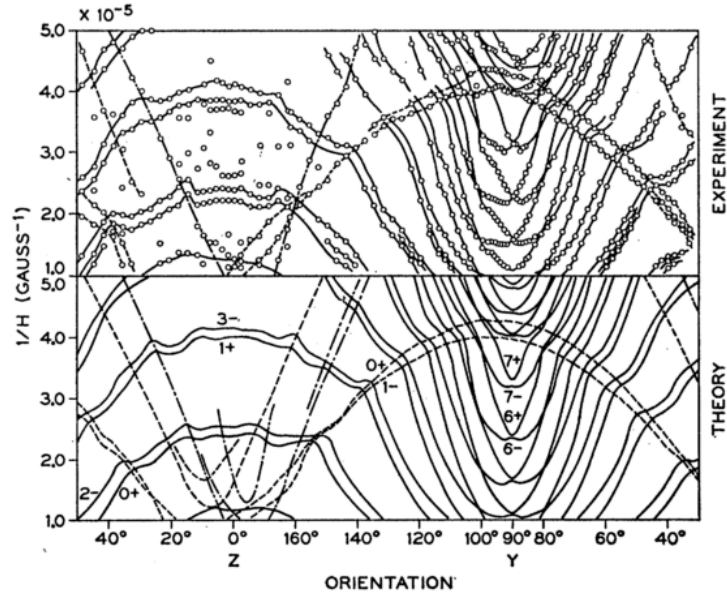


図 5.3: dHvA 効果の角度依存性 [133]

有効スピン質量テンソルを用いた，正孔フェルミ面の有効質量テンソル \hat{M} と有効スピン質量テンソル \hat{M}_s を以下に示す¹．

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} M_1 & 0 & 0 \\ 0 & M_2 & 0 \\ 0 & 0 & M_3 \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

$$\hat{M}_s = \begin{pmatrix} M_{s1} & 0 & 0 \\ 0 & M_{s2} & 0 \\ 0 & 0 & M_{s3} \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

この有効模型は，現在も磁場中ビスマスの有効模型として様々な実験結果の解析に使われている．本研究では，拡張ディラック模型（式 (5.2)）と SBR 模型（式 (4.2)）を用いて，ビスマスの電子状態を磁気抵抗の計算に反映させた．

5.2 エネルギーとキャリア密度の磁場依存性

本研究では $B < 30\text{T}$ までの実験結果をもとに，フィッティングされたパラメータ（表 5.1, 5.2），[134]．計算に使用したに示す．

¹Smith らは電子に対しても，有効スピン質量を用いた模型を使用していたが，彼らは電子に対して Lax らの模型 [148] に基づいて計算していた．

表 5.1: 電子 (e_1): 有効質量 m_i , 付加 g 因子 g' , バンド間相互作用 V, V' , バンドギャップ 2Δ [14, 134]

m_1	0.00124	g'_1	-7.26
m_2	0.257	g'_2	24.0
m_3	0.00585	g'_3	-7.92
m_4	-0.0277	g'_4	9.20
V	0.15	V'	-0.0625
$2\Delta(\text{meV})$		15.3	

表 5.2: 正孔: 有効質量 M_i , 有効スピン質量 M_{s_i} , バンドオーバーラップ E_0 [14, 134]

$M_1 = M_2$	0.0678
M_3	0.721
$M_{s1} = M_{s2}$	0.0319
M_{s3}	10000
$E_0 (\text{meV})$	38.5

表 5.3: 電子 (e_1) と正孔 (h) の易動度 μ_i, ν_i (単位: T^{-1}). 表の値は \mathbf{J}/Bin , $T=10\text{K}$, $B=0.5\text{T}$ で実験的に決められたビスマスの易動度である. e_2, e_3 の易動度は式 (2.168) を計算して得る. [9].

電子 (e_1)		正孔 (h)	
μ_1	400	$\nu_1 = \nu_2$ ν_3	60
μ_2	20		20
μ_3	350		
μ_4	-40		

表 5.1, 5.2, 式 (4.2), (5.2)-(5.13) からエネルギーとキャリア密度の磁場依存性のふるまいを調べた (図 5.4). 図 5.4 は磁場 $\mathbf{B} \parallel \text{Trigonal 軸}$ を仮定している. 正孔の最低ランダウ準位とフェルミエネルギーが磁場に比例して増加する (図 5.4(a)). このふるまいは $\mathbf{B} \parallel \text{Trigonal 軸}$ の場合特有のふるまいである. このエネルギーの磁場依存性は, 前章までの状況とは大きく異なることから, λ_{ε_F} についてビスマス特有の効果を見ることができる. 次節で λ_{ε_F} の補正を考慮したビスマスの磁気抵抗を議論する.

5.3 量子極限とディラック電子の磁気抵抗

表 5.3 に e_1, h の易動度 μ_i, ν_i を示す, e_2, e_3 の易動度は, 式 (5.8) から計算し, $\rho_{xx}^{\text{D+Q}}$ の計算では, 易動度 $\mu'_i = \mu_i/\lambda_{\varepsilon_F}$ とした. λ_{ε_F} は, ゼロ磁場中の L 点電子における補正 $\lambda_{\varepsilon_F} = 0.215$ である. よって, $\mu'_1 = 1860(\text{T}^{-1})$, $\mu'_2 = 93(\text{T}^{-1})$, $\mu'_3 = 1628(\text{T}^{-1})$, $\mu'_4 = -186(\text{T}^{-1})$ となる.

表 5.3, 図 5.4 から $\rho_{xx}^{\text{D+Q}}, \rho_{xx}^{\text{Q+Q}}$ のふるまいを調べた (図 5.5). 量子極限領域 ($B > 8\text{T}$) において, $\rho_{xx}^{\text{D+Q}}$ は $\rho_{xx}^{\text{Q+Q}}$ よりも小さい値をとり, 二つの差 $\Delta\rho_{xx} = |\rho_{xx}^{\text{Q+Q}} - \rho_{xx}^{\text{D+Q}}|$ は磁場に比例して大きくなる. これは, 次のように理解できる. $\mathbf{B} \parallel \text{Trigonal 軸}$ において, 量子極限でフェルミエネルギー (図 5.4(a)) は磁場に対して線形に増加する ($\varepsilon_F \propto B^1$). よって, 相対論補正 λ_{ε_F} は $\lambda_{\varepsilon_F} \propto B^{-1}$ となる. また, キャリア密度も磁場に線形で増加するこ

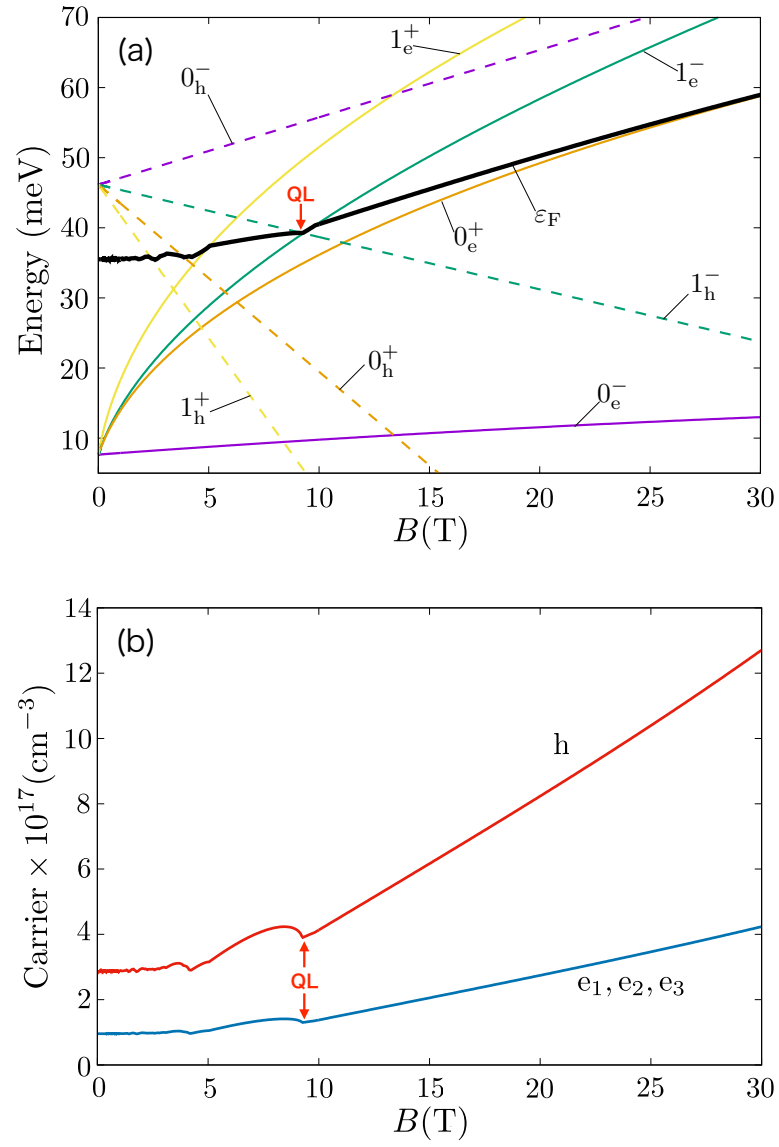


図 5.4: ビスマスのエネルギーとキャリア密度の磁場依存性 : (a) エネルギー (b) キャリア密度 ($B//\text{Trigonal}$ 軸) .

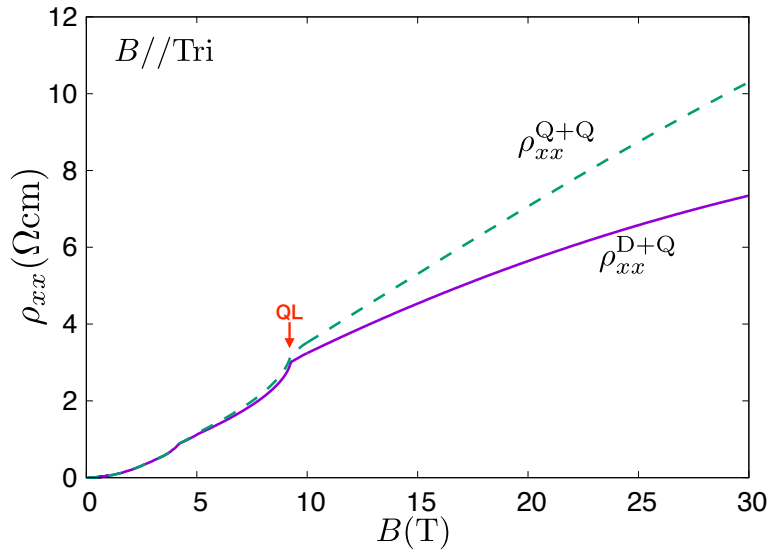


図 5.5: ビスマスにおける ρ_{xx}^{D+Q} と ρ_{xx}^{Q+Q} の比較: $\rho_{xx}^{D+Q}, \rho_{xx}^{Q+Q}$: (実線) ρ_{xx}^{D+Q} , (破線) ρ_{xx}^{Q+Q} . ρ_{xx}^{D+Q} の計算では $\mu'_{ij} = \mu_{ij}/\lambda_{\varepsilon_F}(B=0)$ を, ρ_{xx}^{Q+Q} の計算では μ_{ij} を使用した.

とから $(n(B) \propto B^1)$, ρ_{xx}^{D+Q} は, 次の磁場依存性を持つ,

$$\begin{aligned} \rho_{xx}^{D+Q} &= \frac{\nu_0}{n(B)e} \frac{\lambda_{\varepsilon_F} \kappa B^2}{1 + \lambda_{\varepsilon_F} \kappa} \propto \frac{1}{B} \frac{B^{-1} B^2}{1 + B^{-1}} \\ &\rightarrow \text{const.} \quad (B \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad (5.14)$$

相対論補正のない ρ_{xx}^{Q+Q} で計算したビスマスの磁気抵抗は, 前章と同様 $\rho_{xx}^{Q+Q} \propto B^2/n(B) = B^1$ となる. 以上より, ビスマスでは補正 $\lambda_{\varepsilon_F} = \Delta/\varepsilon_F$ の有無で, 量子極限の磁気抵抗に違いが発生することが, 本研究で明らかとなった. また, 式 (5.14) は, 半金属ビスマスの磁気抵抗が量子極限で飽和することも示している². より強磁場領域の磁気抵抗を計算すると, $B > 60\text{T}$ 以上でおよそ値が飽和することもわかった (図 5.6). 実験でも磁気抵抗の飽和は観測されている (図 5.7) [11, 17]. 従来のボルツマン理論に基づいた自由電子模型の磁気抵抗 ρ_{xx}^{Q+Q} では, 磁場に依存するキャリア密度 $(n(B))$ を用いても易動度が定数ならば, 半金属ビスマスの磁気抵抗は飽和しないはずである. ビスマスの磁気抵抗が飽和するためには, 電荷中性条件を破る必要がある ($n \neq p$). しかし, λ_{ε_F} を導入したことにより, 電荷中性条件 ($n = p$) を満たす場合でも, ビスマスの磁気抵抗が飽和するふるまいを定性的に説明できた.

図 5.6 の値は, 実験で測定されているビスマスの磁気抵抗 [11] に比べて, 値が一桁も大きい (図 5.7). これは, 計算に用いた易動度の値 (表 5.3) が, $B = 0.5\text{T}$ の測定結果か

²従来の理論では, 電荷中性条件 $n = p$ を満たす半金属は, 非飽和磁気抵抗を示す.

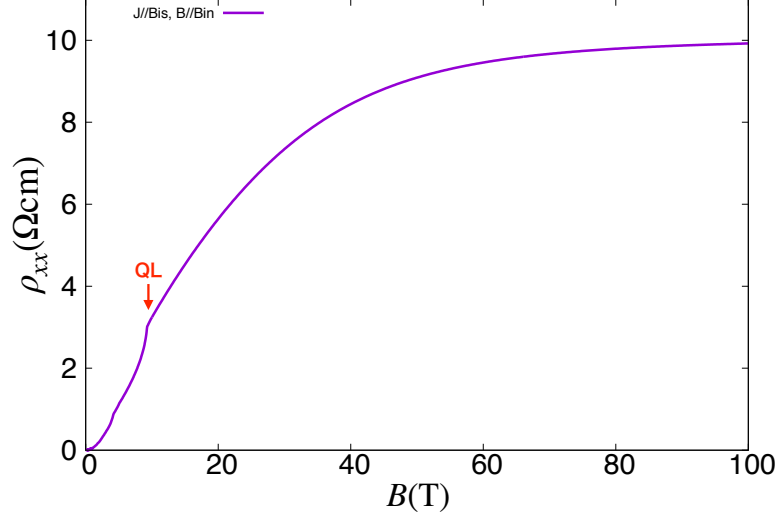


図 5.6: 超強磁場 ($B > 30\text{T}$) の磁気抵抗 $\rho_{xx}^{\text{D+Q}}$: $B > 60\text{T}$ で磁気抵抗が飽和していることがわかる.

表 5.4: 強磁場 ($B > 10\text{T}$) でフィッティングされた電子 (e_1) と正孔 (h) の易動度 μ_i, ν_i (単位: T^{-1}): この値は, 図 5.7 とビスマスの $\rho_{xx}^{\text{D+Q}}$ が一致するように, 今回調整した. ただし, 実際の計算に使用する電子の易動度 μ'_i は $\mu'_i = \mu_i / \lambda_{\varepsilon_F}$ である.

電子 (e_1)		正孔 (h)	
μ_1	52	$\nu_1 = \nu_2$	7.8
μ_2	2.6		
μ_3	45.5		ν_3 2.6
μ_4	-5.2		

らフィッティングされた易動度の値を参考にしているからである. 易動度は磁場に依存するので, $B = 0.5\text{T}$ の場合に比べて $B > 10\text{T}$ の易動度は小さな値を示すはずである.

表 5.4 の易動度 μ_i, ν_i を用いたところ, $B < 30\text{T}$ の領域で定量的にも実験と一致する計算結果を得た (図 5.8). 特に驚くべき点は, $B = 15\text{T}-30\text{T}$ で理論と実験の値がほぼ一致している点である. 相対論的な補正 λ_{ε_F} を導入したことで, $B = 15\text{T}-30\text{T}$ の磁場依存性が説明できたことを意味する, この結果は, 実験で観測される易動度の磁場依存性に, 相対論補正 λ_{ε_F} の寄与がある可能性を強く示唆している.

$n = p$ で半金属の磁気抵抗が飽和することを, 1969 年に Abrikosov も示唆していた [116]. ただし, Abrikosov の理論は久保公式に基づいて計算している点が, ボルツマン理論に基づいて計算した本研究とは異なる. また, Abrikosov の理論で議論している磁気抵抗は $\rho_{xx}^{\text{Q+Q}}$ である. このことから, ビスマスの有効模型を用いて得られた本研究の理論は, Abrikosov

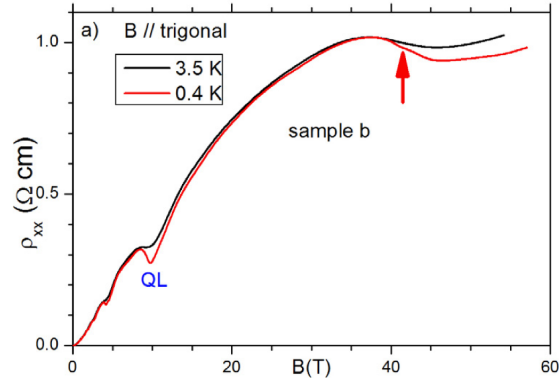


図 5.7: 実験で観測されたビスマス磁気抵抗 ($B \parallel \text{Trigonal}$ 軸).

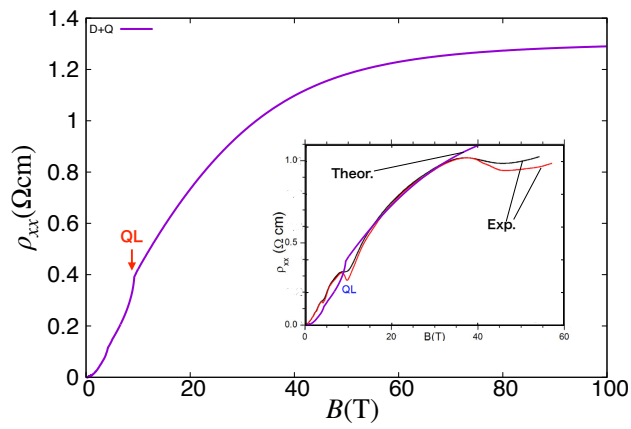


図 5.8: 表 5.4 の値を用いて計算したビスマスの ρ_{xx}^{D+Q} ($B \parallel \text{Trigonal}$ 軸). 挿入図は, 図 5.7 に計算結果を重ねた図である. およそ 15T-30T で, 計算結果と実験結果が定量的にもほぼ一致している.

の理論よりも実験に即した理論と言える。

本研究は、ディラック電子系半金属に対する磁気抵抗 $\hat{\rho}^{D+Q}$ のふるまいから、ビスマスの磁気抵抗が飽和する原因を説明することができた。しかし、本論文の計算では、磁気抵抗が飽和するのは $B > 60\text{T}$ であり、実験で飽和する磁場 $B \sim 35$ とは異なる。また、実験では磁気抵抗がわずかに減少し、再び値が増加する様子が見られており、これまでの議論で説明することができない。本研究では先行研究 [14, 134] のパラメータを用いているが、[14, 134] のパラメータは $B < 30\text{T}$ までの実験結果でフィッティングされており、 $B \parallel \text{Trigonal 軸}$ かつ $B > 30\text{T}$ でビスマスの電子状態と一致するか保証されていない。このことから、 $B > 30\text{T}$ におけるビスマスの電子状態の詳細を明らかにする必要がある。また、実験で観測された“易動度の磁場依存性”や“バレー分極”を、本研究では考慮していない [12]。これらを考慮することにより、 $B > 30\text{T}$ におけるビスマスの磁気抵抗のふるまいを説明できると期待できる。

第6章 電子状態と角度依存磁気抵抗

磁気抵抗の計算は暗に自由電子を仮定している．異方性の強い物質の中には，自由電子模型からかけ離れたフェルミ面を持つ物質も存在する．このような物質に対して，自由電子模型を仮定した磁気抵抗の公式で計算すると，物質のフェルミ面に関する情報を十分に反映させることはできない．そこで，物質のバンド計算から得られるフェルミ面をもとに，磁気抵抗の角度依存性を理論的に計算する方法を開発した．開発した手法を用いて，ビスマスとアンチモンの角度依存磁気抵抗を計算した．また，角度依存磁気抵抗計算する際に導入したフェルミ面断面積計算を応用し，アンチモンについて，de Haas-van Alphen 振動（dHvA）の角度依存性も調べた．

6.1 ビスマス

6.1.1 磁気伝導度の積分表示：弱磁場近似

ビスマスの磁気抵抗計算で使用されている磁気伝導度の式は，自由電子に対する Jones-Zener の計算（式 (2.163)～(2.166)）を元になっている [118, 119, 149]．我々は Liu-Allen 模型で計算を行うため，式 (2.163)～(2.166) を積分表示のまま磁気抵抗を計算する．

ここでは，最も単純な磁場一次までの展開について計算を行う．式 (2.163) を次のように書き直す．

$$\mathbf{j} = -\frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} \int \mathbf{v}_k [\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_k + e\tau\Omega(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_k)] \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\mathbf{k} \quad (6.1)$$

f_0 は熱平衡状態のフェルミ分布関数である（式 (2.5)）．式 (6.1) の第一項と第二項をそれ

それ $\mathbf{j}_a, \mathbf{j}_b$ とし, 磁場テンソル (式 (2.145)) を用いると [115]

$$\mathbf{j}_a = -\frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} \int \mathbf{v}_k (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_k) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\mathbf{k} \quad (6.2)$$

$$= \frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} \int \hat{V} \cdot \mathbf{E} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\mathbf{k} \quad (6.3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_b &= -\frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} e\tau \int \mathbf{v}_k \Omega(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_k) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\mathbf{k} \\ &= \frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} e\tau \int \hat{V} \cdot \hat{B} \cdot \hat{\alpha} \cdot \mathbf{E} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (6.4)$$

$$V_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_i} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_j} \quad (6.5)$$

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j} \quad (6.6)$$

となる.

$B = 0$ では, 電流密度 $\mathbf{j} = \mathbf{j}_a$ になることから, 次式が得られる.

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(B=0) &= \frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} \int \hat{V} \cdot \mathbf{E} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\mathbf{k} \\ &= \frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} \hat{V}_{ZJ} \cdot \mathbf{E} \end{aligned} \quad (6.7)$$

$$\hat{V}_{ZJ} = \int \hat{V} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\mathbf{k} \quad (6.8)$$

次に \mathbf{j}_b (式 (6.4)) を計算する. \hat{X}_{ZJ} を次式のように定義する.

$$\hat{X}_{ZJ} = \int \hat{V} \cdot \hat{B} \cdot \hat{\alpha} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\mathbf{k} \quad (6.9)$$

上式から式 (6.4) は次のように表せる

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_b &= \frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} e\tau \hat{X}_{ZJ} \cdot \mathbf{E} \\ &= \frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} e\tau \hat{X}_{ZJ} \cdot \hat{V}_{ZJ}^{-1} \cdot \hat{V}_{ZJ} \cdot \mathbf{E} \\ &= e\tau \hat{X}_{ZJ} \cdot \hat{V}_{ZJ}^{-1} \cdot \mathbf{j}(B=0). \end{aligned} \quad (6.10)$$

上式の右辺にある $\mathbf{j}(B=0)$ を \mathbf{j} と置き直すと¹, 電流密度 \mathbf{j} は,

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} \hat{V}_{ZJ} \cdot \mathbf{E} + e\tau \hat{X}_{ZJ} \cdot \hat{V}_{ZJ}^{-1} \cdot \mathbf{j} \\ \Leftrightarrow \mathbf{j} &= \left(\hat{1} - e\tau \hat{X}_{ZJ} \cdot \hat{V}_{ZJ}^{-1} \right)^{-1} \frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} \hat{V}_{ZJ} \cdot \mathbf{E} \end{aligned} \quad (6.11)$$

¹ $\mathbf{j}(B=0) \rightarrow \mathbf{j}$ の置き換えを行うことで, ドルーデ理論の式 (2.144) に対応する電流密度の関係式 (式 (6.11)) を得ることができる.

となる． $\mathbf{j} = \hat{\sigma} \mathbf{E}$ から，磁気伝導度 $\hat{\sigma}(\hat{B})$ は

$$\hat{\sigma}(\hat{B}) = \left(\hat{1} - e\tau \hat{X}_{ZJ} \cdot \hat{V}_{ZJ}^{-1} \right)^{-1} \frac{e^2\tau}{(2\pi)^3} \hat{V}_{ZJ} \quad (6.12)$$

となる．上式は $\hat{V}_{ZJ}, \hat{X}_{ZJ}$ に積分が残されており（式 (6.8), (6.9)），数値計算を行うことで任意のフェルミ面に対する磁気抵抗の計算ができる．

6.1.2 角度依存磁気抵抗

Liu-Allen 模型（図 2.18）から，式 (6.12) を用いて，ビスマスの角度依存磁気抵抗を計算する．T 点と L 点を中心に電子と正孔のフェルミ面全体が含まれる直方体（表 6.1，図 6.1）を， 128^3 の小領域に分割する．緩和時間 τ は $\tau = 1.0 \times 10^{-12}$ s，温度 T は $T = 50$ K とする．

ビスマスの角度依存磁気抵抗の理論計算（図 6.2(a), (b), (c)）と実験結果（図 6.2(d), (e), (f)）を比較する．Trigonal 軸に対して垂直な面内（Binary-Bisectrix 平面）と Binary 軸に対して垂直な面内（Trigonal-Bisectrix 平面）で磁場を回転させた計算結果（図 6.2(a), (c)）と対応する実験結果（図 6.2(d), (f)）の角度依存性は完全に一致している．これに対して，Bisectrix 軸に垂直な面内（Trigonal-Binary 平面）で磁場を回転させた計算結果（図 6.2(b)）と実験結果（図 6.2(e)）は，若干の違いがある．ビスマスのフェルミ面は Trigonal-Bisectrix 面に対して対称であることから，角度依存磁気抵抗は Trigonal 軸（図 6.2(b) では，縦軸 (Bin) の値が 0 の直線）に対して，対称になるはずである．先行研究 [9] によると，実験結果（図 6.2(e)）が理論と一致しない原因は，(1) 強磁場によるランダウ量子化の影響，(2) 3 回対称性の破れ，(3) 磁場による易動度テンソルの変化の三つである²．一方で，本研究の計算を詳しく見ると対称になっていないことがわかる（図 6.3）．これは電子のフェルミ面が 6° 傾いていることに由来する．Trigonal-Binary 面で磁場を回転させた時（ $\mathbf{B} = B_0(\sin \theta, 0, \cos \theta)$ ， θ は Trigonal 軸からの傾き角， B_0 は磁場の大きさを表す）の式 (6.12) を詳しく調べたと

表 6.1: 電子 (e_1) と正孔の積分領域： $k_{\text{bin}}, k_{\text{bis}}, k_{\text{tri}}$ は Binary-, Bisectrix-, Trigonal 軸方向の波数をビスマスの逆格子定数（ $g_{\text{Bi}} = 1.3861 \text{\AA}$ ）で規格化した値である [76]．

波数 (g_{Bi}^{-1})	電子 (e_1)	正孔 (h)
k_{bin}	± 0.005	± 0.020
k_{bis}	± 0.100	± 0.020
k_{tri}	± 0.015	± 0.050

²(1) が考えられる理由は，ビスマスが磁場に対して敏感だからだ．ビスマスの電子と正孔は比較的小さい磁場で強く量子化される． $B = 1$ T でビスマスの電子状態は，ランダウ量子化を無視できないほど強く離散化されていると考えられる．その結果，ゼロ磁場の電子状態を出発点とするボルツマン理論に基づいた磁気抵抗の計算では，説明できない角度依存性の変化が生じている可能性がある．(2) と (3) については，実験事実から示唆されている．

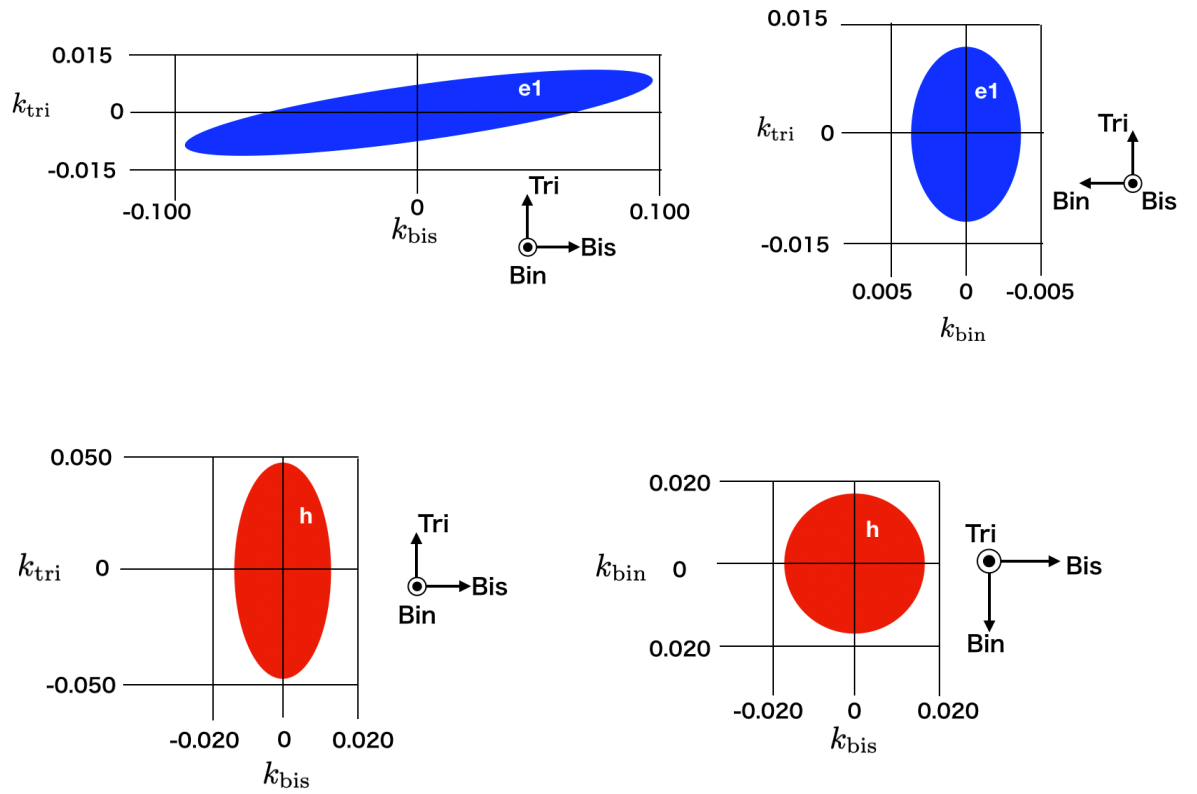


図 6.1: 積分範囲のイメージ図 : (上) 電子フェルミ面 (e_1) (下) 正孔フェルミ面 (h)

ころ、式 (6.8), (6.5), (6.6) の非対角成分が有限である場合に、式 (6.12) の対角成分は次のような磁場の関数系であることがわかった³。

$$\sigma_{ii} = \frac{a_0 + a_1 B_0 \sin \theta + a_2 B_0^2 \cos^2 \theta}{a_3 + a_4 B_0 \sin \theta + a_5 B_0^2 \cos^2 \theta}. \quad (6.13)$$

上式の分子と分母に $B_0 \sin \theta$ があることから、強磁場において $0^\circ \leq \theta < 180^\circ$ と $180^\circ \leq \theta < 360^\circ$ で若干の違いが生じたのである。

この問題を改善するためには、式 (6.8), (6.5), (6.6) の非対角成分がゼロとなる必要がある。そこで、 e_1 の軸に辺をもつ直方体 (図 6.4) で \hat{V}_{ZJ}, \hat{X} の積分計算を行った後に、Binary 軸に対して 6° 回転させる回転行列 $\hat{R}_{\text{Bin}}(6^\circ)$ を作用させ ($\hat{R}_{\text{Bin}}^{-1}(6^\circ) \hat{V}_{ZJ} \hat{R}_{\text{Bin}}(6^\circ), \hat{R}_{\text{Bin}}^{-1}(6^\circ) \hat{X} \hat{R}_{\text{Bin}}(6^\circ)$), 伝導度 $\hat{\sigma}$ を計算した⁴。複雑な計算ではあったが、得られた角度依存磁気抵抗 (図 6.5 は、Trigonal 軸 (横軸 (Tri)) に平行で縦軸 (Bin) の値が 0 の線) に対して対称性が少しだけ改善された (図 6.5)。

ここまでで、Liu-Allen 模型の電子状態から先行研究 [9] と定性的に一致する計算結果を得ることができた⁵。ただし、(i) Bisectrix 軸に対して垂直な面内で磁場を回転させた場合、対称性にならない (図 6.5), (ii) $B = 0.5\text{T}$ における計算結果 (図 6.2(a)-(c)) は実験結果に比べ値が小さい⁶という二つの問題が残っている。原因として、(A) 計算に使用した式 (6.12), (B) 緩和時間の扱い、の二つが考えられる。まず (A) について説明する。式 (6.12) は式 (6.1) から導出した。式 (6.1) は Jones-Zener の計算 (式 (2.163)) について、磁場の 1 次までの式であり、磁場の 1 次までしか考慮していないことが原因で (ii) が生じた可能性がある⁷。なお、次節で紹介する式 (6.17), (6.18) による計算で (i) の問題は解決する。次に (B) について、本研究では緩和時間 τ を $\tau = 1.0 \times 10^{12}\text{s}$ と固定した。しかし、実験的にビスマスの緩和時間 τ_{Bi} は電子と正孔で異なり、異方性が強く、磁場に依存することが示唆される⁸。このことから、より定量的に理論と実験を比較するためには、緩和時間の磁場依存性や異方性を考慮する必要がある。また、先行研究 [9] で示唆されているように、(1) ランダウ量子化、(2) 3 回対称性の破れも考慮する必要がある。ランダウ量子化の効果をより磁気抵抗の計算に反映させるためには、磁場に依存するキャリア密度

³式 (6.13) は、あくまでも一例であり、式 (6.8), (6.5), (6.6) の非対角成分のどこが有限かで、より複雑な関数にもなる。

⁴楕円体の軸に沿った直方体で積分すると、 e_1 の長軸が Bisectrix 軸と平行な場合と同じ計算をしていることになる。 $\hat{R}_{\text{Bin}}(6^\circ)$ を作用させることで、 e_1 が Binary 軸から 6° 傾いている状況を再現した。この方法で計算する場合、実質的な計算式は次のようになる

$$\hat{\sigma}(\hat{B}) = \left(\hat{1} - e\tau \hat{R}_{\text{Bin}}^{-1}(6^\circ) \hat{X}_{ZJ} \cdot \hat{V}_{ZJ}^{-1} \hat{R}_{\text{Bin}}(6^\circ) \right)^{-1} \frac{e^2 \tau}{(2\pi)^3} \hat{R}_{\text{Bin}}^{-1}(6^\circ) \hat{V}_{ZJ} \hat{R}_{\text{Bin}}(6^\circ)$$

⁵Binary-Bisectrix 面と Trigonal-Bisectrix 面内で磁場を回転させた結果は完全に一致している。(図 6.2(a), (c),(d),(f))。

⁶例えば、図 6.2(c) における $B = 0.5\text{T}$ の計算結果は、図 6.2(f) に比べ一桁程度小さい。

⁷また、Jones-Zener の計算は、弱磁場で冪級数展開した式なので、原理的に強磁場で使用することができない。

⁸厳密には、易動度 μ (電子), ν (正孔) が磁場に依存することを示唆されている。しかし、 $\mu = e\tau/m$ と仮定すると、 τ が磁場に依存することで、易動度が磁場依存性をもつ。

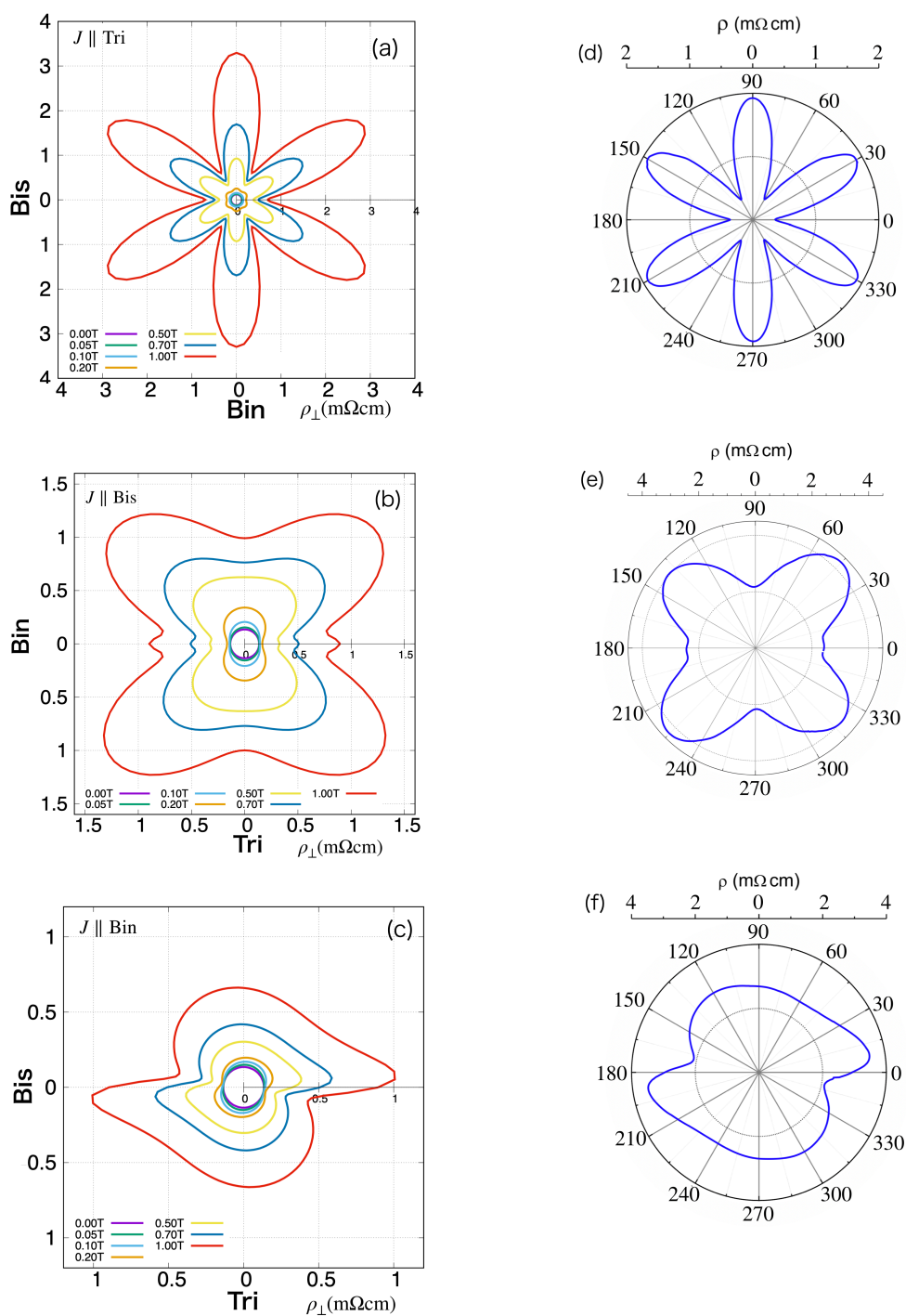


図 6.2: ビスマスの角度依存磁気抵抗 : (a, b, c) 理論計算 (d, e, f) 実験結果 ($B = 0.5 \text{ T}$) [9]. 磁場の回転面は (a, d) Binary-Bisectrix 面 (b, e) Trigonal-Binary 面 (c, f) Trigonal-Bisectrix 面である. 横軸と縦軸のラベルは, ラベルの軸と軸の向きが一致することを表す.

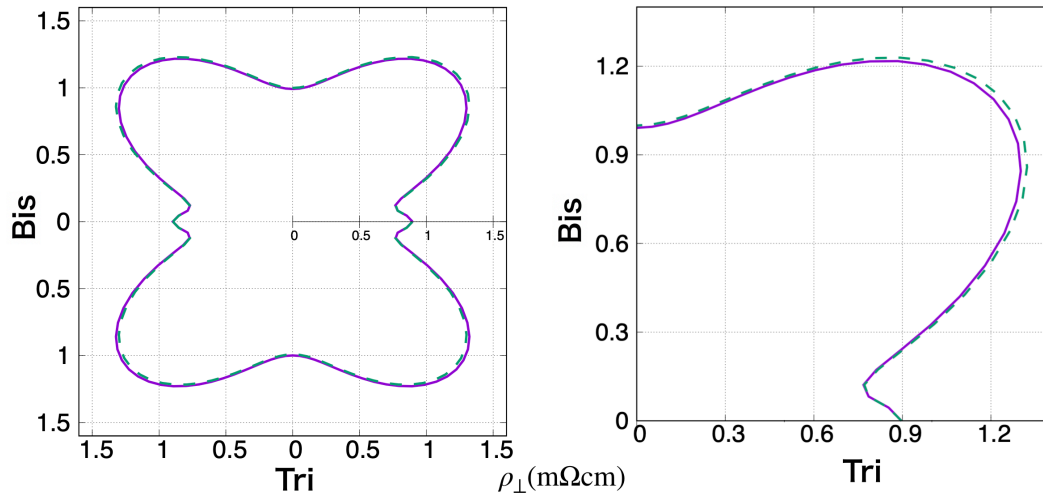


図 6.3: 図 6.2(b) の対称性の確認 ($B=1\text{T}$). (左) $\theta = 0^\circ - 360^\circ$ (右) $\theta = 0^\circ - 90^\circ$. 実線を Trigonal 軸 (縦軸 (Bin) の値が 0 の直線) に対して反転させると破線のグラフになる.

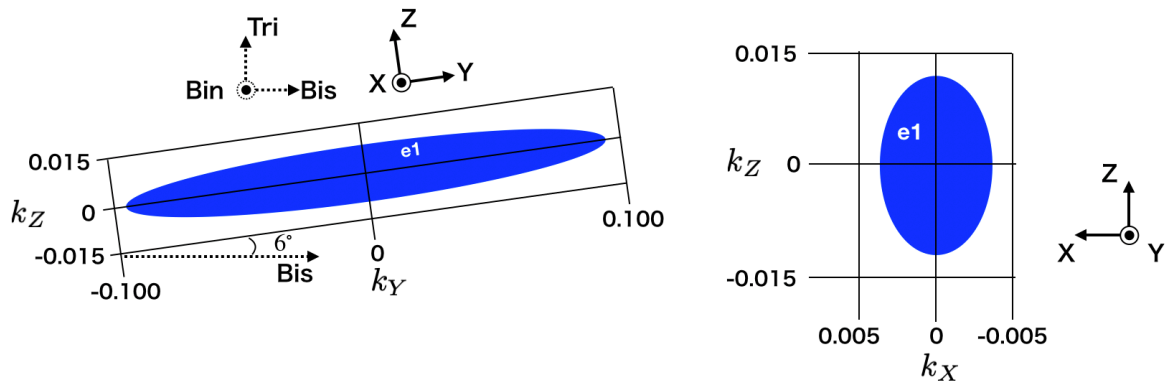


図 6.4: e_1 の軸と平行な辺を持つ直方体の積分領域: 積分する際は k_X, k_Y, k_Z が積分変数となる.

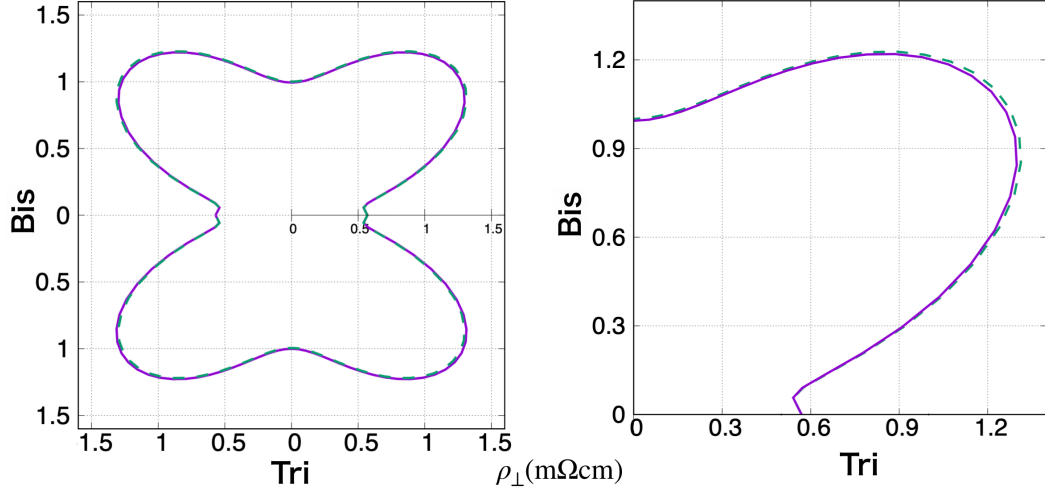


図 6.5: 図 6.4 の積分領域で再計算したビスマスの磁気抵抗 (Trigonal-Binary 面, $B = 1\text{T}$). (左) $\theta = 0^\circ - 360^\circ$ (右) $\theta = 0^\circ - 90^\circ$. 図 6.3 に比べ, 対称性が少しだけ改善された.

(式 (4.3)) と電荷中性条件 (式 (4.4)) や, 本研究で新たに導いたディラック電子の磁気伝導度 (式 (3.22)) を用いるべきである⁹.

6.2 アンチモン

6.2.1 磁気伝導度の積分表示：強磁場

式 (6.12) の計算は, 導出過程において弱磁場を仮定し, 磁場の 1 次までしか考慮していない. このことから, 式 (6.12) を強磁場中の磁気抵抗の計算に使用するのには, 不適切である. そこで, ボルツマン理論に基づいて強磁場に対して適応可能な磁気抵抗の式を再導出する.

ディラック電子の速度 \mathbf{v}^D の代わりに任意のエネルギーの速度 \mathbf{v} を式 (3.4) に代入し, 式 (3.19) の導出と同様にボルツマン方程式 (式 (2.157)) を解いていくと, 次式を得る

$$\mathbf{F} = e\tau \left(\hat{1} - e\tau \hat{B} \cdot \hat{\alpha}^{-1} \right)^{-1} \cdot \mathbf{E}. \quad (6.14)$$

$\hat{\alpha}$ は式 (6.6) で表される逆有効質量テンソルである. 電流密度 $\mathbf{j} = -ne \langle \mathbf{v} \rangle = \frac{-2e}{(2\pi)^3} \int \mathbf{v} f_k d\mathbf{k}$

⁹ 本研究では再導出した磁気伝導度の積分形 (式 (6.12)) の確認という理由から, Liu-Allen 模型でビスマスの角度依存磁気抵抗を計算した. しかし, 本来は拡張ディラック模型を用いて角度依存磁気抵抗を計算すべきである.

から,

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{-2e}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \mathbf{v}_k (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_k) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \\ &= \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{v}_k \left[\mathbf{v}_k \cdot \left[(\hat{1} - e\tau \hat{B} \cdot \hat{\alpha})^{-1} \cdot \mathbf{E} \right] \right] \end{aligned} \quad (6.15)$$

となる. $\xi_{ij} = \left[(\hat{1} - e\tau \hat{B} \cdot \hat{\alpha})^{-1} \right]_{ij}$ とおくと,

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{v}_k \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sum_i \xi_{xi} E_i \\ \sum_i \xi_{yi} E_i \\ \sum_i \xi_{zi} E_i \end{pmatrix} \\ &= \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} \left(v_x \sum_i \xi_{xi} E_i + v_y \sum_i \xi_{yi} E_i + v_z \sum_i \xi_{zi} E_i \right) \\ &= \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \begin{pmatrix} v_x v_x \sum_i \xi_{xi} E_i + v_x v_y \sum_i \xi_{yi} E_i + v_x v_z \sum_i \xi_{zi} E_i \\ v_y v_x \sum_i \xi_{xi} E_i + v_y v_y \sum_i \xi_{yi} E_i + v_y v_z \sum_i \xi_{zi} E_i \\ v_z v_x \sum_i \xi_{xi} E_i + v_z v_y \sum_i \xi_{yi} E_i + v_z v_z \sum_i \xi_{zi} E_i \end{pmatrix} \\ &= \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \begin{pmatrix} v_x v_x & v_x v_y & v_x v_z \\ v_y v_x & v_y v_y & v_y v_z \\ v_z v_x & v_z v_y & v_z v_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum_i \xi_{xi} E_i \\ \sum_i \xi_{yi} E_i \\ \sum_i \xi_{zi} E_i \end{pmatrix} \\ &= \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \begin{pmatrix} v_x v_x & v_x v_y & v_x v_z \\ v_y v_x & v_y v_y & v_y v_z \\ v_z v_x & v_z v_y & v_z v_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{xx} & \xi_{xy} & \xi_{xz} \\ \xi_{yx} & \xi_{yy} & \xi_{yz} \\ \xi_{zx} & \xi_{zy} & \xi_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.16)$$

となる. 以上より, 電気伝導度テンソル σ_{ij} は以下のような積分表示で表せる

$$\sigma_{ij} = \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \sum_{\mu} v_i v_{\mu} \left[(\hat{1} - e\tau \hat{B} \cdot \hat{\alpha})^{-1} \right]_{\mu j}. \quad (6.17)$$

v_i は速度成分 ($v_i = \hbar^{-1} \partial \varepsilon / \partial k_i$), $\hat{\alpha}$ は逆有効質量テンソルである (式 (6.6)). 式 (6.17) は磁場に対する近似を行っていないことから, 任意の磁場とエネルギーに対して適応可能な式である.

式 (6.17) を用いて連結フェルミ面の伝導度を計算すると, 振動や発散が生じてしまう. その原因は連結フェルミ面の形状にある. 連結フェルミ面 (図 1.3) のような大きく凹んだ形をもつフェルミ面では, 逆有効質量テンソル $\alpha_{ij} = \partial^2 \varepsilon / \partial k_i \partial k_j$ が波数に依存し, 正負両方の値をとる. この α_{ij} の値の変化に依存して式 (6.17) の分母部分 $|\hat{1} - e\tau \hat{B} \cdot \hat{\alpha}|$ が正

負に変化してしまい、伝導度全体として振動や発散が生じる。この問題を回避するため、Chamber [111] や Lifshitz–Azbel–Kosevichi [113] らの“フェルミ面断面の周囲に沿った軌道運動”の概念を導入し、式 (6.17) 中の逆有効質量テンソルを次式のように置いた

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} m_c^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_c^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{\parallel}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (6.18)$$

m_{\parallel} は磁場に平行な有効質量成分、 m_c は次節で説明するサイクロトロン有効質量である。式 (6.17), (6.18) で計算を行うことにより、前節にあった図 6.5 の問題も解決することもできる¹⁰。

6.2.2 サイクロトロン有効質量

ここでは、半古典的な描像におけるサイクロトロン有効質量 m_c の定義を紹介する。磁場中における電子の半古典的な運動方程式は、次式で表される。

$$\frac{d(\hbar \mathbf{k})}{dt} = -e \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{B} \quad (6.19)$$

エネルギーの時間変化は

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon \cdot \frac{d(\hbar \mathbf{k})}{dt} \\ &= -e \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{B}) = 0 \end{aligned} \quad (6.20)$$

となる。また、 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ ならば、式 (6.19) は

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \hbar k_x \\ \hbar k_y \\ \hbar k_z \end{pmatrix} = e \begin{pmatrix} -v_y B \\ v_x B \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.21)$$

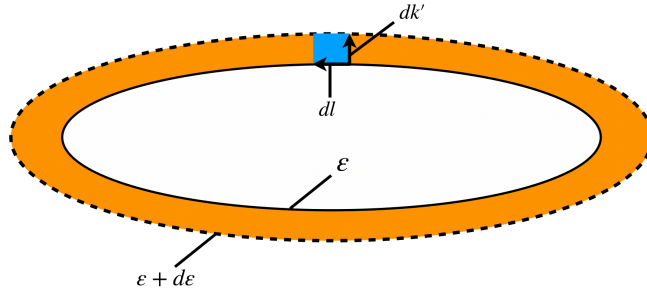
となる。式 (6.20), (6.21) から、電子はエネルギーと磁場に平行な波数成分が保存されるように運動する ($\varepsilon, k_z = \text{const.}$) [150]。

ε, k_z が保存される電子の運動は、波数空間において等エネルギー面 ($\varepsilon(\mathbf{k}) = \text{const.}$) と等 k_z 面が作る交線の軌跡である。キャリア輸送では、フェルミ面近傍の電子が主な役割を果たすことから、フェルミ面 $\varepsilon = \varepsilon_F$ と等 k_z 面で作る交線の軌道に沿った電子の運動を考えればよい。

式 (6.21) の x, y 成分から、次式が得られる [150]。

$$\left(\frac{dk_x}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dk_y}{dt} \right)^2 = \left(\frac{e}{\hbar} \right)^2 (v_x^2 + v_y^2) B^2 \quad (6.22)$$

¹⁰ 式 (6.18) で計算する場合、常に $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ となるような座標軸で計算を行う (後述)。よって式 (6.17) を計算すると、磁場に垂直な対角成分 $\sigma_{xx,yy}$ は $\sigma_{xx,yy} \sim a_1/(1 + a_2 B^2)$ と表される。

図 6.6: ε_F と $\varepsilon_F + d\varepsilon$ に挟まれた領域

波数空間における電子の軌跡の線要素 $dl = \sqrt{(dk_x)^2 + (dk_y)^2}$ から $dl/dt = \sqrt{(dk_x/dt)^2 + (dk_y/dt)^2}$ が成り立つ。磁場に対して垂直な電子の速度の大きさ $v_\perp = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ から、上式は

$$\frac{dl}{dt} = \frac{e}{\hbar} v_\perp B \quad (6.23)$$

となる。上式を dt について、書き直すと

$$dt = \frac{\hbar}{eB} \frac{dl}{v_\perp} \quad (6.24)$$

$$t = \frac{\hbar}{eB} \oint \frac{dl}{v_\perp} \quad (6.25)$$

フェルミ面が閉じているなら、電子はフェルミ面の断面の周囲に沿って周回運動を行う。式 (6.25) の積分を行うと、電子がフェルミ面に沿って運動する周期が得られる、

$$T = \frac{\hbar}{eB} \oint \frac{dl}{v_\perp}. \quad (6.26)$$

等 k_z 面において電子の軌跡が囲む領域の面積 $S(k_z)$ を考える。 $S(k_z)$ は図 6.6 のような、二つの等エネルギー面で挟まれた輪の領域を、等エネルギー面に垂直な dk' 方向に積分することで得ることが可能である。エネルギー幅 $d\varepsilon(k_z)$ は、

$$d\varepsilon(k_z) = \frac{\partial \varepsilon(k_z)}{\partial k'} dk' \quad (6.27)$$

である。電子の等 k_z 面における速度 $v_\perp = \hbar^{-1} \partial \varepsilon(k_z) / \partial k'$ と、輪の面積 $dk' \oint v_\perp^{-1} dl$ から、 ε_F で囲まれた面積 $S(\varepsilon_F, k_z)$ は次式で表される

$$\begin{aligned} S(\varepsilon_F, k_z) &= \int dk' \oint \frac{dl}{v_\perp} \\ &= \frac{1}{\hbar} \int d\varepsilon \oint \frac{dl}{v_\perp} \end{aligned} \quad (6.28)$$

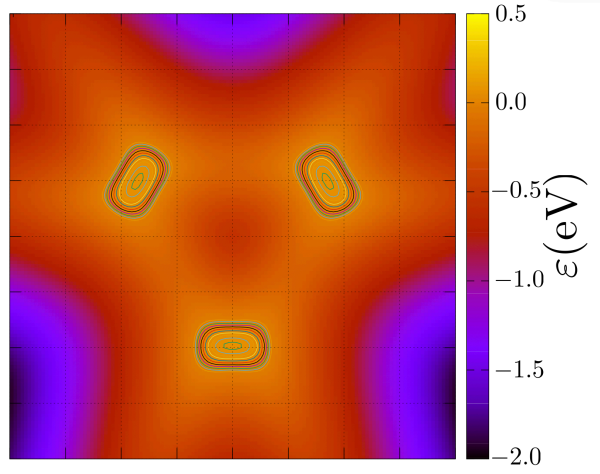


図 6.7: 連結フェルミ面の断面 (BinBis 平面)

式 (6.28) と式 (6.26) から, 周期 T は次式で表される

$$T = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\partial S(\varepsilon_F, k_z)}{\partial \varepsilon}. \quad (6.29)$$

$T\omega_c = 2\pi$ と $\omega_c = eB/m_c$ より, サイクロトロン有効質量 m_c が次式で表される [151],

$$m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S(\varepsilon_F, k_z)}{\partial \varepsilon}. \quad (6.30)$$

式 (6.30) の右辺にフェルミ面の断面積 $S(\varepsilon_F, k_z)$ があることから, m_c はフェルミ面の異方性を含んでいる. 式 (6.17), (6.18), (6.30) を用いることで, 任意フェルミ面について異方性考慮した伝導度の計算を行うことができる.

6.2.3 フェルミ面断面積の計算

サイクロトロン有効質量の計算には, フェルミ面の断面積の計算が必要になる. 本研究では画像処理の技術を応用することで, フェルミ面断面積の計算を行う. 本節では, アンチモンのフェルミ面 (図 6.7) の断面積計算を例に, 使用した画像処理技術について紹介する. 本節を記述するにあたり, [152–154] を参考にしている.

2 値化処理

本研究では, 閾値による 2 値化処理を行った. この方法は, 画像のある点における色の濃さについて, 閾値に対する大小で 2 色に塗り分ける方法である (図 6.8). 本研究では, バンドのエネルギーを画像の色として捉え, フェルミエネルギー ε_F を閾値とする (図 6.8).

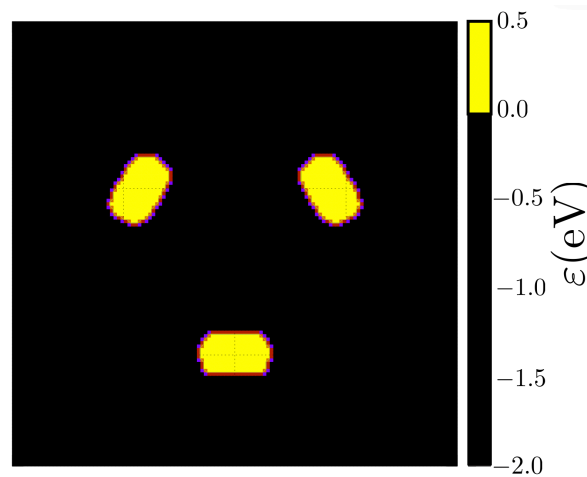


図 6.8: 2 値化処理された連結フェルミ面の断面 (BinBis 平面): 連結フェルミ面は正孔フェルミ面なので, 閾値 ($\varepsilon_F = 0\text{meV}$) よりも大きい領域が連結フェルミ面の断面である.

領域成長法

フェルミ面を等 k_z 面毎に切ると, ε_F で囲まれた領域が複数存在する場合がある (図 6.8). 人間ならば図 6.8 を一目見るだけで孤立した三つの領域を認識することができる. しかし, コンピューターは人間のように領域を識別することはできず, 図 6.8 のままでは 3 つの断面を同じ領域として認識してしまい, 断面積毎の面積を計算することが困難である. コンピューターが領域毎の面積を計算するためには, 領域それぞれに番号をつけ, 区別する処理が必要となる. この処理を “ラベリング” と呼ぶ. 本研究では, ラベリングを行うために領域成長法 (Region Growing 法) を用いて, 断面積を区別した (図 6.9).

領域成長法とは, 画像の特定の情報について条件を指定し, その条件を満たす空間的に連続する領域を番号付する方法である. 短時間で領域の抽出が可能であるという利点がある. 領域成長法を用いたラベリングのプロセスは, 以下の通りである.

1. 画像のコピー先を用意し, 2 値化処理された元画像のデータをラスタースキャン¹¹する (図 6.10(a)).
2. フェルミ面の内側にある点を見つけたら, コピー先画像の同じ座標に番号をつける (図 6.10(b)).

¹¹ 1 次元方向に画像をスキャンしてスキャン線を作り, 垂直方向にスキャン線を移動させ 2 次元の画像を得る方法.

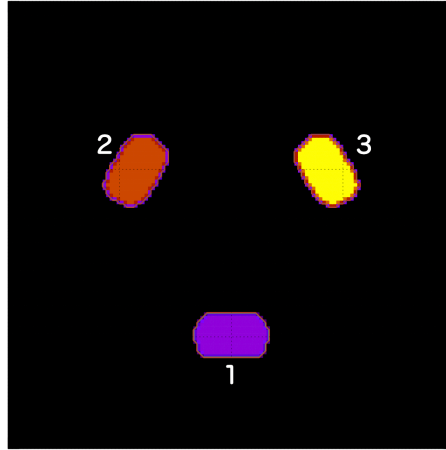


図 6.9: ラベリングされた連結フェルミ面の断面 (BinBis 平面): ラベリングされた領域ごとに異なる色で塗られている. 紫=1, 赤=2, 黄=3

3. 元画像のデータを削除し, 隣接する4つの格子点¹²についてフェルミ面の内側にあるかどうか調べる (図 6.10(c)).
4. 手順2, 3を繰り返し, 連結した領域がなくなるまで繰り返す. (図 6.10(d)).
5. 最初にフェルミ面の内側と発見した点から, 元画像のラスタースキャンを再開する (図 6.10(e)).
6. 再びフェルミ面を発見したらコピー先の座標に新たな番号を付け, 手順2, 3を繰り返す (図 6.10(f)).
7. 元画像の全ての点に関してラスタースキャンが終了したら, プロセスを終了する (図 6.10(g)).

上述の1~7を行うと, 図 6.9 が得られる. 図 6.9 の領域毎に格子点の総数をカウントし, フェルミ面の各断面積を計算した.

6.2.4 連結フェルミ面と6楕円体模型の磁気抵抗

式 (6.17), (6.18), (6.30) から, 連結フェルミ面 (図 1.3(a)) の角度依存磁気伝導度を計算する. 計算条件は次の以下の通りである. T 点を中心に $\pm 0.25g_{\text{Sb}}$ の立方体領域を 200^3 の領域に分割し, 緩和時間 τ と温度 T は, それぞれ $\tau = 10^{-12}\text{s}$, $T = 50\text{K}$ とする. 電流

¹²隣接する上下左右4つの点について調べることを4連結, 隣接する8つの点について調べることを8連結という.

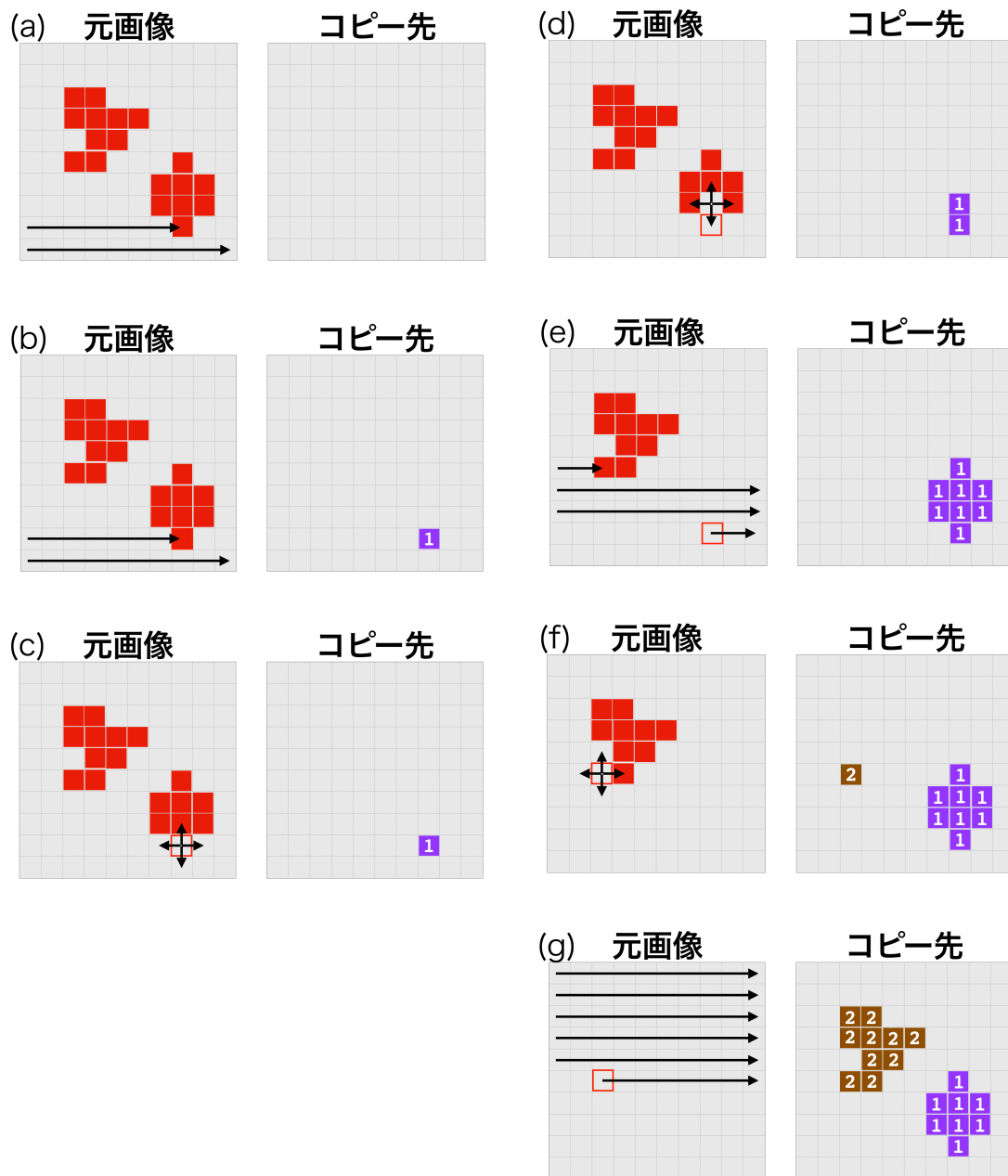


図 6.10: 領域成長法を用いた, 領域のラベリング手順.

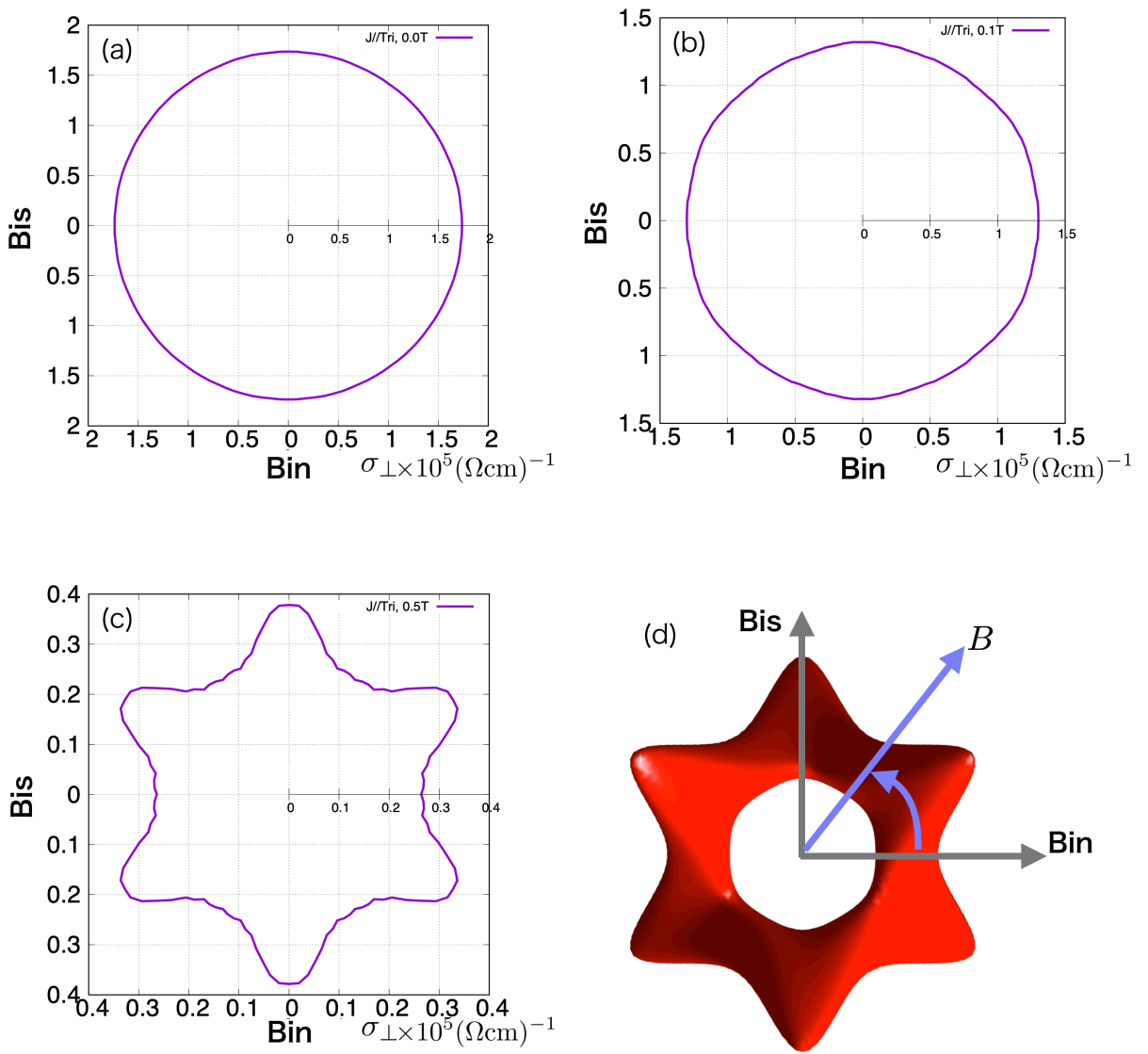


図 6.11: 連結フェルミ面の横磁気伝導度 σ_{\perp} の角度依存性：磁場の大きさ $B = 0.0 \text{ T}$ (a), 0.1 T (b), 0.5 T (c). 磁場は BinBis 面内で回転 (d).

の方向は Trigonal 軸と平行 ($J \parallel \text{Tri}$ 軸), 磁場は Trigonal 軸に垂直な面内で回転させる (図 6.11(d)). g_{Sb} はアンチモンの逆格子定数 $g_{\text{Sb}} = 1.4610 \text{ \AA}$ である [76].

計算結果を図 6.11 に示す. $B = 0 \text{ T}$ では角度依存性を示さないが, 磁場の増加に従って強い角度依存性を示す (図 6.11). また, 磁気抵抗の角度依存性は, 6 回対称性を持ち, $\phi = 30^\circ, 90^\circ, 150^\circ, 210^\circ, 270^\circ, 330^\circ$ で最大値をとる. これは, 連結フェルミ面の対称性が反映されている. 連結フェルミ面は Trigonal 軸に対し, 3 回対称性 (C_3) を持つ (図 6.11(d)). 磁場に対して垂直なフェルミ面の断面は, $+B$ と $-B$ で同じであるから, $\sigma_{\perp}(B) = \sigma_{\perp}(-B)$ となる (C_2). フェルミ面の 3 回対称性と磁場に対する 2 回対称性から, 磁気伝導度の対称性は $C_6 (= C_2 C_3)$ となり, 角度依存性として現れる.

連結フェルミ面の磁気伝導度と比較するため, 楕円体を Trigonal 軸の周囲に 6 つ配置した模型 (図 6.12) の磁気伝導度を計算する. 各楕円体は Trigonal 軸に対して 30° 傾いている. この傾きは, 連結フェルミ面の突起が Trigonal 軸に対して 24° 傾いているから [76],

それに合わせるために楕円体模型も 30° 傾けた．使用した 6 楕円体模型のエネルギーを以下に示す¹³．

$$P_{1,4} : \frac{\varepsilon_{1,4}}{\varepsilon_{\text{Sb}}} = \frac{0.06}{\varepsilon_{\text{Sb}}} - 4K_x^2 + \frac{3}{4}[\sqrt{3}(K_y \mp \frac{3}{20}) + (K_z \pm \frac{1}{5})]^2 + \frac{25}{300}[-(K_y \mp \frac{3}{20}) + \sqrt{3}(K_z \pm \frac{1}{5})]^2 \quad (6.31)$$

$$P_{2,5} : \frac{\varepsilon_{2,5}}{\varepsilon_{\text{Sb}}} = \frac{0.06}{\varepsilon_{\text{Sb}}} - [-(K_x \pm \frac{3\sqrt{3}}{40}) + \sqrt{3}(K_y \pm \frac{3}{40})]^2 + \frac{3}{4}[\frac{\sqrt{3}}{2}(-\sqrt{3}(K_x \pm \frac{3\sqrt{3}}{40}) - (K_y \pm \frac{3}{40})) + (K_z \pm \frac{1}{5})]^2 + \frac{25}{300}[-\frac{1}{2}(-\sqrt{3}(K_x \pm \frac{3\sqrt{3}}{40}) - (K_y \pm \frac{3}{40})) + \sqrt{3}(K_z \pm \frac{1}{5})]^2 \quad (6.32)$$

$$P_{3,6} : \frac{\varepsilon_{3,6}}{\varepsilon_{\text{Sb}}} = \frac{0.06}{\varepsilon_{\text{Sb}}} - [-(K_x \mp \frac{3\sqrt{3}}{40}) - \sqrt{3}(K_y \pm \frac{3}{40})]^2 + \frac{3}{4}[\frac{\sqrt{3}}{2}(\sqrt{3}(K_x \mp \frac{3\sqrt{3}}{40}) - (K_y \pm \frac{3}{40})) + (K_z \pm \frac{1}{5})]^2 + \frac{25}{300}[-\frac{1}{2}(\sqrt{3}(K_x \mp \frac{3\sqrt{3}}{40}) - (K_y \pm \frac{3}{40})) + \sqrt{3}(K_z \pm \frac{1}{5})]^2 \quad (6.33)$$

ただし， $\varepsilon_{\text{Sb}} = \hbar^2 g_{\text{Sb}}^2 / m_e \sim 16.26 \text{eV}$ である．

式 (6.31)～(6.33) の模型から得られる磁気伝導度は，連結フェルミ面と同じ 6 回対称の角度依存性を示す（図 6.13(a)）．しかし，連結フェルミ面と異なり，磁気伝導度の大きさは $\phi = 0^\circ, 60^\circ, 120^\circ, 180^\circ, 240^\circ, 300^\circ$ で最大となる．連結フェルミ面と 6 楕円体模型の磁気伝導度における角度依存性の違いは，次のように理解することができる．Binary, Bisectrix, Trigonal 方向に対する易動度の平均をそれぞれ $\mu_{\text{bin}}, \mu_{\text{bis}}, \mu_{\text{tri}}$ とする．易動度テンソルの非対角成分は対角成分に比べ十分小さいとして考えると，横磁気伝導度 σ_\perp は次式で近似することができる．

$$\sigma_\perp(\mathbf{B} // \text{Bin}) \sim \frac{\mu_{\text{tri}}}{1 + \mu_{\text{bis}} \mu_{\text{tri}} B^2} \quad (6.34)$$

$$\sigma_\perp(\mathbf{B} // \text{Bis}) \sim \frac{\mu_{\text{tri}}}{1 + \mu_{\text{bin}} \mu_{\text{tri}} B^2} \quad (6.35)$$

6 楕円体模型の $P_{1,4}$ に注目する（式 (6.13)）． $P_{1,4}$ は Bisectrix 方向に伸びているので， $\mu_{\text{bis}} < \mu_{\text{bin}}$ である¹⁴．このとき， $\sigma_\perp(\mathbf{B} // \text{Bin}) > \sigma_\perp(\mathbf{B} // \text{Bis})$ となる．一方で，連結フェルミ面を 6 つの楕円体の和でできていると考える（図 6.14）．図 6.14 の h_1 と h_2 に注目

¹³ 式 (6.31)–(6.33) は，図 6.12 のフェルミ面を作るために用いた式であり，特に物理的な意味があるわけではない．

¹⁴ Bisectrix 方向に伸びているということは，有効質量 $m_{\text{bis}} > m_{\text{bin}}$ である． $\mu = e\tau/m$ とすると，有効質量の大小関係が反転するので， $\mu_{\text{bis}} < \mu_{\text{bin}}$ となる．

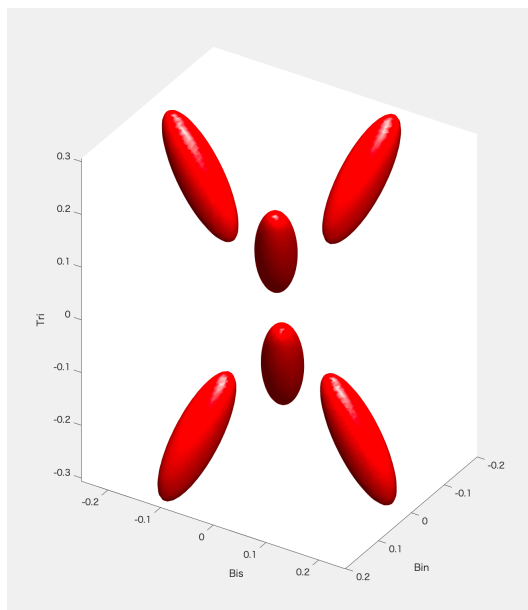


図 6.12: 6 楕円体模型：連結フェルミ面と比較するため，楕円体の傾きは連結フェルミ面（図 1.3）の突起の方向と同じにした．

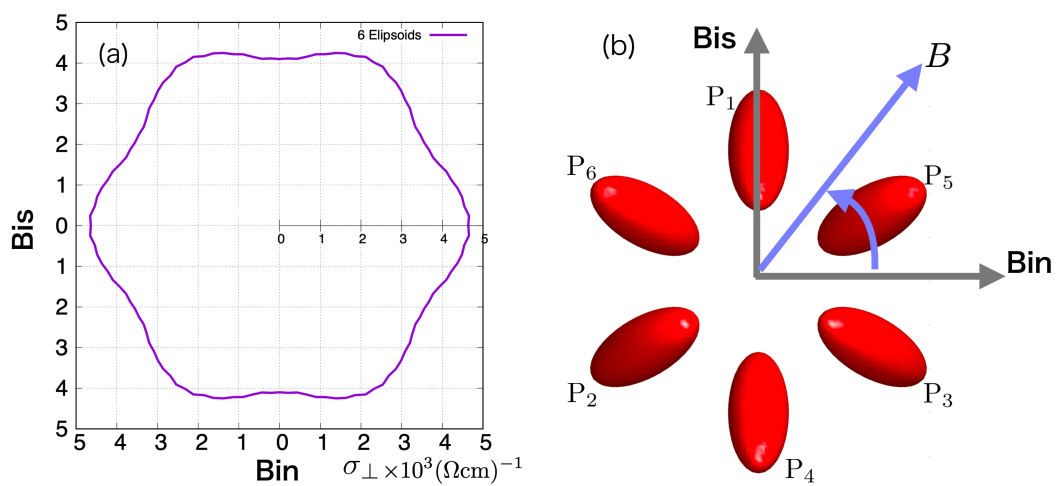


図 6.13: 6 楕円体模型における磁気伝導度角度依存性：(a) 横磁気伝導度 σ_{\perp} (b) 6 楕円模型と磁場の関係．連結フェルミ面とは異なり， $\phi = 0^{\circ}, 60^{\circ}, 120^{\circ}, 180^{\circ}, 240^{\circ}, 300^{\circ}$ で最大値を持つ． $B = 1\text{T}$ ，緩和時間 $\tau = 1.0 \times 10^{-12}\text{s}$ ．

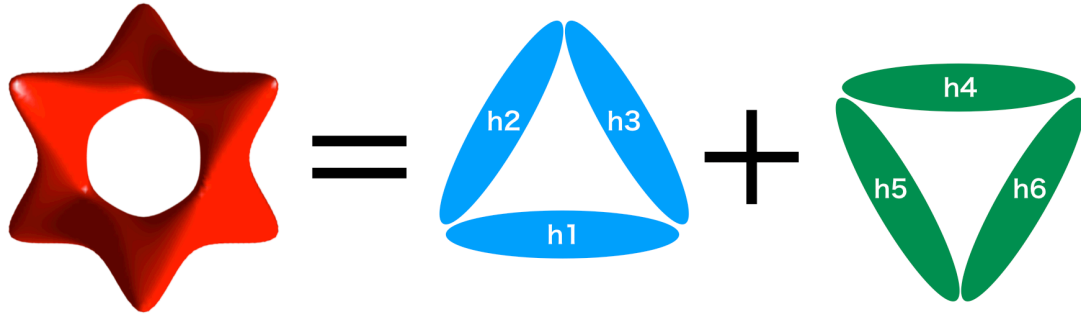


図 6.14: 連結フェルミ面の分解：連結フェルミ面は h_1 - h_6 の

すると、易動度が $\mu_{\text{bin}} < \mu_{\text{bis}}$ となり、伝導度が $\sigma_{\perp}(\mathbf{B} \parallel \text{Bis}) > \sigma_{\perp}(\mathbf{B} \parallel \text{Bin})$ となる．6 楕円体模型のフェルミ面と連結フェルミ面では易動度テンソルの対角成分の大小が異なることから、伝導度が最大になる角度にズレが生じた．

本研究では電子の磁気抵抗を計算しておらず、本論の結果だけでフェルミ面を決定することはできない．また、緩和時間の異方性も考慮していないことなど、不十分な点も存在する．これらの効果を考慮することで、アンチモンの磁気抵抗を計算することで、より実験と比較可能な角度依存磁気抵抗を計算することができる．

6.2.5 連結フェルミ面と 6 楕円体模型の de Haas–van Alphen 振動

前節で行なったフェルミ面断面積の計算を応用することで、de Haas–van Alphen 振動 (dHvA) の角度依存性を理論的に計算することが可能となった．本節では、 $\varepsilon_F = 30\text{meV}$ の連結フェルミ面 (図 6.15) と 6 楕円体模型 (図 6.12) (図 6.15) の角度依存 dHvA について議論する．

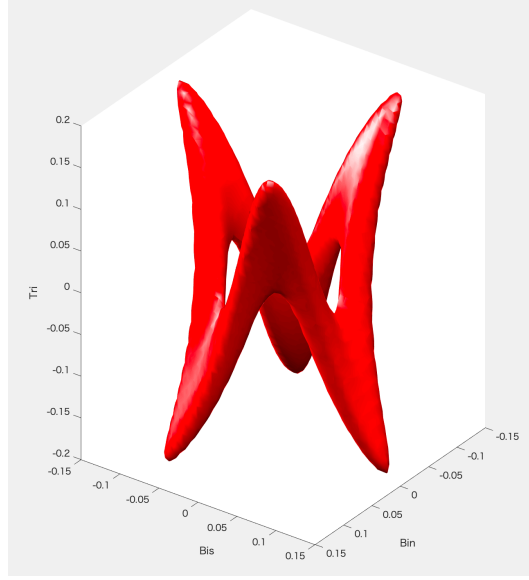
de Haas–van Alphen 振動の半古典的解釈

Onsager の理論では、一粒子の半古典的な描像を仮定している [155]．半古典的な描像において 3 次元の磁場中電子の運動方程式 (式 (6.19)) から、

$$\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = -e(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0) \times \mathbf{B} \quad (6.36)$$

が得られる． \mathbf{k} , \mathbf{R} は 3 次元の波数ベクトルと座標ベクトル、 \mathbf{k}_0 , \mathbf{R}_0 は積分定数である．一方で、磁場に垂直な面内の運動量 \mathbf{p} と位置 \mathbf{r} は量子化される．ランダウ量子数が大きな電子ではボーア＝ゾンマーフェルトの量子化条件

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = 2\pi\hbar(l + \theta) \quad (6.37)$$

図 6.15: $\varepsilon_F = 30\text{meV}$ の連結フェルミ面

が適応可能である．閉じたフェルミ面の場合， θ は $0 < \theta < 1$ を満たす実数である [150].¹⁵ 磁場中電子 (電荷 $q = -e$) の正準共役な運動量 $\boldsymbol{\pi} = \hbar\mathbf{k} - e\mathbf{A}$ と軌道運動の位置座標 $\mathbf{r} = \mathbf{r}'_c$ を用いると式 (6.37) の左辺は

$$\begin{aligned} \oint (\hbar\mathbf{k} - e\mathbf{A}) \cdot d\mathbf{r}'_c &= \oint \hbar\mathbf{k} \cdot d\mathbf{r}'_c - e \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}'_c \\ &= \oint \hbar\mathbf{k} \cdot d\mathbf{r}'_c - e \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{S} \end{aligned} \quad (6.38)$$

となる． S は実空間における電子の軌道が囲む面であり， $d\mathbf{S}$ は軌道 \mathbf{r}_c を含む面に垂直なベクトルである．定数 $\mathbf{k}_0, \mathbf{R}_0$ の周回積分は “0” なので，式 (6.36) を式 (6.38) の第一項に代入すると，

$$\begin{aligned} \oint \hbar\mathbf{k} d\mathbf{r}'_c &= \oint \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) d\mathbf{r}'_c \\ &= -e \oint [(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0) \times \mathbf{B}] \cdot d\mathbf{r}'_c \\ &= e\mathbf{B} \cdot \oint \mathbf{R} \times d\mathbf{r}'_c \end{aligned} \quad (6.39)$$

となる¹⁶．座標を $\mathbf{R} = \mathbf{r}_c + \mathbf{r}_H$ のように磁場に垂直な軌道運動のベクトル \mathbf{r}_c と，磁場に平行な方向のベクトル \mathbf{r}_H で表現する． $\mathbf{r}_H \times d\mathbf{r}$ は磁場ベクトルに対して常に垂直になる

¹⁵ エネルギー分散が波数 2 乗に比例するならば， θ は厳密に $1/2$ をとる．dHvA では， $\theta = 1/2$ であるかどうかは比較的重要ではない [156]．

¹⁶ 2 行目の導出には，式 (6.38) に対してストークスの定理を用いている．

ので、 \mathbf{r}_H の項はゼロになる ($\mathbf{B} \cdot (\mathbf{r}_H \times d\mathbf{r}'_c) = 0$)。 \mathbf{r}_c の項は、実空間の軌道 \mathbf{r}_c で囲まれる面の面積 α を用いると、 $\mathbf{B} \cdot \oint \mathbf{r}_c \times d\mathbf{r}'_c = 2B\alpha$ となる¹⁷。式 (6.38) の第二項を計算すると $eB\alpha$ となるから、式 (6.38) は

$$eB\alpha = 2\pi\hbar(l + \theta) \quad (6.40)$$

となる。実空間において電子の軌道で囲まれた領域の面積 α と波数空間の軌道で囲まれた領域の面積 a は $\alpha = (\hbar/eB)^2 a$ の関係にあるので、式 (6.40) から、

$$a(\varepsilon, k_H) = \frac{2\pi eB}{\hbar}(l + \theta). \quad (6.41)$$

が得られる。

磁場に対して垂直な任意の断面で電子は運動している。非極値断面積近傍では同じエネルギーを持ったキャリアの数が少なく、状態密度は小さい (図 6.16(a))。一方で、極値断面近傍では、多くのキャリアが同じエネルギーを持っていることから、状態密度が大きい (図 6.16(b))。磁場の増加で断面毎のランダウ準位が一つ減る際に、状態密度の大きな極値断面近傍の影響が非常に大きいことから振動に対して主要な影響を及ぼしている。以上のように、dHvA 振動はフェルミ面の極値断面積を計算することで、理論的に推定することが可能である。ランダウ量子数が十分大きい時、 $l+1$ のランダウ準位のバンド端がフェルミ準位よりも大きくなり、 l のランダウ準位のバンド端がフェルミエネルギーに接するまでの磁場の周期 $\Delta(1/B)$ は、フェルミ面の極値断面積 S_{ext} を用いて

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi eB}{\hbar S_{\text{ext}}} \quad (6.42)$$

となる。 $\Delta(1/B)$ の逆数を振動数 $F = (\Delta(1/B))^{-1}$ と定義すると [156]

$$F = (\Delta(1/B))^{-1} = \frac{\hbar}{2\pi e} S_{\text{ext}}. \quad (6.43)$$

となる¹⁸。

計算結果

式 (6.43) から、 $\varepsilon_F = 30\text{meV}$ とした連結フェルミ面 (図 6.15) の dHvA 角度依存性を調べる。連結フェルミ面の dHvA 角度依存性を計算するために、T 点中心に $\pm 0.26g_{\text{Sb}}$ の立方体領域の立方体領域を作る。磁場の回転とともに立方体領域を傾けながら、磁場方向

¹⁷ $\mathbf{r}_c = (r_{cx}, r_{cy}, 0), d\mathbf{r}'_c = (dr'_{cx}, dr'_{cy}, 0)$ とすると、

$$\left| \oint \mathbf{r}_c \times d\mathbf{r}'_c \right| = \oint (r_{cx} dr'_{cy} - r_{cy} dr'_{cx})$$

となる。グリーンの定理を用いて上式を計算すると、直ちに 2α が得られる。

¹⁸ $\Delta(1/B)$ を周期と呼ぶことから、 F は振動数と呼ばれている。ただし、単位はテスラ (T) である。

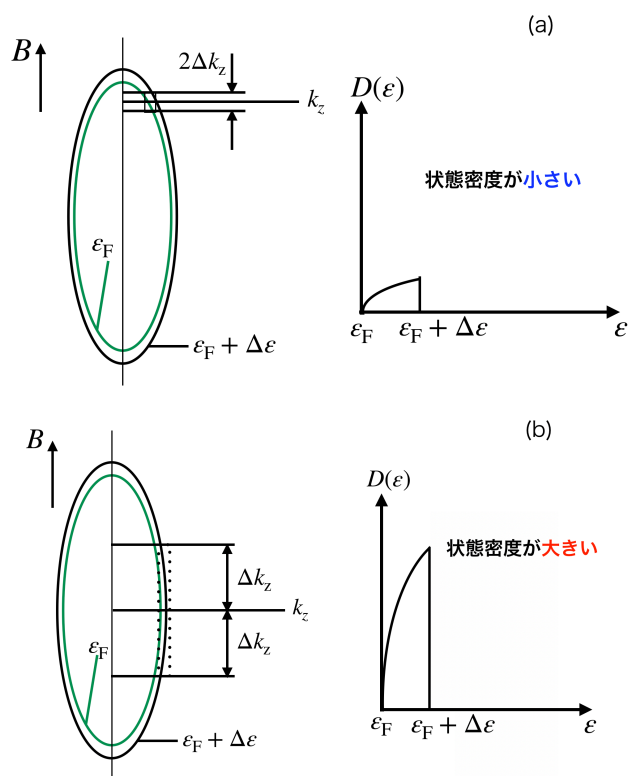


図 6.16: フェルミ面断面と状態密度の関係: (a) 非極値断面 (b) 極値断面: 非極値断面近傍では k_z に対する ϵ_F の変化が大きく, 状態密度が小さくなる (a), 一方で, 極値断面近傍では k_z の変化に対して ϵ の変化は小さいことから, 状態密度が大きくなる (b).

に垂直な断面を計算した．磁場に垂直な平面内における波数の刻みは“256×256”，磁場に平行な方向の波数の刻みは“128”とした（以後は，磁場に垂直な平面を xy 平面（ $k_x k_y$ 平面），磁場に平行な方向を z 方向（ k_z 方向）と呼ぶ），

連結フェルミ面（図 6.15）における dHvA 角度依存性をみると，Trigonal 軸と平行な磁場では，二つの周波数 $F \sim 23, 50\text{T}$ を示す（図 6.17(a),(b)）． $F \sim 23\text{T}$ は，T 点を含む面内（ $k_z=0$ ）でフェルミ面を切った断面から得られる周波数（図 6.18(a)）， $F \sim 50\text{T}$ は $k_z = \pm 0.0365 g_{\text{SB}}$ の断面から得られる周波数である（図 6.18(b),(c)）．Trigonal 軸から磁場を傾けると $F \sim 23, 50\text{T}$ の周波数はそれぞれ， $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ の四つの枝に分岐する． α と β に分岐するのは，図 6.18(b),(c) のフェルミ面の断面 1,3 と，断面 2 が磁場を傾けた時に，異なる断面になるからだ． γ と δ に分岐するのは，図 6.18(a) のフェルミ面の断面 2-5 と，断面 1,6 が磁場を傾けた際に異なる断面になるからである． α と γ がほぼ平行な曲線であり， β と δ もほぼ平行な曲線となっている．

6 楕円体模型における dHvA の角度依存性を図 6.19 に示す．図 6.19(a) と図 6.17(a) を比較すると，Trigonal 軸近傍のふるまいが大きく異なる．図 6.19(a) では Trigonal 軸近傍で 2 つの枝しか存在しない．このことから，アンチモンの正孔フェルミ面は，Trigonal 軸近傍の dHvA の角度依存性を測定した際の枝の数から判断することができる．

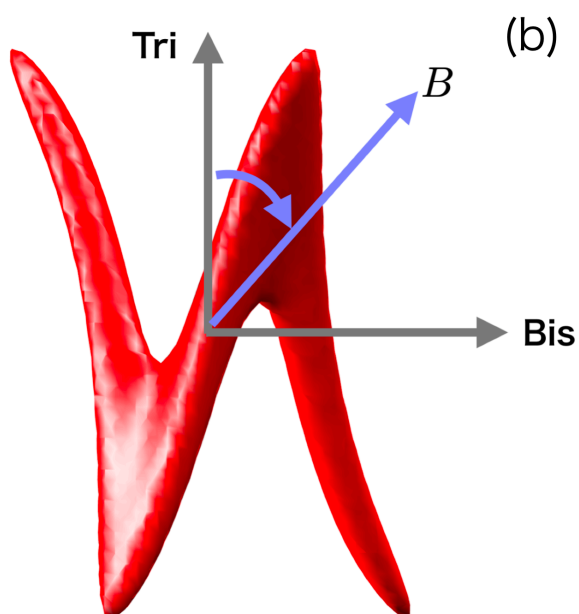
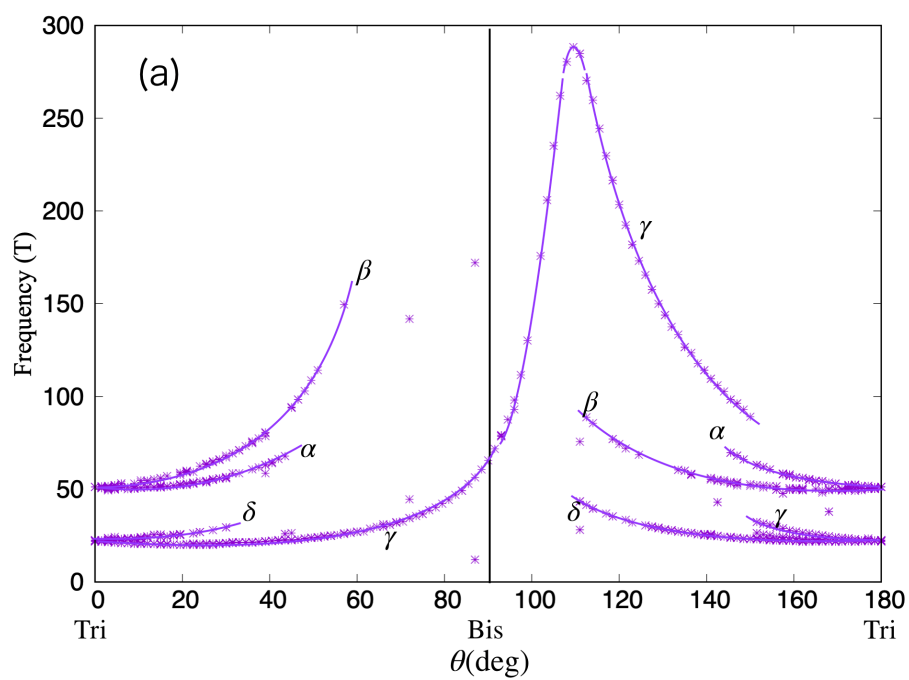


図 6.17: (a) $\varepsilon_F = 30\text{meV}$ における連結フェルミ面の dHvA 角度依存性 (b) 磁場の回転と連結フェルミ面の関係

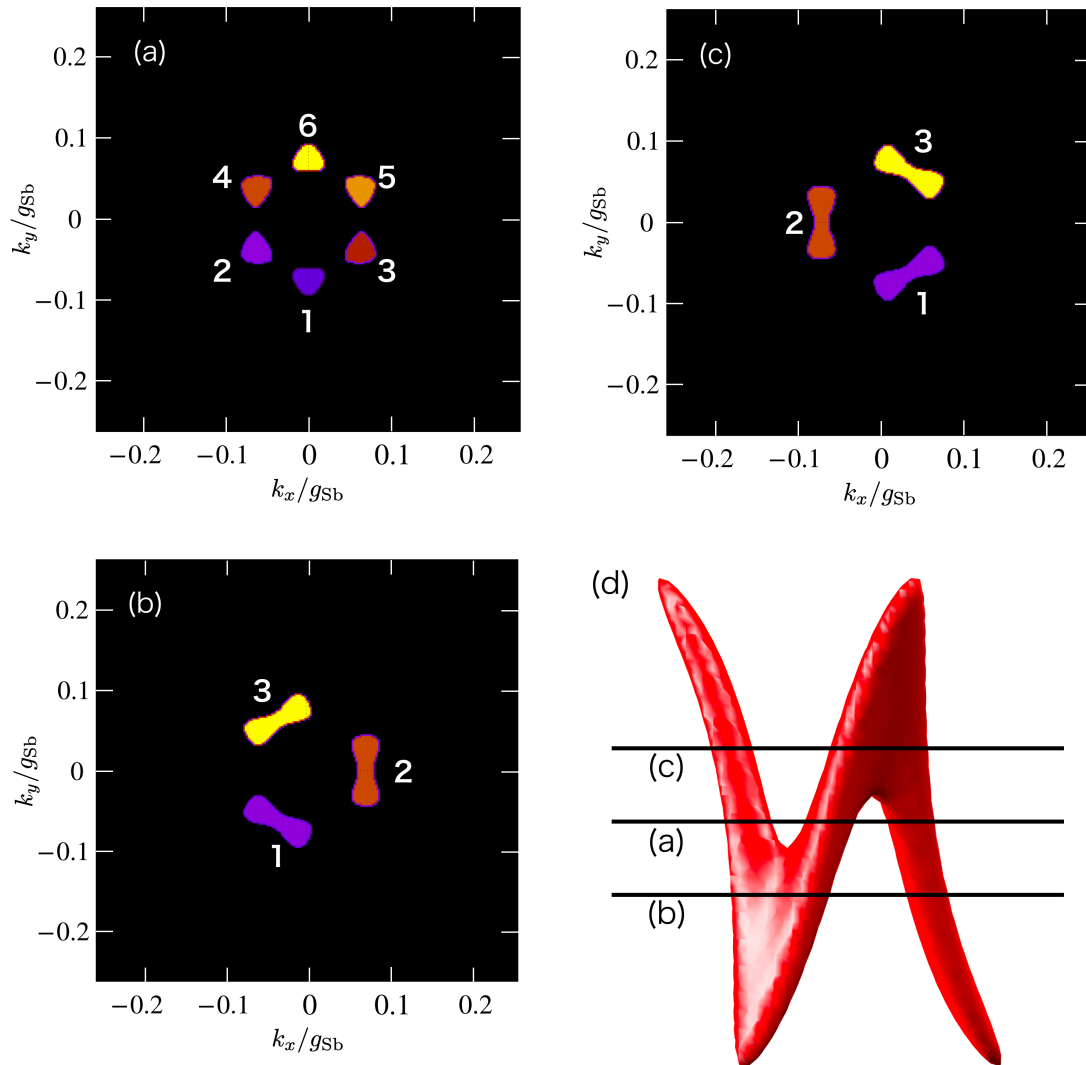


図 6.18: $\mathbf{B} // \text{Tri}$ におけるフェルミ面断面: (a) $k_z = 0$ (b) $k_z = -0.0365g_{Sb}$ (c) $k_z = +0.0365g_{Sb}$ (d) 3次元空間における (a)~(c) の断面に位置. 各図の断面領域の色分けは, 図毎に自動で行っている. (b) の赤く塗られた領域と, (c) の赤く塗られた領域が連続して繋がっているわけではない. 断面が連続しているかどうかは, 座標 (k_x, k_y) で識別している.

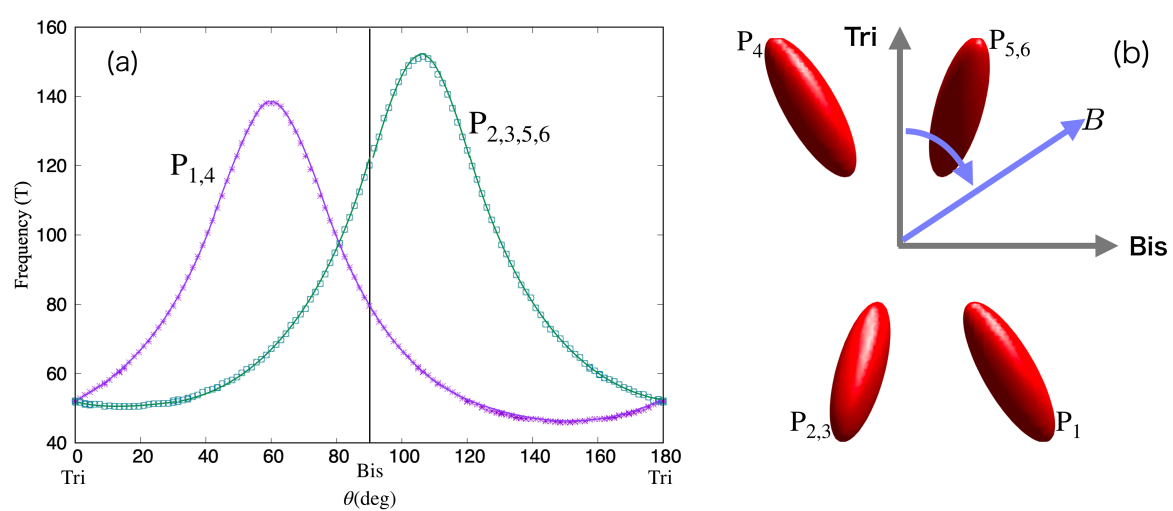


図 6.19: 6 楕円体模型 (a) dHvA の角度依存性 (b) 磁場の回転とフェルミ面の関係

第7章 総括

本研究は、ディラック電子系半金属の磁気抵抗に対して (1) ディラック電子の有効模型をもとにした磁気抵抗の研究と、(2) 強束縛近似模型をもとにした角度依存磁気抵抗とフェルミ面の解析の二つに分かれる。(1) では、ディラック電子の有効模型である Wolff 模型をもとに、半古典的なボルツマン理論に従った磁気抵抗の解析的な式 (3.22) を再導出した。弱磁場において式 (3.22) の計算結果は久保公式に基づく磁気抵抗 (式 (2.57), (4.29), (4.30)) と定量的に一致したことから、本研究によって、ディラック電子のボルツマン理論と久保理論の磁気抵抗に存在するギャップを取り除くことができた。式 (3.22) 中の補正 $\lambda_{\varepsilon_F} = \Delta/\varepsilon_F$ は、定性的には自由電子の磁気抵抗を変化させないが、定量的に自由電子の磁気抵抗を変化させることがわかった。ディラック電子の磁気抵抗の実験データを自由電子の式で解析すると、ディラック電子本来の易動度 μ を λ_{ε_F} で補正した値 $\lambda_{\varepsilon_F}\mu$ を得てしまう。磁気抵抗の計算・実験データの解析では易動度の代わりにフェルミ速度 v_F とフェルミ波数 k_F を用いた解析を行う場合もある。ディラック電子の磁気抵抗研究において、易動度と v_F, k_F どちらを用いるか注意が必要である。量子極限の磁気抵抗では、半金属の持つキャリア密度の磁場依存性を考慮することにより、強磁場でも、ボルツマン理論と久保理論に基づく計算が量子振動を除いて完全に一致し、量子極限の磁気抵抗のふるまいが変化することを明らかにした。これにより、従来の理論とは異なるアプローチで半金属の線形磁気抵抗を説明することができた。また、ビスマスの電子状態 (図 5.4) を考慮し、式 (3.22) を用いて Trigonal 軸方向に磁場を印加したビスマスの磁気抵抗することで、 $B = 15 \sim 30\text{T}$ の磁気抵抗のふるまいを定量的に説明することができた。この結果はこれまで明らかとなっていなかった、ビスマスの量子極限における易動度の磁場依存性の原因が λ_{ε_F} に由来する可能性を示唆している。ただし、ビスマスの磁気抵抗について、 $B > 30\text{T}$, $B \parallel \text{Trigonal}$ 軸の磁気抵抗は定量的に一致していない。また、 $B \parallel \text{Binary-}, \text{Bisectrix}$ 軸の磁気抵抗については計算していないなど、問題が残されている。これらについては、ビスマスの有効質量、有効 g 因子などのフィッティングや、易動度の磁場依存性に関するさらに詳細な解析が必要である。

ディラック電子の磁気抵抗 (式 (3.22)) やキャリア密度の磁場依存性 ($n(B), p(B)$) はビスマス以外のディラック電子系物質の磁気抵抗を計算する際にも応用できる。本研究の計算を用いることにより、ディラック電子系物質の磁気抵抗の研究が発展することが期待できる。

(2) の研究では、任意の磁場とエネルギーに対して使用可能な磁気抵抗の式を再導出し、バンド計算から磁気抵抗を計算する手法を開発した。Liu-Allen 模型のフェルミ面からビ

スマスの磁気抵抗を計算し、先行研究の実験と理論計算の結果と同様の角度依存磁気抵抗を得られた [9]。アンチモンの正孔フェルミ面について、連結フェルミ面と6楕円体模型の磁気抵抗を計算し、二つの模型は異なる角度依存磁気抵抗を持つことを明らかにした。また、連結フェルミ面と6楕円体の角度依存 dHvA を理論的に計算し、Trigonal 軸方向近傍においてそれぞれの模型における dHvA のふるまいに違いがあることを明らかにした。本研究は正孔フェルミ面のみを計算したが、電子フェルミ面についても計算することで、アンチモンのフェルミ面を決定することができる。

本研究で開発した角度依存 MR と角度依存 dHvA の手法を第一原理計算と組み合わせることにより、新物質の MR や dHvA の実験結果を理論的に予測し、実験計画の立案や結果の解析が容易に行えるようになった。この手法を用いることにより、さまざまな物質の研究が発展することが期待できる。

付 録 A 研究の時系列

本博士論文は第3章で半古典的なディラック電子の磁気抵抗の式を導き、第4章で久保公式の計算結果との比較を行った後、第5章でビスマスの磁気抵抗について定量的な説明をした。しかし、本研究は第3章の研究に至るまで、遠回りをしてきた。本付録で、筆者の遠回りした経験を説明する。この付録を読んだ卒研究生や修士の学生が、どのように研究を進めていくのか、そのイメージが持てることを期待する。

本研究の第3章に至るまでに、図 A.1 に示す流れで研究を行った。本研究は、ビスマスの量子極限における異常な磁気抵抗のふるまいを説明するため、ディラック電子の久保公式に基づく磁気抵抗（式 (4.29)-(4.34)）の計算を最初に行った（図 A.1 の1段目）。半古典的なボルツマン理論に基づく計算は、量子力学的な性質が顕著になる量子極限において適応できないと考えたことから、最初に久保公式に基づく計算を行ったのである。しかし、ディラック電子の久保公式に基づく磁気抵抗の式でビスマスの磁気抵抗を計算すると、磁気抵抗が量子極限でピークを持ち、実験結果（図 1.1）と大きく異なるふるまいをした（図 A.2）。不純物ポテンシャルなどのパラメータを調整したが、実験結果を説明することができなかった。このことから、より簡単なモデルでビスマスの磁気抵抗の計算を行い、磁気抵抗の全体像をつかもうと考えた。

2番目に、自由電子のボルツマン方程式に基づく磁気抵抗の式（式 (3.23)）を用いて、ビスマスの磁気抵抗を計算した（図 A.3）。図 A.3 からわかるように、久保公式の計算結果（図 A.2）に比べ実験結果に近いふるまいしているが、定量的な一致を示さなかった。

式 (3.23) で易動度などのパラメータフィッティングを行う中で、自由電子のボルツマン方程式に基づく磁気抵抗（式 (3.23)）とディラック電子の久保公式に基づく磁気抵抗（式 (4.29)-(4.34)）が一致するのか確認するべきだと考えた。そのように考えた理由は次の通りである。弱磁場において、ボルツマン理論と久保公式の計算は一致しなければならない¹。式 (3.23) は自由電子に対する久保公式の計算²と一致するが、ディラック電子の結果と一致する保証はないと考えた。そして、自由電子のボルツマン方程式に基づく磁気抵抗とディラック電子の久保公式に基づく磁気抵抗を比較した結果、弱磁場において二つの計算結果は定量的に一致しなかったのである（図 2.28）。

上述の久保公式とボルツマン理論の不一致が明らかとなったことから、直ちに第3章における磁気抵抗の式（式 (3.22)）の再導出を行った。式 (3.22) の計算とディラック電子の久保公式に基づく磁気抵抗（式 (4.29)-(4.34)）の計算が定量的に一致したことで（図 4.3）、

¹第2章の問題提起も参照

²式 (2.57), (2.62), (4.13), (4.14) から、自由電子の久保公式の磁気抵抗を得られる。

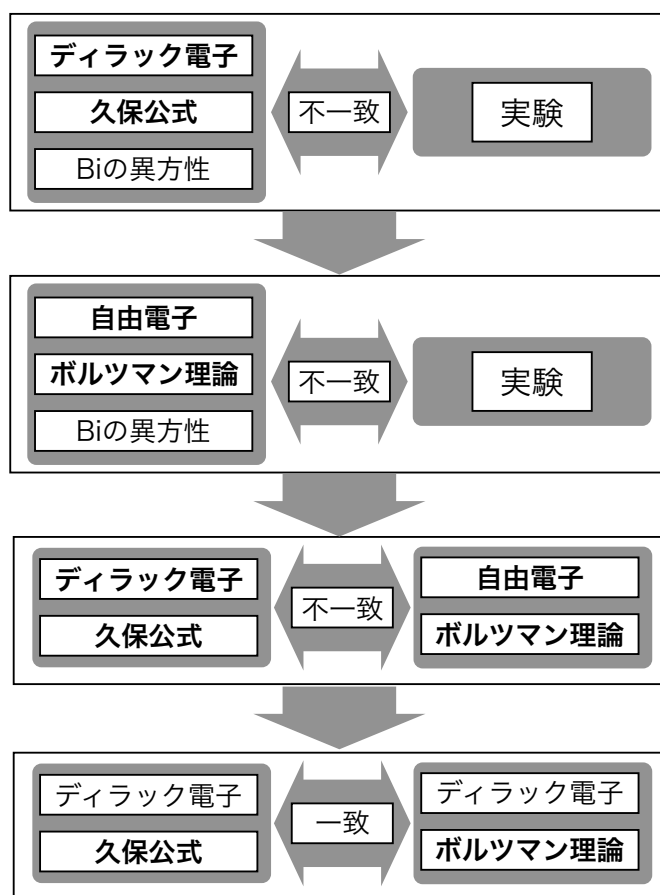


図 A.1: 研究の時系列フローチャート. 本論文では, 久保公式とボルツマン理論に基づくディラック電子の磁気抵抗の比較は, 第4章で示した (図 4.4). しかし, 研究の時系列的には, 第3章の解析を行う前に比較を行っていた.

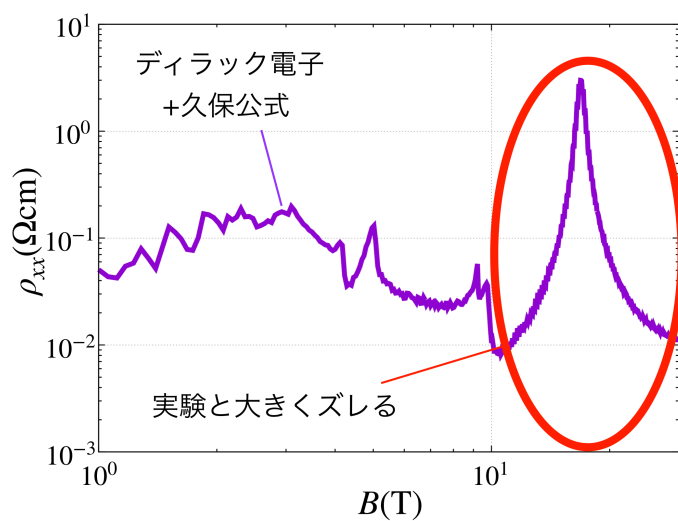


図 A.2: ディラック電子の久保公式に基づく、ビスマスの磁気抵抗の計算結果. 量子極限で不自然なピークが見られる.

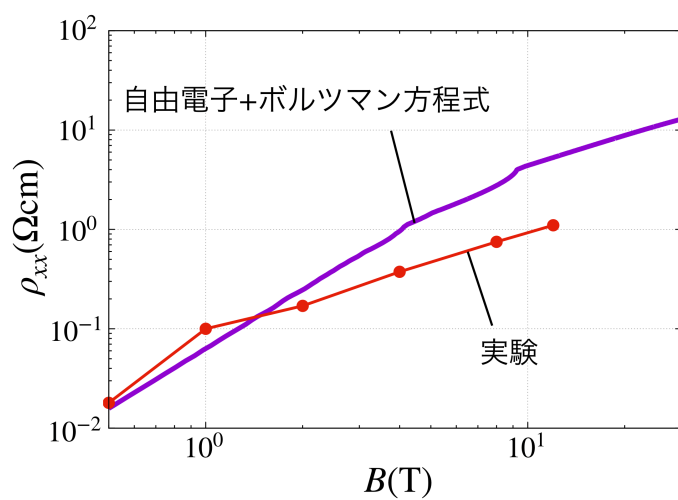


図 A.3: 自由電子のボルツマン理論に基づくビスマスの磁気抵抗. $B > 2\text{T}$ で, 理論値 (紫) が実験結果 (赤) に比べて定量的に大きい.

ようやくディラック電子系物質の磁気抵抗を定量的に議論することが可能になった.

付 録 B 物理量の無次元化

物理量の計算では，ディラック定数 \hbar や電気素量 e など物理定数が登場する．これら物理定数の値は， $\hbar \sim 10^{-34}$ や $e \sim 10^{-19}$ など非常に小さい．数値計算で物理定数をそのまま計算すると，桁落ちによる誤差や値の発散などの問題が発生する．これらの問題を回避するために，数値計算の途中過程では無次元化した計算を行い，計算結果の出力時に桁などを加える．ここでは，久保公式の磁気抵抗（式 (4.29)-(4.34)）や，拡張ディラック模型のエネルギー（式 (5.2)）など，いくつかの例を用いて無次元化の方法について説明する．なお，無次元化された量は $\tilde{\varepsilon}$ のように記号チルダ（ \sim ）で表す．

エネルギーの無次元化

エネルギーを無次元化する場合，基準になる値（ここでは， Δ ）でエネルギーを割ることで，無次元化されたエネルギー $\tilde{\varepsilon}$ を得ることができる．式 (5.2) から，無次元化されたエネルギー $\tilde{\varepsilon}$ は次のように表される

$$\begin{aligned}\tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{\Delta} &= \sqrt{1 + \frac{2}{\Delta} \left[\left(l + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{m_e}{m_c} \beta_0 B + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z} \right]} + \sigma \frac{g' \beta_0 B}{4\Delta} \\ &= \sqrt{1 + 2 \left[\left(l + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{m_e}{m_c} \frac{\beta_0 B}{\Delta} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z \Delta} \right]} + \sigma \frac{g' \beta_0 B}{4\Delta}.\end{aligned}\quad (\text{B.1})$$

ここで，式 (B.1) 中の物理量について単位を考慮する．例えば， $\beta_0 = 0.1158(\text{meV/T})$ であることから， $\beta_0 = \tilde{\beta}_0(\text{meV/T})$ と表記する（ $\tilde{\beta}_0 = 0.1158$ で，数値を表す）．同様に，バンドギャップ Δ ，磁場 B ，有効質量 $m_{c,z}$ をそれぞれ $\Delta = \tilde{\Delta}(\text{meV})$ ， $B = \tilde{B}(\text{T})$ ， $m_{c,z} = \tilde{m}_{c,z} m_e$ とおくと

$$\frac{\beta_0 B}{\Delta} = \frac{\tilde{\beta}_0 \tilde{B}}{\tilde{\Delta}} \left(\frac{\text{meV/T} \cdot \text{T}}{\text{meV}} \right) = \tilde{\beta}_0^* \tilde{B} \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z \Delta} = \frac{1}{2\tilde{m}_z} \frac{\hbar^2 k_z^2}{m_e \Delta} = \frac{1}{2\tilde{m}_z} \tilde{k}_z^2 \quad (\text{B.3})$$

となる（ $\tilde{\beta}_0^* = \tilde{\beta}_0/\Delta$ ， $\tilde{k}_z^2 = \hbar^2 k_z^2/m_e \Delta$ ）．上式から式 (B.1) は，

$$\tilde{\varepsilon} = \sqrt{1 + 2 \left[\left(l + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{\tilde{\beta}_0^*}{\tilde{m}_c} \tilde{B} + \frac{\tilde{k}_z^2}{2\tilde{m}_z} \right]} + \sigma \frac{g' \tilde{\beta}_0^* \tilde{B}}{4} \quad (\text{B.4})$$

と表される．数値計算の際に，磁場の依存性を見る場合は \tilde{B} ，波数の変化を見る場合は \tilde{k}_z^2 を変化させる．実験結果との定量的な比較を行う場合， $\varepsilon = \tilde{\varepsilon}\Delta$ を用いる．

久保公式に基づく磁気抵抗の無次元化

久保公式に基づく磁気伝導度の計算においても，エネルギーギャップを基準にした無次元化を行った．ここでは式 (4.29)，(4.31) を用いて，無次元化の説明を行う¹．まず， \mathcal{Q} の各要素 ($\mathcal{F}, \mathcal{A}, N_L$) を無次元化する．無次元化された量を $\tilde{\mathcal{F}}, \tilde{\mathcal{A}}, \tilde{N}_L$ とすると，式 (2.70)，(4.27)，(2.87) から

$$\mathcal{F}(\hbar\omega) = \Delta^{-1} \tilde{\mathcal{F}}(\tilde{\omega}) \quad (\text{B.5})$$

$$\mathcal{A} = \Delta^{-2} \tilde{\mathcal{A}} \quad (\text{B.6})$$

$$\begin{aligned} N_L &= \frac{eB}{2\pi\hbar} = \frac{m_c\hbar\omega_c}{2\pi\hbar^2} \\ &= \frac{\tilde{m}_c\tilde{\omega}_c}{2\pi} \frac{m_e\Delta}{\hbar^2} = \tilde{N}_L \frac{m_e\Delta}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

となる²．上式より， f_1 は

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{\tilde{\mathcal{F}}(\tilde{\omega})}{\Delta} \frac{\tilde{\mathcal{A}}^2}{\Delta^4} \tilde{m}_c m_e \tilde{\omega}_c \Delta (l+1) [(\tilde{\varepsilon}_{l+1\sigma} + \tilde{\varepsilon}_{l\sigma} + 2) + \sigma(\tilde{\varepsilon}_{l+1\sigma} - \tilde{\varepsilon}_{l\sigma})]^2 \Delta^2 \\ &= \frac{m_e}{\Delta^2} \tilde{f}_1 \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

となる． $v_0^2 = \Delta/m_c$ より，式 (4.29) は次のように表すことができる³

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{xx}^D &= \frac{e^2}{8} \frac{\Delta^2}{m_c^2} \tilde{N}_L \frac{m_e\Delta}{\hbar^2} \sum_{k_z} \frac{m_e}{\Delta^2} \tilde{f}_1 \\ &= \frac{\Delta}{\hbar} \frac{e^2}{\hbar} \frac{\tilde{N}_L}{8\tilde{m}_c} \sum_{k_z} \tilde{f}_1. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

ここで，離散和 \sum_k は本質的に，積分 \int と等しいことに注目する．波数を無次元化 ($\tilde{k}_z^2 = \hbar^2 k_z^2 / m_e \tilde{\Delta}$) すると，積分変数 dk_z は次のように表される

$$dk_z = \frac{\sqrt{m_e \tilde{\Delta} (\text{meV})}}{\hbar} d\tilde{k}_z. \quad (\text{B.10})$$

¹ f_2, f_3, f_4 については， f_1 と同様の手順で無次元化できるのでここでは割愛する．

² 式 (B.5)-(B.7) の導出で， $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon/\Delta$ の他に， $\tilde{\omega} = \hbar\omega/\Delta, \tilde{\omega}_c = \hbar\omega_c/\Delta, \tilde{N}_L = \tilde{m}_c\tilde{\omega}_c/2\pi, \Gamma/\Delta = \tilde{\Gamma}$ を用いている．

³ 説明の簡略化のため， f_2, f_3, f_4 については省略した．

これを考慮すると、式 (B.9) は、

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}_{xx}^D &= \frac{\Delta}{\hbar} \frac{e^2}{\hbar} \frac{\sqrt{m_e(\text{meV})}}{\hbar} \frac{\tilde{N}_L \sqrt{\tilde{\Delta}}}{8\tilde{m}_c} \sum_{\tilde{k}_z} \tilde{f}_1 \\ &= \frac{\Delta}{\hbar} \frac{e^2}{\hbar} \frac{\sqrt{m_e \Delta}}{\hbar} \tilde{\mathcal{Q}}_{xx}^D\end{aligned}\quad (\text{B.11})$$

$$\tilde{\mathcal{Q}}_{xx}^D = \frac{\tilde{N}_L \sqrt{\tilde{\Delta}}}{8\tilde{m}_c} \sum_{\tilde{k}_z} \tilde{f}_1 \quad (\text{B.12})$$

となる。式 (2.57) に上式を代入すると、

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}(\omega) &= -\frac{1}{i\omega} \frac{\Delta}{\hbar} \frac{e^2}{\hbar} \frac{\sqrt{m_e(\text{meV})}}{\hbar} [\tilde{\mathcal{Q}}_{xx}^D(\tilde{\omega}) - \tilde{\mathcal{Q}}_{xx}^D(0)] \\ &= -\frac{1}{i\tilde{\omega}} \frac{e^2}{\hbar} \frac{\sqrt{m_e(\text{meV})}}{\hbar} [\tilde{\mathcal{Q}}_{xx}^D(\tilde{\omega}) - \tilde{\mathcal{Q}}_{xx}^D(0)] \\ &= \frac{e^2}{\hbar} \frac{\sqrt{m_e(\text{meV})}}{\hbar} \tilde{\sigma}_{xx}(\tilde{\omega})\end{aligned}\quad (\text{B.13})$$

となる。磁気伝導率の比例定数を σ_0 とおくと、 σ_0 は

$$\sigma_0 = \frac{e^2}{\hbar} \frac{\sqrt{m_e(\text{meV})}}{\hbar} \quad (\text{B.14})$$

である。電気素量 e 、ディラック定数 \hbar 、電子の静止質量 m_e 、 $1\text{meV} = 1.602 \times 10^{-22}\text{J}$ を代入し計算すると、 $\sigma_0 = 278.8 (\Omega \text{ cm})^{-1}$ が得られる。

伝導度の無次元化：積分表示

ボルツマン理論に基づいた積分表示された伝導度（式 (6.17)）について無次元化を行う。始めに、 $(-\partial f_0/\partial \epsilon)$ 、 v_i 、 $d\mathbf{k}$ などの各要素について、無次元化を行う。第6章では、波数は逆格子 g の定数倍を用いることから、 $k = g\tilde{k}$ と表すことができる。また、エネルギー ϵ

は $\varepsilon = \tilde{\varepsilon}(\text{eV})$ となるので, 各要素は次式のように変形できる

$$\begin{aligned} -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} &= \frac{1}{k_B T} \frac{\exp((\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T)}{(1 + \exp((\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T))^2} \\ &= \frac{1}{k_B(K)} \frac{1}{\tilde{T}} \frac{\exp((\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T)}{(1 + \exp((\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T))^2} \\ &= \frac{1}{k_B(K)} \left(-\partial_{\tilde{\varepsilon}} \tilde{f}_0 \right) \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

$$v_i = \frac{(\text{eV})}{\hbar g} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \tilde{k}_i} = \frac{(\text{eV})}{\hbar g} \tilde{v}_i \quad (\text{B.16})$$

$$\alpha_{ij} = \frac{(\text{eV})}{\hbar^2 g^2} \frac{\partial^2 \tilde{\varepsilon}}{\partial \tilde{k}_i \partial \tilde{k}_j} = \frac{(\text{eV})}{\hbar^2 g^2} \tilde{\alpha}_{ij} \quad (\text{B.17})$$

$$d\mathbf{k} = g^3 d\tilde{\mathbf{k}}. \quad (\text{B.18})$$

電気素量 $e = \tilde{e} \times 10^{-19}(\text{C})$, 磁場 $B = \tilde{B}(\text{T})$, 緩和時間 $\tau = \tilde{\tau} \times 10^{-x}(\text{s})$ とおくと, 式 (B.17) から, $\hat{1} - e\tau \hat{B} \hat{\alpha}$ は

$$\hat{1} - e\tau \hat{B} \hat{\alpha} = \hat{1} - \left(\frac{\tilde{e}}{\hbar \tilde{g}} \right)^2 \times 10^{10-x} \tilde{\tau} \tilde{B} \tilde{\alpha} \quad (\text{B.19})$$

となる⁴. また, 式 (B.15)-(B.16), (B.18), (B.19) から式 (6.17) は

$$\sigma_{ij} = \frac{2\tilde{\tau}\tilde{g}}{(2\pi)^3} \int d\tilde{\mathbf{k}} \left(-\partial_{\tilde{\varepsilon}} \tilde{f}_0 \right) \sum \tilde{v}_i \tilde{v}_j \left[\left(\hat{1} - c_0 \tilde{B} \tilde{\alpha} \right)^{-1} \right]_{\mu j} \times \frac{\tilde{e}^3}{\hbar^2 \tilde{k}_B} 10^{24-x} (\Omega \text{cm})^{-1} \quad (\text{B.20})$$

$$c_0 = \left(\frac{\tilde{e}}{\hbar \tilde{g}} \right)^2 \times 10^{10-x} \quad (\text{B.21})$$

となる. 上式から, 比例定数 $\sigma_0 = (\tilde{e}^3/\hbar^2 \tilde{k}_B) \times 10^{24-x} (\Omega \text{cm})^{-1}$ となる.

dHvA の振動数 F の無次元化

振動数 F について無次元化を行う, 波数空間における断面積 S は, 物質の逆格子の大きさ $g = 2\pi/a$ の 2 乗に比例する (a は格子定数). 式 (6.43) から

$$F = \frac{\tilde{g}^2}{2\pi} \tilde{S}_{\text{ext.}} \times \frac{\tilde{\hbar}}{\tilde{e}} 10^5 (\text{T}) \quad (\text{B.22})$$

となり, 比例定数は $\tilde{\hbar}/\tilde{e} 10^5 (\text{T})$ であることがわかる. なお, 無次元化された断面積 $\tilde{S}_{\text{ext.}}$ はフェルミ面の内側にある格子点の数 N と刻み幅 $\Delta \tilde{k}_i$ を用いて, $\tilde{S}_{\text{ext.}} = \Delta \tilde{k}_x \Delta \tilde{k}_y N$ と表される.

⁴ $\hbar = \tilde{\hbar} \times 10^{-34}(\text{Js}) = 1.05457, k_B = \tilde{k}_B \times 10^{-5}(\text{eV/K}) = 8.6173$ ($\tilde{\hbar} = 1.05457, \tilde{k}_B = 8.6173$), $g = \tilde{g}(\text{\AA}^{-1}) = \tilde{g} \times 10^{10}(\text{m}^{-1})$, $(\text{eV}) = \tilde{e} \times 10^{-18}(\text{J})$.

付 録 C de Haas–van Alphen 振動の計算 アルゴリズム

ここでは、「6.2.5 連結フェルミ面と6楕円体模型の de Haas–van Alphen 振動」で用いた計算アルゴリズム (図 C.1) の要点を説明する. 図 C.1 で示すように, dHvA の計算では, 大きく分けて1~5のプロセスに分かれる. プロセス1では, 第一原理計算や強束縛近似模型から注目している系の電子状態を計算し, フェルミ準位近傍のバンドを得る (図 6.7). 得られたバンドに対して, フェルミ準位を閾値とした2値化処理を行う (図 6.8). プロセス2では, 2値化処理されたデータから領域成長法 (図 6.10) を用いて, 断面積毎にラベリングとフェルミ面内の格子点のカウント (面積計算) を行う (図 6.9, C.2(a)). プロセス3で計算領域の端と接する開いた領域をラベリングし (図 C.2(b)), プロセス4でフェルミ面外の閉じた領域のラベリングと格子点のカウントを行う (図 C.2(c)). プロセス3と4を行うことで, 環の部分の外側 (図 C.2(c) の領域1と-1の境界) と内側 (図 C.2(c) の領域1と2の境界) に沿って運動する正孔の量子振動を正確に計算することが可能となる¹. k_{\parallel} 毎の断面積計算終了後, プロセス5にて数値微分を行い極値断面積を得る. 本研究のアルゴリズムを応用・拡張することにより, [18, 157] などの複雑なフェルミ面や Cu のような開いたフェルミ面の量子振動を計算することができる².

スタック

本研究では領域成長法を用いて, ラベリングを行なった. このラベリングするプログラムを fortran で自作するためには, “スタック” と呼ばれる機能を持ったサブルーチンが必要である. スタックとは, データをメモリ上へ一時的に保存し, 必要な時にデータを取り出す格納庫であり (図 C.3), データを積み重ねていくように保存し, 一番上に積まれているデータを取り出す機能を持つ³.

¹dHvA 振動は, フェルミ面に沿って周回運動する電子 (正孔) の軌道で囲まれている領域の断面積から得られる. よって, 図 C.2(c) の領域1の外側を周回する電子の振動は, フェルミ面の内側 (領域1) と外側 (領域2) の断面積の和を計算して求めることができる.

²開いたフェルミ面の dHvA 振動は, 本研究の計算アルゴリズムに対して, ブリルアンゾーンの周期性を考慮した拡張を行うことで, 計算が可能になる.

³保存することを “プッシュダウン”, データを取り出すことを “ポップアップ” と呼ぶ.

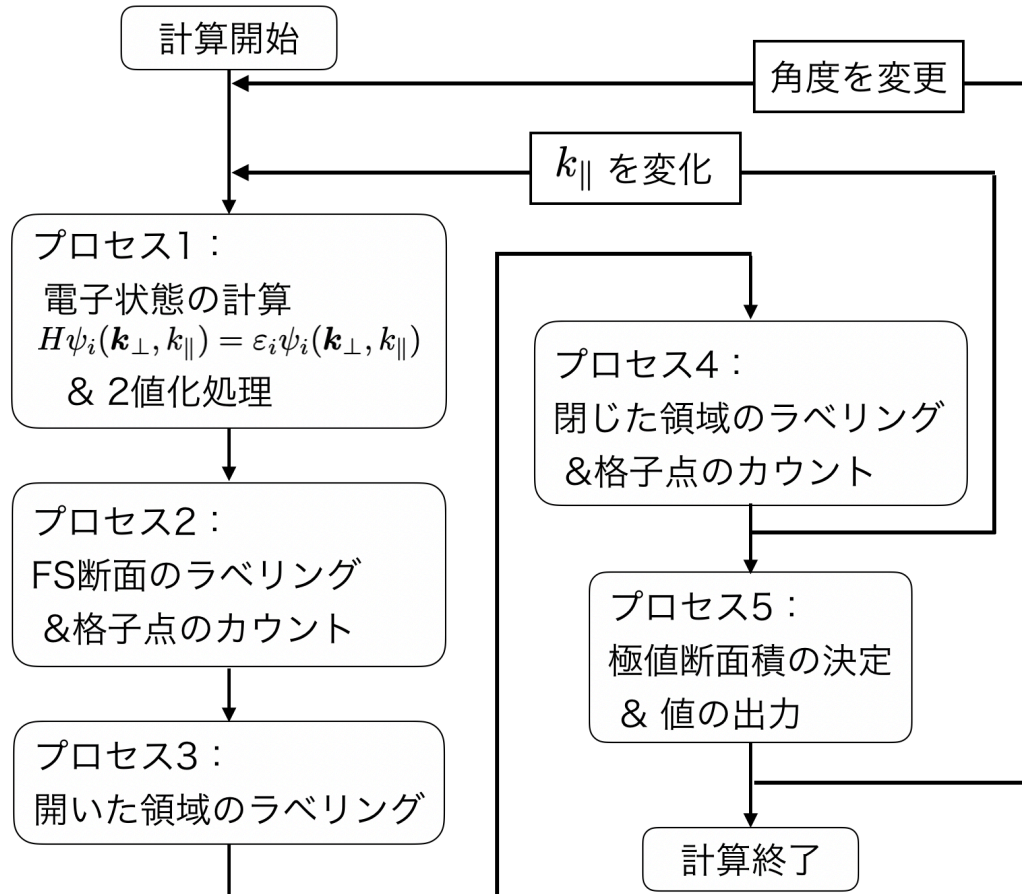


図 C.1: 角度依存 dHvA 振動の計算手順のアルゴリズム. \mathbf{k}_\perp は磁場に対して垂直な面内の波数成分, k_\parallel は磁場と平行な波数成分である. 明記していないが, プロセス 1~4 では \mathbf{k}_\perp を変化させるループを含んでいる. dHvA には, 極値断面積を用いるので, プロセス 1~4 で, k_\parallel 毎の断面積を計算した後, プロセス 5 で数値微分を行い極値断面積を得る.

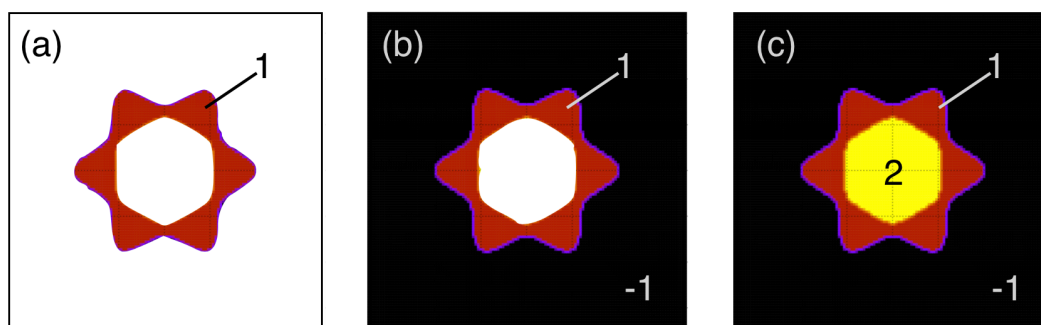


図 C.2: 図 C.1 のプロセス 2~4 における領域の分類. プロセス 2 では, フェルミ面の内側 (環の部分) がラベリングされる ((a) の領域 1). プロセス 3 で計算領域の端に接する領域を塗りつぶす ((b) の領域 -1). プロセス 4 で領域 1 に囲まれた部分をラベリングする (領域 2). 中心に対して領域 1 の外側を周回する電子 (正孔) の振動は領域 1 と 2 の断面積の和から得られる. また, 領域 1 の内側を周回する正孔の振動は, 領域 2 の断面積を用いて計算する.

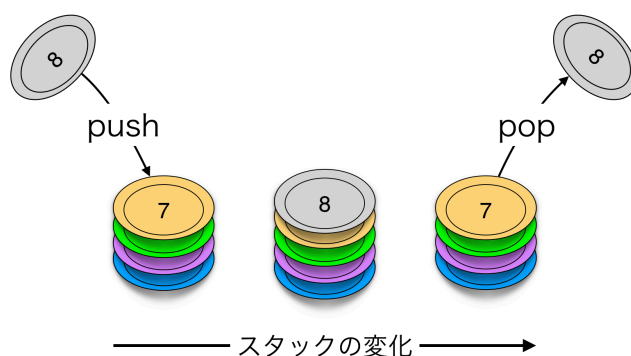


図 C.3: スタックの概要. プッシュ(push) で 7 番のデータの上に, 8 番のデータが積み重ねられ, ポップアップで 8 番のデータを取得し, 7 番のデータが再び利用可能になる.

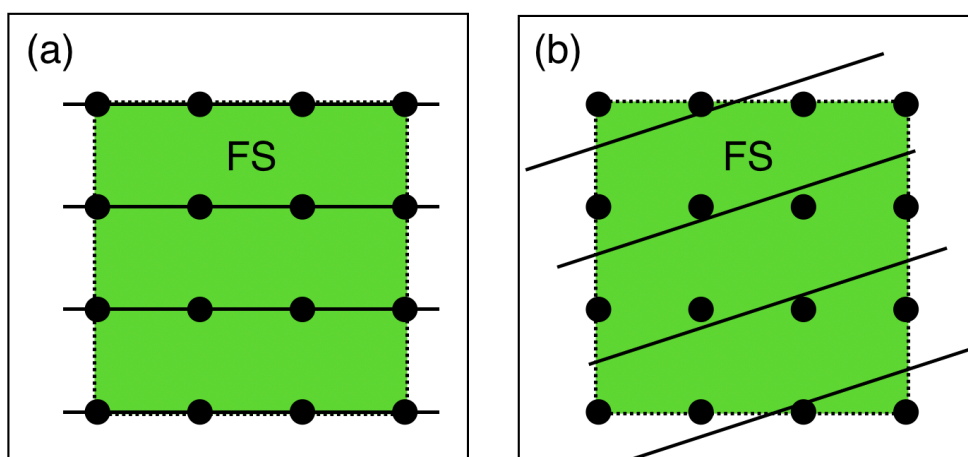


図 C.4: 断面積計算アルゴリズムの拡張時に注意すべき点. (a) のように, 格子点 (黒丸) の並びと磁場に垂直な断面 (実線) の向きが同じなら, 断面積計算 (FS に含まれる格子点のカウント) が可能だが, (b) のように格子点の並びと磁場に垂直な断面の向きが異なる場合, 断面積の計算が不可能である. 一方向の磁場方向に対するエネルギーの計算だけを行い, 座標変換を用いて断面積を計算しようとする, (b) の状況になることから, 適当な方法を用いて格子点間の情報を補完し, 断面積の計算を行う必要がある.

アルゴリズムの改良指針

本研究で開発したアルゴリズム (図 C.1) は, 磁場の角度毎に電子状態を計算している. 角度毎に計算するのは, 格子点の並びと磁場に垂直な断面の向きを常に揃えるために必要なことである (図 C.4(a)). しかし, この方法では複雑な系⁴になる程, 計算時間が長くなってしまふ. また, 断面毎のデータを保存すると, そのデータ量は膨大になる. これを回避するには, 一方向の磁場のエネルギーを計算し, 座標変換を行うなどの工夫を行えば良い. しかし, ただ座標変換を行なうだけでは, 図 C.4(b) のように断面上に格子点が存在せず, 断面積を正しく計算できない恐れがある. ゆえに, 図 C.4(b) では格子点の間を適当な手段⁵で補完する必要がある.

⁴ここで言う複雑な系とは, 計算するハミルトニアンがサイズが大きく, 有限な値の成分が多い系のことを指す.

⁵MATLAB や Mathematica といった解析ソフトの使用など

謝辞

最後になりますが、本博士論文の執筆と、6年間の研究室生活で、お世話になった方々に感謝の意を表させていただきます。

まず、主任指導教員である伏屋雄紀准教授に御礼申し上げます。学部の卒業研究からの6年間、懇切な御指導をしていただきました。何度もご迷惑をおかけした私を、忍耐強くご指導いただき、先生には心より御礼申し上げます。本博士論文を執筆することができたのも、研究に関する伏屋先生との議論と科学技術論文に関するご指導があったからです。伏屋先生には心より感謝申し上げます。副指導教員である中村仁准教授には、暖かいお声がけを頂き、心より御礼申し上げます。本論文に対する貴重な助言も頂き、より良い博士論文を執筆することができました。審査委員を引き受けてくださった尾関之康教授、大淵泰司准教授、松林和幸准教授からも、本論文の作成にあたり貴重な助言を頂きました。深く感謝いたしております。パリ高等物理化学学校 Kamran Behnia 教授、Benoi Fauque 博士、Aurerie Collaudin 博士らには実験データの提供をいただきました。心より感謝申し上げます。伏屋研究室の卒業生や後輩の皆様にも感謝したいと思います。田中様、土屋さんなど博士進学をされた先輩がいたことで、博士課程がどのようなものか具体的に把握することができました。就職後もお忙しい中、度々ご助言をいただき誠にありがとうございました。伏屋研初期の仲間である四人（新井さん、倉矢さん、高橋さん、末正さん）にも御礼申し上げます。最初の数年間に、皆様と研究室生活おくれたことが、博士課程3年間の研究室生活の原点であると考えています。既に卒業した後輩や、現在伏屋研に在籍している後輩の皆様にも、感謝を申し上げます。皆様との研究に関する議論などで学ぶこともたくさんありました。今後も先輩と後輩で活発な議論を行い、互いに多くのことを学び、成長して行くことを期待しております。卒業した同期の前原さん、青柳さん、吉田さん、小出さんに御礼申し上げます。研究室の異なる皆様との交流は良い刺激となりました。同様の理由で、松林研の有馬くん、桑田くん、元山くん、清水研の浅村くん、佐久間くん、内藤くん、小久保研の織田くんにも御礼申し上げます。最後に、博士課程進学を応援し、卒業まで支えてくれた父や母、兄たちには心より感謝申し上げます。

参考文献

- [1] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim: Rev. Mod. Phys. **81** (2009) 109.
- [2] Z. Wang, Y. Sun, X.-Q. Chen, C. Franchini, G. Xu, H. Weng, X. Dai, and Z. Fang: Phys. Rev. B **85** (2012) 195320.
- [3] C. Shekhar, A. K. Nayak, Y. Sun, M. Schmidt, M. Nicklas, I. Leermakers, U. Zeitler, Y. Skourski, J. Wosnitza, Z. Liu, Y. Chen, W. Schnelle, H. Borrmann, Y. Grin, C. Felser, and B. Yan: Nat. Phys. **11** (2015) 645.
- [4] G. Autès, D. Gresch, M. Troyer, A. A. Soluyanov, and O. V. Yazyev: Phys. Rev. Lett. **117** (2016) 066402.
- [5] M. N. Ali, J. Xiong, S. Flynn, J. Tao, Q. D. Gibson, L. M. Schoop, T. Liang, N. Haldolaarachchige, M. Hirschberger, N. P. Ong, and R. J. Cava: Nature **514** (2014) 205.
- [6] T. Liang, Q. Gibson, M. N. Ali, M. Liu, R. J. Cava, and N. P. Ong: Nature Materials **14** (2014) 280 EP .
- [7] J. Feng, Y. Pang, D. Wu, Z. Wang, H. Weng, J. Li, X. Dai, Z. Fang, Y. Shi, and L. Lu: Phys. Rev. B **92** (2015) 081306.
- [8] L.-p. He and S.-y. Li: Chin. Phys. B **25** (2016) 117105.
- [9] A. Collaudin, B. Fauqué, Y. Fuseya, W. Kang, and K. Behnia: Phys. Rev. X **5** (2015) 021022.
- [10] K. Hiruma, G. Kido, and N. Miura: Solid State Comm. **31** (1979) 1019.
- [11] B. Fauqué, B. Vignolle, C. Proust, J.-P. Issi, and K. Behnia: New J. Phys. **11** (2009) 113012.
- [12] Z. Zhu, J. Wang, H. Zuo, B. Fauqué, R. D. McDonald, Y. Fuseya, and K. Behnia: Nat. Commun. **8** (2017) 15297.

- [13] Z. Zhu, B. Fauqué, K. Behnia, and Y. Fuseya: J. Phys: Condens. Matter **30** (2018) 313001.
- [14] Z. Zhu, B. Fauqué, Y. Fuseya, and K. Behnia: Phys. Rev. B **84** (2011) 115137.
- [15] M. N. Ali, L. M. Schoop, C. Garg, J. M. Lippmann, E. Lara, B. Lotsch, and S. S. P. Parkin: Science Advances **2** (2016).
- [16] J.-p. Issi: Aust. J. Phys. **32** (1979) 585.
- [17] B. Fauqué, X. Yang, W. Tabis, M. Shen, Z. Zhu, C. Proust, Y. Fuseya, and K. Behnia: Phys. Rev. Materials **2** (2018) 114201.
- [18] T. Tanaka, Y. Ishizawa, E. Bannai, and S. Kawai: Solid State Comm. **26** (1978) 879 .
- [19] T. Tanaka and Y. Ishizawa: J. Phys. C: Solid State Phys. **13** (1980) 6671.
- [20] A. Carrington, P. J. Meeson, J. R. Cooper, L. Balicas, N. E. Hussey, E. A. Yelland, S. Lee, A. Yamamoto, S. Tajima, S. M. Kazakov, and J. Karpinski: Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 037003.
- [21] G. Xu, Z. Hou, Y. Wang, X. Zhang, H. Zhang, E. Liu, X. Xi, F. Xu, G. Wu, X. xiang Zhang, and W. Wang: J. Phys: Condens. Matter **29** (2017) 195501.
- [22] W. R. Datars and J. Vanderkooy: IBM J. Research Develop. **8** (1964) 247.
- [23] L. R. Windmiller: Phys. Rev. **149** (1966) 472.
- [24] R. A. Herrod, C. A. Gage, and R. G. Goodrich: Phys. Rev. B **4** (1971) 1033.
- [25] 鈴木実: 固体物性と電気伝導 (森北出版株式会社, 2014).
- [26] J. M. Ziman: *Principles of the Theory of solids* (Cambridge University Press, 1972).
- [27] A. H. Wilson: *The Theory of Metals* (Cambridge University Press, 1965) 2nd ed., Chap. 8.
- [28] 阿部龍蔵: 電気伝導 (培風館, 1969).
- [29] 阿部龍蔵: 統計力学 (東京大学出版会, 1992).
- [30] 伏屋雄紀 and 福山秀敏: 固体物理 **51** (2016) 371.
- [31] 伏屋雄紀 and 福山秀敏: 固体物理 **52** (2017) 1.
- [32] P. Drude: Annalen der Physik **306** 566.

- [33] 福山秀敏 and 小形正男: 物理数学 *I* (基礎物理学シリーズ 3. 朝倉書店, 2003), 基礎物理学シリーズ 3.
- [34] G. Grosso and G. P. Parravicini: *Solid State Physics* (Academic Press, 2000), Chap. 15.
- [35] 福山秀敏, 山田耕作, and 安藤恒也: 大学院物性物理, 編伊達宗行 (講談社, 1996).
- [36] 小出昭一郎: 解析力学 (岩波書店, 1983).
- [37] L. Landau: Z. Phys. **64** (1930) 629.
- [38] L. Schubnikow and W. J. de Haas: Proc. Netherlands Roy. Acad. Sci. **33** (1930) 418.
- [39] W. J. de Haas and P. M. van Alphen: Proc. Netherlands Roy. Acad. Sci. **33** (1930) 1106.
- [40] H. Yang, B. Fauqué, L. Malone, A. B. Antunes, Z. Zhu, C. Uher, and K. Behnia: Nat. Commun. **1** (2010) 47 EP.
- [41] P. Sullivan and G. Seidel: Phys. Lett. **25A** (1967) 229.
- [42] G. Bellessa: Phys. Rev. B **7** (1973) 2400.
- [43] C. Kittel: *Introduction to Solid State Physics* (Wiley, New York, 2005) 8th ed., p. 218.
- [44] M. P. Vecchi and M. S. Dresselhaus: Phys. Rev. B **9** (1974) 3257.
- [45] B. Fauqué, D. LeBoeuf, B. Vignolle, M. Nardone, C. Proust, and K. Behnia: Phys. Rev. Lett. **110** (2013) 266601.
- [46] K. Akiba, A. Miyake, H. Yaguchi, A. Matsuo, K. Kindo, and M. Tokunaga: J. Phys. Soc. Jpn. **84** (2015) 054709.
- [47] K. Akiba, A. Miyake, Y. Akahama, K. Matsubayashi, Y. Uwatoko, H. Arai, Y. Fuseya, and M. Tokunaga: J. Phys. Soc. Jpn. **84** (2015) 073708.
- [48] R. Y. Chen, Z. G. Chen, X.-Y. Song, J. A. Schneeloch, G. D. Gu, F. Wang, and N. L. Wang: Phys. Rev. Lett. **115** (2015) 176404.
- [49] Y. Zhao, H. Liu, C. Zhang, H. Wang, J. Wang, Z. Lin, Y. Xing, H. Lu, J. Liu, Y. Wang, S. M. Brombosz, Z. Xiao, S. Jia, X. C. Xie, and J. Wang: Phys. Rev. X **5** (2015) 031037.

- [50] P. A. M. Dirac: Proc. R. Soc. Lond. A **117** (1928) 610.
- [51] P. A. Wolff: J. Phys. Chem. Solids **25** (1964) 1057.
- [52] Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **84** (2015) 012001.
- [53] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim: Rev. Mod. Phys. **81** (2009) 109.
- [54] A. Kobayashi, S. Katayama, Y. Suzumura, and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 034711.
- [55] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov: Science **306** (2004) 666.
- [56] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov: Nature **438** (2005) 197 EP .
- [57] H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 043711.
- [58] S. Katayama, A. Kobayashi, and Y. Suzumura: J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 2.
- [59] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z.-X. Shen: Science **325** (2009).
- [60] 柳瀬陽一 and 播磨尚朝: 固体物理 **46** (2011) 229.
- [61] 柳瀬陽一 and 播磨尚朝: 固体物理 **46** (2011) 283.
- [62] 柳瀬陽一 and 播磨尚朝: 固体物理 **47** (2012) 101.
- [63] H. Hayasaka and Y. Fuseya: J. Phys: Condens. Matter **28** (2016) 31LT01.
- [64] K. Akiba, A. Miyake, H. Sakai, K. Katayama, H. Murakawa, N. Hanasaki, S. Takaoka, Y. Nakanishi, M. Yoshizawa, and M. Tokunaga: Phys. Rev. B **98** (2018) 115144.
- [65] Y. Yafet: Solid State Phys. **14** (1963) 1 .
- [66] S. Y. Zhou, G. H. Gweon, J. Graf, A. V. Fedorov, C. D. Spataru, R. D. Diehl, Y. Kopelevich, D. H. Lee, S. G. Louie, and A. Lanzara: Nature Physics **2** (2006) 595 EP .
- [67] S. M. Young, S. Zaheer, J. C. Y. Teo, C. L. Kane, E. J. Mele, and A. M. Rappe: Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 140405.

- [68] Z. Wang, H. Weng, Q. Wu, X. Dai, and Z. Fang: Phys. Rev. B **88** (2013) 125427.
- [69] B.-J. Yang and N. Nagaosa: Nat. Commun. **5** (2014) 4898 EP .
- [70] M. H. Cohen and E. I. Blount: Phil. Mag. **5** (1960).
- [71] Y. Fuseya, Z. Zhu, B. Fauqué, W. Kang, B. Lenoir, and K. Behnia: Phys. Rev. Lett. **115** (2015) 216401.
- [72] J. Sòlyom: *Fundamentals of the Physics of Solids* (Springer, 2010).
- [73] P. Hofmann: Prog. Surf. Sci. **81** (2006) 191.
- [74] M. Dresselhaus: in *The physics of semimetals and narrow-gap semiconductors: proceedings*, ed. D. Carter and R. Bate (Pergamon Press, 1971), Vol. 32 [Suppl. 1] of *J. Phys. Chem. Solids*, p. 3.
- [75] 伏屋雄紀: ビスマス研究 温故知新 (2008), Vol. 335, pp. 83–100.
- [76] Y. Liu and R. E. Allen: Phys. Rev. B **52** (1995).
- [77] S. Mase: J. Phys. Soc. Jpn. **13** (1958) 434.
- [78] V. Edel'man: Uspekhi Fizicheskikh Nauk **123** (1977) 257.
- [79] L. M. Falicov and S. Golin: Phys. Rev. **137** (1965) A871.
- [80] L. M. Falicov and P. J. Lin: Phys. Rev. **141** (1966) 562.
- [81] L. G. Ferreira: J. Phys. Chem. Solids **28** (1967) 1891 .
- [82] L. G. Ferreira: J. Phys. Chem. Solids **29** (1968) 357.
- [83] S. Golin: Phys. Rev. **166** (1968) 643.
- [84] P. J. Lin and L. M. Falicov: Phys. Rev. **142** (1966) 441.
- [85] J. H. Xu, E. G. Wang, C. S. Ting, and W. P. Su: Phys. Rev. B **48** (1993) 17271.
- [86] Y. Ohtsubo, L. Perfetti, M. O. Goerbig, P. L. Fèvre, F. Bertran, and A. Taleb-Ibrahimi: New J. Phys. **15** (2013) 033041.
- [87] Y. Ohtsubo and S. Kimura: New J. Phys. **18** (2016) 123015.
- [88] Y. Fuseya and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **87** (2018) 044710.
- [89] A. v. Ettingshausen and W. Nernst: Annalen der Physik **10** (1886) 343.

- [90] P. Kapitza: Proc. R. Soc. Lond. A **119** (1928) 358.
- [91] J. K. Galt, W. A. Vager, F. R. Meritt, B. B. Cetlin, and H. W. Dail Jr.: Phys. Rev. **100** (1955).
- [92] B. A. Green and B. S. Chandrasekhar: Phys. Rev. Lett. **11** (1963) 331.
- [93] Z. Zhu, A. Collaudin, B. Fauqué, W. Kang, and K. Behnia: Nature Physics **8** (2012) 89.
- [94] W. R. Datars: Phys. Rev. **126** (1962) 975.
- [95] L. Eriksson, O. Beckman, and S. Hörnfeldt: J. Phys. Chem. Solids **25** (1964) 1339 .
- [96] G. N. Rao, N. H. Zebouni, C. G. Grenier, and J. M. Reynolds: Phys. Rev. **133** (1964) A141.
- [97] L. Windmiller and M. Priestley: Solid State Comm. **3** (1965) 199 .
- [98] O. Öktü and G. A. Saunders: Proc. R. Soc. London, Ser. A **91** (1967) 156.
- [99] G. Saunders and Ö. Öktü: J. Phys. Chem. Solids **29** (1968) 327 .
- [100] H. K. Collan, M. Krusius, and G. R. Pickett: Phys. Rev. B **1** (1970) 2888.
- [101] J. Rose and R. Schuchardt: physica status solidi (b) **117** (1983) 213.
- [102] L. Fu and C. L. Kane: Phys. Rev. B **76** (2007) 045302.
- [103] K. Sugawara, T. Sato, S. Souma, T. Takahashi, M. Arai, and T. Sasaki: Phys. Rev. Lett. **96** (2006) 046411.
- [104] M. Bianchi, D. Guan, A. Stróżecka, C. H. Voetmann, S. Bao, J. I. Pascual, A. Eiguren, and P. Hofmann: Phys. Rev. B **85** (2012) 155431.
- [105] A. B. Pippard: *Magnetoresistance in Metals* (Cambridge University Press, 1989).
- [106] A. C. Beer: *Galvanomagnetic effects in semiconductors* (Number 4 in Solid state physics. Supplement. Academic Press, 1963), number 4 in Solid state physics. Supplement.
- [107] W. Thomson: Proc. R. Soc. Lond. A **8** (1857) 546.
- [108] P. Kapitza: Proc. R. Soc. Lond. A **123** (1929) 292.
- [109] H. Jones and C. Zener: Proc. R. Soc. London, Ser. A **145** (1934) 268.

- [110] L. Davis: Phys. Rev. **56** (1939) 93.
- [111] R. G. Chambers: Proc. R. Soc. Lond. A **238** (1957) 344.
- [112] P. B. Alers and R. T. Webber: Phys. Rev. **91** (1953) 1060.
- [113] I. M. Lifshitz, M. I. Azbel, and M. I. Kaganov: Sov. Phys. JETP **4** (1957) 41.
- [114] H. P. R. Frederikse, W. R. Hosler, and W. R. Thurber: Phys. Rev. **143** (1966) 648.
- [115] H. J. Mackey and J. R. Sybert: Phys. Rev. **180** (1969) 678.
- [116] A. A. Abrikosov: Sov. Phys. JETP **29** (1969) 746.
- [117] Z. Sumengen, N. Turetken, and G. A. Sauders: J. Phys. C: Solid State Phys. **7** (1974) 2204.
- [118] B. Abeles and S. Meiboom: Phys. Rev. **101** (1956).
- [119] J. E. Aubrey: J. Phys. F **1** (1971) 493.
- [120] A. A. Abrikosov: Phys. Rev. B **58** (1998) 2788.
- [121] A. A. Abrikosov: EPL **49** (2000) 789.
- [122] A. A. Abrikosov: J. Phys. A: Math. Gen. **36** (2003) 9119.
- [123] S. Mase, S. von Molnar, and A. W. Lawson: Phys. Rev. **127** (1962) 1030.
- [124] S. Sun, Q. Wang, P. J. Guo, K. Liu, and H. Lei: New J. Phys. **18** (2016) 082002.
- [125] Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 013704.
- [126] K. Seeger: *Semiconductor Physics - An Introduction* (Springer, 2004) 6th ed., Chap. 4, p. 54.
- [127] C. Jacoboni: *Theory of Electron Transport in Semiconductors* (Springer Series in Solid-State Science. Springer, 2010), Springer Series in Solid-State Science, Chap. 11, p. 188.
- [128] N. M. R. Peres, J. M. B. Lopes dos Santos, and T. Stauber: Phys. Rev. B **76** (2007) 073412.
- [129] M. Owada, Y. Awashima, and Y. Fuseya: J. Phys: Condens. Matter **30** (2018) 445601.

- [130] R. Hartman: Phys. Rev. **181** (1969) 1070.
- [131] H. Y. Lv, W. J. Lu, D. F. Shao, Y. Liu, S. G. Tan, and Y. P. Sun: EPL **110** (2015) 37004.
- [132] Z. Zhu, X. Lin, J. Liu, B. Fauqué, Q. Tao, C. Yang, Y. Shi, and K. Behnia: Phys. Rev. Lett. **114** (2015) 176601.
- [133] G. E. Smith, G. A. Barraf, and J. M. Rowell: Phys. Rev. **135** (1964) A1118.
- [134] Z. Zhu, B. Fauqué, L. Malone, A. B. Antunes, Y. Fuseya, and K. Behnia: Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. **109** (2012) 14813.
- [135] J. Klier, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin: Phys. Rev. B **96** (2017) 214209.
- [136] A. A. Abrikosov: Phys. Rev. B **60** (1999) 4231.
- [137] C. M. Wang and X. L. Lei: Phys. Rev. B **86** (2012) 035442.
- [138] J. C. W. Song, G. Refael, and P. A. Lee: Phys. Rev. B **92** (2015) 180204.
- [139] X. Xiao, K. T. Law, and P. A. Lee: Phys. Rev. B **96** (2017) 165101.
- [140] T. Osada: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 084711.
- [141] T. Osada: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 033708.
- [142] M. Assili and S. Haddad: J. Phys: Condens. Matter **25** (2013) 365503.
- [143] N. Tajima, S. Sugawara, R. Kato, Y. Nishio, and K. Kajita: Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 176403.
- [144] G. A. Baraff: Phys. Rev. **137** (1965) A842.
- [145] M. Maltz and M. S. Dresselhaus: Phys. Rev. B **2** (1970) 2877.
- [146] M. P. Vecchi, J. R. Pereira, and M. S. Dresselhaus: Phys. Rev. B **14** (1976).
- [147] N. B. Brandt and M. V. Razumeenko: Sov. Phys. - JETP **12** (1961) 198.
- [148] B. Lax, J. G. Mavroides, H. J. Zeiger, and R. J. Keyes: Phys. Rev. Lett. **5** (1960) 241.
- [149] B. Abeles and S. Meiboom: Phys. Rev. **95** (1954) 95.
- [150] A. A. Abrikosov: *Fundamentals of the Theory of Metals* (Fundamentals of the Theory of Metals. North-Holland, 1988), Fundamentals of the Theory of Metals.

- [151] N. Ashcroft and N. Mermin: *Solid State Physics* (Saunders College, Philadelphia, 1976).
- [152] 辻内順平: 応用画像解析 (共立出版, 1981).
- [153] 尾崎弘 and 谷口慶治: 画像処理 –その基礎から応用まで (共立出版, 1988).
- [154] 武田正則: 基礎からの画像処理 - 「Basic」「C言語」プログラム対照 (工学社, 1996).
- [155] L. Onsager: *Phil. Mag.* **43** (1952) 1006.
- [156] D. Shoenberg: *Magnetic Oscillations in Metals* (Cambridge Monographs on Physics. Cambridge University Press, 1984), Cambridge Monographs on Physics.
- [157] J. B. Ketterson and R. W. Stark: *Phys. Rev.* **156** (1967) 748.

関連論文の印刷公表の方法及び時期

- (1) 全著者名：Mitsuaki Owada and Yuki Fuseya

論文題目：「Magnetoelectricity of Dirac electrons in bismuth」

印刷公表の方法及び時期：平成 27 年 4 月 J. Phys. Conf. Series **603** 012023 (2015)

- (2) 全著者名：Mitsuaki Owada, Yudai Awashima and Yuki Fuseya

論文題目：「Corrections to the magnetoresistance formula for semimetals with Dirac electrons: the Boltzmann equation approach validated by the Kubo formula」

印刷公表の方法及び時期：平成 30 年 10 月 J. Phys. Condens. Matter **30** 445601 (2018)