

## 論文の内容の要旨

論文題目	行列力学を用いたスピン分裂ランダウ準位の非摂動理論
学位申請者	猪崎 優喜

物性物理学では何らかの外場をかけてその応答を見ることが基本である。その外場の一つが磁場である。磁場中の電子状態にグリーン関数や久保公式を用いることで多くの物理量が計算可能になる。磁場中エネルギーを計算することは、物理量を計算する上での最初の一步である。磁場中のエネルギー計算が必要な例として、スピン軌道結合効果があげられる。スピン分裂の大きさを特徴付ける  $g$  因子は、自由電子の場合 2 であることが知られている。しかし結晶中では、スピン軌道結合の効果によりスピン分裂の大きさが変化し、 $g$  因子は 2 から大きく異なる値を示す場合がある。スピン分裂幅を計算することで、結晶中のスピン軌道結合を直接的に評価できる (スピン分裂変数)。スピン分裂変数はベリー位相と比例の関係にあり、近年注目を集めているトポロジカル物質とも密接に関係がある。結晶中のスピン軌道結合効果を評価するためには磁場中電子状態を精緻に計算する必要がある。このように磁場中の電子状態を精緻に計算することは、物性を調査する上で基礎的かつ重要なアプローチの一つである。

現在、多くの場合磁場中エネルギーの計算にはボーア-ゾンマーフェルトの量子化条件が用いられている。しかしこれは半古典的な手法であり、強スピン軌道結合系物質における異常な  $g$  因子の説明はできなかった。Luttinger と Kohn の理論により、原理的には  $k \cdot p$  理論を用いることで量子論の枠組みで磁場中エネルギーの計算が可能である。しかし、非可換な演算子  $\pi (=p - eA)$  の存在により単純な数値対角化が許されず、行列サイズが大きい多バンドのハミルトニアンを解くことは困難であった。この困難の回避策として、一種の摂動論である Löwdin partitioning が用いられた。この手法により弱磁場領域に限り、磁場中エネルギーを解析的に導出することが近年可能となった。この手法を用いて計算された、スピン分裂幅とサイクロトロンエネルギーの比で定義されたスピン分裂変数 (ゼーマン-サイクロトロン比) は、Bi では実験と理論で良い一致を示していたが、PbTe では実験と理論の結果に大きな違いが存在した。本研究では非可換な演算子  $\pi$  の扱いに注目し、行列力学の概念を援用することで、強磁場領域であっても非摂動的に磁場中エネルギーを計算出来る新しい手法を開発した ( $\pi$ -matrix)。この手法により、全磁場領域で多バンドのエネルギーが厳密に計算可能となった。

我々は $\pi$ -matrix法を用いることでディラック電子系の代表物質であるPbTeの磁場中電子状態の計算を行った。この手法を用いることで、以下の3つの結果を得た。

- (1) 今まで磁場に依存しないとされていたゼーマン-サイクロトロン比が磁場に大きく依存することが分かりPbTeにおける実験と理論の差を埋めることが出来た。
- (2)  $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ の計算を行い、ゼーマンサイクロトロン比の値が1の境に磁場依存性が変化することが分かった。
- (3) 今まで同一であると考えられていたゼーマン-サイクロトロン比により計算されたスピン分裂変数の値と、fan diagram plotにより計算されたスピン分裂変数の値が異なることが分かった。

また、同じくディラック電子系物質であるBiの電子状態にも $\pi$ -matrix法を適用した。この結果、PbTeと同様にBiでもゼーマン-サイクロトロン比に磁場依存性があることを明らかにした。先行研究では価電子帯と伝導帯の最低ランダウ準位がバンド反発を起こすことが示唆されている。これに対して $\pi$ -matrixを使用した計算結果では最低ランダウ準位のバンド反発が起こらないことを明らかにした。

トポロジカル半金属物質である $\text{Cd}_3\text{As}_2$ での計算も行った。 $\text{Cd}_3\text{As}_2$ は結晶軸上に二つの円錐形バンドが存在し、典型的なトポロジカル半金属物質として注目されている。トポロジカル半金属物質の特異性は、特に磁場中で表れると期待される。先行研究では、2ノードや2バンドの簡単な模型を用いることで、 $\text{Cd}_3\text{As}_2$ の磁場中電子状態を計算している。本研究では、Wangらによる $\text{Cd}_3\text{As}_2$ の4バンド模型と $\pi$ -matrix法を用いて、磁場中電子状態を厳密に計算した。これにより、 $\text{Cd}_3\text{As}_2$ の多バンド磁場中電子状態は簡単な模型を使用した場合に予想される4次関数的な形より複雑であることが分かった。この結果から状態密度における量子振動の計算を行った。また、この結果からfan diagram plotを作成し、その結果からスピン分裂変数の計算を行った。また、スピン分裂変数の化学エネルギー依存性について議論を行った。この結果から、先行研究で簡易的な模型により示されていたベリー位相の特異な変異とは異なるベリー位相の変化を明らかにした。

## 論文審査の結果の要旨

学位申請者氏名 猪 崎 優 喜

審査委員主査 伏 屋 雄 紀

委員 大 淵 泰 司

委員 佐々木 成 朗

委員 中 村 淳

委員 松 林 和 幸

(\*自筆署名の場合に限り、押印省略可)

第1章では、序論として磁場中エネルギー計算における現状の問題点と本論文の構成について記述されている。また、本論文の着目物質が含まれるディラック系物質とトポロジカル物質について概説が記されている。

第2章では、磁場中エネルギー等、本博士論文に必要な基礎知識が記されている。磁場中効果を導入する際に鍵となる「力学的運動量」の性質を説明し、それを元に自由電子の磁場中エネルギーと、磁場中の測定で有力な手法の一つである量子振動について説明している。また、結晶中の磁場中効果を導入する手法として半古典的な手法であるボーア-ゾンマーフェルトの量子化条件と本博士論文の土台となる $k \cdot p$ 理論について記述している。最後に本論文のもう一つの鍵となるスピン軌道結合効果とその評価方法であるスピン分裂変数について概説されている。

第3章では、本論文の着目物質である $\text{Cd}_3\text{As}_2$ が含まれるトポロジカル物質について概説している。トポロジカル物質の鍵となるベリー位相について説明し、ベリー位相とスピン分裂変数の関係について述べられている。また、トポロジカル半金属物質について概説し、磁場中での実験例を紹介している。

第4章では、 $k \cdot p$ 理論を用いた磁場中エネルギーの計算方法について述べられている。ディラック系物質の有効模型について解説し、その有効模型の磁場中エネルギーの計算方法について述べられている。その後、一般性を保ったまま磁場中エネルギーを計算する手法として、先行研究で用いられた摂動論を使用した手法について説明されている。その他の計算方法についても検討がされている。また、本研究で使用された fan-diagram plotの作成方法とその性質について有効模型を用いて説明している。

第5章では、本論文の最大の特徴である、独自の手法 $\pi$ -matrix法について説明されている。行列力学の手法に習い、力学的運動量を交換関係を満たすような行列で表現することが述べられている。この $\pi$ -matrix法を用いて、自由電子とディラック模型で磁場中エネルギーの計算を行い、既存の理解と一致していることが示されている。

第6章では、 $\pi$ -matrix法を用いてディラック電子系物質であるPbTeとBiにおける磁場中エネルギーとスピン分裂変数の計算結果について述べられている。PbTeでは $\pi$ -matrix法の計算により既存の理解を覆す結果を得られ、実験と理論の不一致を解消できたことが述べられている。また、今まで同一であると信じられていたスピン分裂変数の評価方法による違いがあることが明らかになったことが述べられている。Biでも同様に $\pi$ -matrix法の計算から既存の理解を覆す結果を得られ、既存の現象論的な模型と比較が行われている。

第7章では、第6章で扱ったPbTeやBiとはやや分野が異なるトポロジカル半金属物質であるCd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>での $\pi$ -matrix法による磁場中エネルギーの計算結果について述べられている。 $\pi$ -matrix法による多バンド模型の磁場中エネルギー計算により、有効模型等の簡易的な模型で予想された磁場中での4次関数的な振る舞いとは異なるエネルギー状態が明らかになったことが示されている。また、この結果からfan diagram plotを作成し、その結果からスピン分裂変数の計算した結果が示されている。スピン分裂変数の化学エネルギー依存性について議論し、先行研究で簡易的な模型により示されていたベリー位相の急激な変化とは異なるベリー位相の変化が示されている。

第8章では、本論文全体のまとめが行われている。

本論文で得られた、独自の手法である $\pi$ -matrix法とその計算結果は基礎科学的問題を解明する学術的意義がある。よって、本論文は博士(理学)の学位論文として十分な価値を有するものと認める。