

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

猪崎 優喜

電気通信大学大学院 情報理工学研究科
博士(理学)の学位申請論文

2021年3月

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

博士論文審査委員会

主査 伏屋 雄紀 准教授

委員 大淵 泰司 准教授

委員 中村 淳 教授

委員 佐々木 成朗 教授

委員 松林 和幸 准教授

著作権所有者

猪崎 優喜

2021年

Nonperturbative theory of spin-split Landau levels based on matrix mechanics

Yuki Izaki

Abstract

In principle, the energy levels under a magnetic field can be precisely calculated based on the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory, as was shown by Luttinger and Kohn. In practice, however, it is too complex to calculate the energy levels of electrons in solids because of the noncommutativity of the kinematical momentum operator $\boldsymbol{\pi}$ which does not allow us to use the simple diagonalization technique. Even today, the energy levels under the field for multiband systems can be obtained perturbatively using the Lowdin partitioning. The theory using the Lowdin partitioning can give a good agreement with the experiment on Bi. However, for PbTe, there is a considerable discrepancy between the theory and experiment. In this study, we introduce a new nonperturbative technique ($\boldsymbol{\pi}$ -matrix method) to calculate exactly the energy levels under the magnetic field, considering the noncommutativity of $\boldsymbol{\pi}$. By using this technique, we can rigorously calculate the energy of electrons in solids under the magnetic field. We apply this method to PbTe, a typical Dirac electron system, and obtained the spin-splitting parameter that agree with the experiment. This result can rectify the existing discrepancy between the experimental and theoretical results. We also apply this method to Cd₃As₂, a typical Dirac semimetal. We show that the energy levels of Cd₃As₂ exhibits anomalous properties that the previous studies have never encountered

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

猪崎 優喜

概要

Luttinger と Kohn の理論により原理的には磁場中の電子状態を厳密に計算可能である。しかし、現実的には非可換な演算子 ($\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$) の存在により、行列サイズが大きくなる多バンド系の磁場中電子状態を計算することは困難であった。我々は、非可換な演算子 $\boldsymbol{\pi}$ の扱いに注目し、これを行列力学に基づいて表現することを考えた ($\boldsymbol{\pi}$ -matrix 法)。この手法により、厳密な磁場中電子状態の数値的計算を可能とした。さらに、ディラック電子系物質の典型として知られる PbTe 等で、相対論効果に関する従来の常識を覆す結果を得た。これにより実験と理論の不一致を解消できた。またディラック半金属物質である Cd₃As₂ でも、多バンドの磁場中電子状態を計算することにより、既存の簡易的なモデルによる結果とは異なる特異な電子状態をもつことが分かった。

目次

第 1 章	序論	3
第 2 章	磁場中の電子状態	7
2.1	自由電子の磁場中電子状態	7
2.2	量子振動	9
2.3	磁場中電子の半古典的手法	10
2.4	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論	12
2.4.1	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論	12
2.4.2	Luttinger-Kohn の理論	14
2.5	スピン軌道結合効果とスピン分裂変数	18
第 3 章	トポロジカル物質の性質	23
3.1	ゲージ変換とベリー位相	23
3.2	ベリー位相とスピン分裂変数	27
3.3	トポロジカル半金属	28
3.3.1	ワイル半金属およびディラック半金属と対称性	29
3.3.2	トポロジカル半金属における量子振動	30
第 4 章	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型における磁場中電子状態とスピン分裂変数	32
4.1	ディラック電子系物質の有効模型	32
4.1.1	ディラック模型	32
4.1.2	拡張ディラック模型	36
4.2	多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型	37
4.3	Löwdin partitioning による解析的手法	37
4.3.1	2 バンド + 多バンド効果 (対角項のみ)	40
4.3.2	非対角項への摂動を考えた計算	45
4.4	磁場中演算子の固有関数への演算	47
4.4.1	ディラック模型 + 固有値演算	47
4.4.2	多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型 + 固有値演算	48
4.5	Fan-diagram plot によるスピン分裂変数の評価	50

4.5.1	自由電子の場合	50
4.5.2	ディラック電子の場合	51
4.5.3	拡張ディラック模型の場合	52
第 5 章	磁場中電子状態の非摂動理論	53
5.1	独自の手法, π -matrix	53
5.2	π -matrix の応用例 -自由電子の場合-	54
5.3	π -matrix の応用例 -ディラック電子の場合-	56
5.4	π -matrix の応用例 -多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型の場合-	56
第 6 章	ディラック電子系物質におけるスピン分裂変数の非摂動理論	59
6.1	PbTe における異常なゼーマン効果	60
6.1.1	Lent 模型	60
6.1.2	Lach-hab 模型	66
6.1.3	PbTe のまとめ	67
6.2	Bi における異常なゼーマン効果	69
6.2.1	Trigonal 方向	70
6.2.2	Bisectrix 方向	71
6.2.3	Binary 方向	72
6.2.4	Bi のまとめ	73
第 7 章	Cd_3As_2 におけるスピン分裂変数の非摂動理論	77
7.1	結晶構造	78
7.2	模型	78
7.2.1	Z.Wang モデル	79
7.2.2	Jeon 模型	81
7.2.3	2 ノードモデル	83
7.3	多バンド模型における磁場中電子状態	84
7.3.1	伝導帯について	86
7.3.2	価電子帯について	90
第 8 章	まとめ	93
	謝辞	94
	参考文献	95

第 1 章

序論

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。磁場中電子状態を計算することは、物理量を計算する上での最初の一步である。例として、結晶中のスピン軌道結合効果について考える。スピン軌道結合効果が大きい半導体や半金属（強スピン軌道結合系）では、バンドギャップ等、系を特徴付けるエネルギースケールに対してスピン軌道結合効果のエネルギースケールが大きくなることから、電子状態が大きく変化する。物質の理解や新物質の設計においてスピン軌道結合効果を理解することは必要不可欠である。スピン軌道結合効果は孤立した原子の場合には十分よく理解されているが、結晶中では結晶構造やその対称性に依存し、それ単体を理解することは困難である。スピン軌道結合効果が現れるのが、磁場による応答である。スピン軌道結合効果がない場合、磁場中ではエネルギーがランダウ準位に分裂する。スピン軌道結合効果によりランダウ準位がさらに二つの準位に分裂する。この分裂幅を評価することで、結晶中のスピン軌道結合効果を理解できる。結晶中のスピン軌道結合効果を理解するためには、精緻な磁場中エネルギー計算が必要である。スピン軌道結合効果に限らず、磁気抵抗や磁化率でもやはり出発点は磁場中エネルギーであり、磁場中エネルギー計算は幅広い分野にとって基盤となる理論である。

この最初の一步ですら困難があった。図 1.0.1 に従来の磁場中エネルギー計算手法の概念図を示す。多くの場合、磁場中効果の導入には Bohr-Sommerfeld の量子化条件が用いられてきた [1–5]。バンド計算（第一原理計算や強束縛模型）に対して量子化条件を用いることで磁場中効果を導入し、量子振動の計算を行う。この枠組みでは、スタートのバンド計算とゴールの量子振動が量子論なのに対し、間に挟む量子化条件は半古典論である。そのため、強スピン軌道結合系における異常な g 因子の問題に対処できなかった。これに対して、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論を用いることで量子論の枠組みで磁場中効果を厳密に導入できる [6]。 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論では、 $\hbar\mathbf{k}$ を力学的運動量 $\boldsymbol{\pi}$ に置き換えるだけで磁場中効果を厳密に導入できる。しかし、この $\boldsymbol{\pi}$ が非可換な演算子であるため、有効模型を使う等、物質ごとに個別な対処を必要としていた。例えば、ディラック電子系物質ではディラック模型等の 2 バンド模型（ 4×4 行列）、ワイル半金属物質では 2 ノード模型（ 2×2 行列）等、その物質群の特

従来までのアプローチ

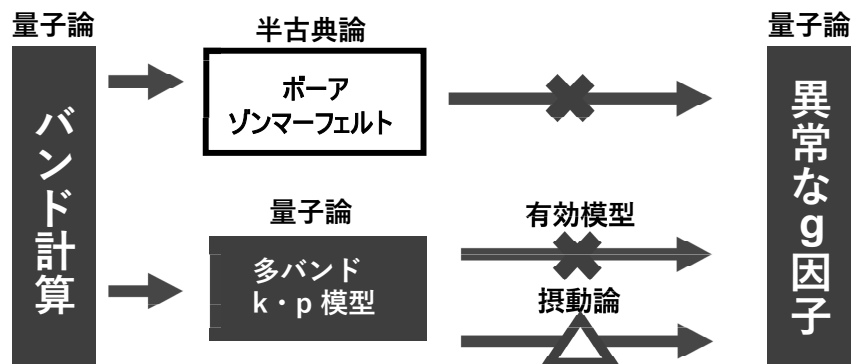


図 1.0.1 従来の磁場中エネルギー計算手法の概念図

徴を抽出した有効模型が使用された。これらの有効模型は、それぞれの物質群の特徴を理解する上では有用な模型であり、実際これらの模型を用いることで、グリーン関数を用いた複雑な解析計算等も行われてきた [7–9]。一方で実際の物質では、それらの特徴的な部分以外にも様々なバンドを有しており、物質個々の多様性を理解するためにはより複雑な電子状態に取り組む必要がある。理想は、第一原理計算や強束縛模型等の多バンドのエネルギー分散から磁場中のエネルギー分散を得られることである、この課題に対して、一種の摂動論である Löwdin partitioning を用いて多バンド効果 1 バンドに加える手法が提案された。これにより、弱磁場に限り量子論の枠組みで磁場中の電子状態の計算が可能となり、強スピン軌道結合系における異常な g 因子の問題も解決できた [10]。

この摂動論を用いた方法でスピン分裂変数が計算された。スピン分裂変数はスピン軌道結合効果による分裂幅 (ゼーマン分裂) と元々の磁場による分裂幅 (サイクロトロンエネルギー) の比で定義される。これにより、結晶中の相対論効果を評価できる。スピン分裂変数は量子振動の位相部分として観測され、ベリー位相とも比例関係をもつ。スピン分解量子振動により測定可能であり、物質間で統一的に評価可能な量である。この量は Bi や PbTe などディラック電子系物質を中心に議論されてきた [10–14]。近年では、トポロジカル物質である Bi_2Se_3 でもスピン分裂変数の議論が行われ [15–17]、幅広い範囲で注目を集め出している。

ディラック電子系物質の特徴は、ディラックコーンとよばれる小さなギャップを持つ円錐形のバンド分散を持つことである。ただし円錐形のバンドをもつというだけでは、固体中のディラック電子をもつとは言えない。固体中のディラック電子の本質はスピン軌道結合効果であり、固体中のディラック電子かの判断には磁場をかけてスピン軌道結合効果による応答を確認する必要がある。ディラック模型では最低ランダウ準位が磁場に依存しないことや、スピン分裂変数が 1 となることがわかっており、これと比較することでディラック電子系らしさを評価できる [14]。ディラック電子系物質である Bi では、摂動論を

使用してスピン分裂変数の計算が行われた。これにより、自由電子の 500 倍もある Bi の g 因子の謎は解明された [10]。一方で、PbTe ではビスマスと同様の摂動論によるスピン分裂変数の計算結果と実験結果に 60% 程度の差があった [14, 18]。また、この摂動論を用いた手法は弱磁場極限を使用していることに該当しており、強磁場での議論を行うことができなかった。このようにディラック電子系物質でも依然として磁場中エネルギー計算の問題が存在した。

トポロジカル物質の分野では、ベリー位相による分類が進んでいる。ここからは、物質ごとの多様性を調査する段階となる。ベリー位相はスピン分裂変数と比例関係にあり、トポロジカル物質でもスピン軌道結合効果を十分に理解する必要がある。トポロジカル物質の中で、近年注目が集まっているのがトポロジカル半金属物質である。トポロジカル半金属物質の最大の特徴はゼロ磁場の分散が二つの円錐形のコーンをもつことである。この特異な電子状態が磁場中でどのようなエネルギー分散をもつかは当然の疑問である。トポロジカル半金属物質では 2 ノードの簡易的な模型や 2 バンドに現象論効果を加えた模型を用いて磁場中エネルギーの計算が行われている [19–22]。Bi における異常な g 因子の問題の場合と同様に、トポロジカル物質の分野でも多バンド効果を含んだ磁場中エネルギー分散が有効模型の場合と大きく異なることが容易に予想される。実際、摂動論で多バンド効果を加えた手法による議論で、0 と 1 しかとらないと信じられていたベリー位相が実は連続的な数であるということが示されている [14]。今後の新奇物性探索に際し、定量的に精緻な理論が必要であり、トポロジカル半金属物質でも多バンド効果を含んだ磁場中エネルギー分散の計算が必要となることが予想される。

現在では第一原理計算の手法も発展しており、Wien2k や VASP 等のパッケージを使用することで比較的容易にバンド計算が可能となっている。あとは「量子論の枠組み」で「多バンド」の磁場中エネルギーを「正確に」計算する手法さえあれば、全ての物質で統一的に磁場中エネルギーの計算が可能となるはずである。本博士論文では、「量子論の枠組み」で「多バンド」の磁場中エネルギーを「厳密に」計算する手法 (π -matrix) を開発し [23]、それを用いてディラック電子系物質とトポロジカル物質の異なる二つの物質群で磁場中エネルギーの計算を行った結果を報告する。

本研究では磁場中効果を導入した際に現れる非可換な演算子 π の存在が最大の問題点であると考え、行列力学の手法に習い π を交換関係を満たす行列で表現した (π -matrix 法, 図 1.0.2)。この手法を用いてディラック電子系物質である PbTe と Bi、トポロジカル半金属物質である Cd_3As_2 の磁場中エネルギー分散の計算を行った。その結果、今まで磁場に対して定数だと信じられていたスピン分裂変数が実は磁場に対して大きく依存していることが分かった。また、ゼロ磁場付近では摂動論を用いた結果と同じ値をとり、有限磁場では実験と同じような値まで下がっていくことが分かり、これにより実験と理論の間に差が生じていたことがわかった。また、今まで同一であると信じられていた二つのスピン分裂変数が実は異なっていることを明らかにした。理論で主に用いられる、ある磁場のゼーマン分裂とサイクロトロンエネルギーの比を取ることで計算されたスピン分裂変数 M_{ZC} が磁場に対して依存するのに対し、実験で主に用いられる fan-diagram plot の x 切

新しい独自のアプローチ

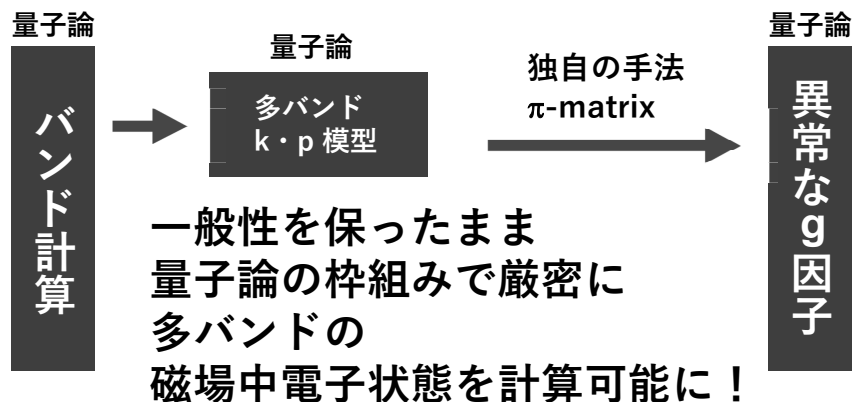


図 1.0.2 新たな磁場中エネルギー計算手法の概念図

片から計算された M_{fan} は化学ポテンシャルに依存することがわかった。このことから今までの結果を再度精査する必要があると考えられる。また、多バンドの磁場中エネルギーを計算したことで、有効模型では得られなかった複雑なエネルギー分散を得た。

本博士論文は、全 8 章で構成されている。第 2 章では自由電子における磁場中エネルギーの計算方法や $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論等、本研究において重要な基礎的な知識について説明する。第 3 章では、トポロジカル物質の分類の鍵となるベリー位相と、スピン分裂変数の関係について述べ、本研究の着目物質である Cd_3As_2 が含まれるトポロジカル半金属物質の概要と、実験結果について簡単に説明する。第 4 章では現在までによく用いられている $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型を使用した磁場中エネルギーの計算手法と、その発展について説明する。第 5 章では、本研究で新たに開発した π -matrix 法について説明する。第 6 章では、ディラック電子系物質であり結晶構造が単純な PbTe と同じくディラック電子系物質であり結晶構造がやや複雑な Bi の磁場中エネルギーを π -matrix 法により計算した結果を述べ、既存の理解との比較を記す。第 7 章では、 π -matrix 法の応用として、トポロジカル半金属物質である Cd_3As_2 の磁場中エネルギーを計算した結果を述べ、簡易的な模型の場合と比較した結果を述べる。第 8 章に本論文の結論、最後に謝辞と参考文献を記した。

第 2 章

磁場中の電子状態

物質の電子状態を知るためには、何らかの外場をかけてその応答を見る必要がある。その外場の一つが、磁場をかけることである。本章では、磁場をかけることでその電子状態がどのように変化するかを述べる。この章を書くにあたり、[24–26] を参考にした。

2.1 自由電子の磁場中電子状態

磁場中の電子状態を計算する場合、ハミルトニアンに対して次の変換を行う。

$$\mathbf{p} \rightarrow \boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A} \quad (2.1.1)$$

ここで現れた $\boldsymbol{\pi}$ は力学的運動量と呼ばれる。 \mathbf{p} は正準運動量であり、

$$[p_i, p_j] = 0 \quad (2.1.2)$$

の関係を持ち、 \mathbf{A} はベクトルポテンシャルで磁場 \mathbf{B} と、

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.1.3)$$

の関係をもつ。力学的運動量の交換関係を考える。

$$\begin{aligned} [\pi_i, \pi_j] &= [p_i + eA_i, p_j + eA_j] \\ &= [p_i, p_j] + e^2 [A_i, A_j] + e(A_i p_j + p_i A_j - A_j p_i - p_j A_i) \end{aligned}$$

第 3 項のみが有限に残る。 $\mathbf{p} = i\hbar\nabla$ と任意の関数 ψ を用いて、

$$p_i A_j \psi = -i\hbar\nabla(A_j \psi) = (p_j A_i - A_i p_j) \psi$$

の関係が得られることから、力学的運動量の交換関係は次のように求まる。

$$\begin{aligned} [\pi_i, \pi_j] &= e[A_i p_j + (p_i A_j - A_j p_i) - A_j p_i - (p_j A_i - A_i p_j)] \\ &= e(p_i A_j - p_j A_i) = i\hbar e \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) \\ &= -i\hbar e \epsilon_{ijk} B_k = \boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi} \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

ここで, ϵ_{ijk} は反対称テンソルである.

力学的運動量 $\boldsymbol{\pi}$ を用いることで, 二次元電子系の磁場中ハミルトニアンは次のように書ける.

$$H = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} \quad (2.1.5)$$

ここからは, 大きさ B の磁場が z 方向にかかっている場合を考える. ランダウゲージ $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ を採用する. このとき, ハミルトニアンは次のように書き換えられる.

$$H = \frac{1}{2m} \left[p_x^2 + (p_y + eBx)^2 \right] \quad (2.1.6)$$

ハミルトニアン H は y に依存しないことから, 波動関数 ψ が y 軸方向は単純な平面波である. 正準運動量 p_y は $\hbar k_y$ と置き換えられ, ハミルトニアンは次のように書き換えられる.

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{e^2 B^2}{2m} \left(\frac{\hbar k_y}{eB} + x \right)^2 \\ &= \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{m\omega_c^2}{2} (x + X)^2 \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

ここで, $\omega_c \equiv eB/m$, $X \equiv \hbar k_y/(eB)$ である. 式 (2.1.7) は調和振動子のハミルトニアンと同様の形である. よって, 波動関数 ψ_{n, k_y} は,

$$\psi_{n, k_y}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{ik_y y} \phi_n(x + X) \quad (2.1.8)$$

である. ここで, L_y は電子を閉じ込めている長方形の y 方向の長さである. また, $\Phi_n(x)$ はエルミート多項式 $H_n(x)$ を用いて,

$$\phi_n(x) = \left(\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi} l_B} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}(x/l_B)^2} H_n \left(\frac{x}{l_B} \right) \quad (2.1.9)$$

と表せる. ここで, $l_B = \sqrt{\hbar/(eB)}$ である. 調和振動子の場合と同様に, この関数 ϕ は昇降演算子 $\pi_{\pm} = (\pi_x \pm \pi_y)/\sqrt{2}$ と,

$$\begin{aligned} \pi_+ \phi_n(x) &= \sqrt{n+1} \phi_{n+1} \\ \pi_- \phi_n(x) &= \sqrt{n} \phi_{n-1} \end{aligned}$$

の関係を持つ. よってエネルギー固有値 E は,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad (2.1.10)$$

となる. ここで, $n = (0, 1, 2, \dots)$ は非負整数であり, ランダウ準位の指標である. 以上のように連続的なエネルギー分散が磁場中では離散的な値をとることが分かる. これをランダウ量子化とよぶ. 連続する指標をもつランダウ準位間のエネルギー差はサイクロ

トロンエネルギーとよばれ、自由電子の場合 $\hbar\omega_c$ である。式 (2.1.10) で表されるランダウ準位は X の値に依らない。そのため、 X が取りうる数だけランダウ準位の縮退が許される。このランダウ準位の縮退の数（縮重度）を考える。 X は条件 $0 \leq X < L_x$ より $0 \leq k_y < (eB/\hbar)L_x$ を満たす必要がある。また、 y 軸方向は単に平面波であることから、 k_y は $2\pi/L_y$ に量子化されている。よって、ランダウ準位の縮重度 $\xi(B)$ は次のように書き表わせる。

$$\xi(B) = \frac{L_y eB}{2\pi \hbar} L_x \equiv \frac{eBS}{h} \quad (2.1.11)$$

S は電子を閉じ込めている長方形の面積を表している。

次に、三次元の自由電子を考える。 z 軸方向に磁場がかかっている場合を考え、ベクトルポテンシャルはランダウゲージ $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ を採用する。磁場と平行な方向は磁場による影響を受けないため、式 (2.1.10) より三次元系の磁場中エネルギーは次のように書ける。

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad (2.1.12)$$

ここまでは $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ で表される分散を持つ場合について議論してきた。単純金属や多くの立方晶系半導体において、そのエネルギー分散が伝導帯の有効質量 m^* と伝導帯の底のエネルギー値 E_c を用いて、

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

でよく近似できることが知られている [25]。この場合、磁場中におけるエネルギーは次のようになる。

$$E_n = E_c + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c^* + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_c^*} \quad (2.1.13)$$

ここで、 $\omega_c^* = eB/m_c^*$ である。自由電子ならびにそれに近い分散を持つ場合、磁場中のエネルギーは十分理解されている。

2.2 量子振動

磁場中の電子状態を観測する有力な方法の一つが、量子振動を観測することである。磁場中でエネルギー分散がランダウ準位に分裂することで、磁場の逆数に比例した周期で状態密度が振動する。その結果物理量が $1/B$ で振動する。磁化率における量子振動をド・ハース-ファン・アルフェン振動と呼び、抵抗率における量子振動をシュブニコフ-ド・ハース振動と呼ぶ。今節では、状態密度の量子振動について概説する。フェルミエネルギー E_F 以下のランダウ準位の最大指数を λ とすると、 $n < \lambda$ において次の関係が成り立つ。

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c < E_F - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} \equiv E'_F \quad (2.2.1)$$

このとき、粒子数 N は、

$$N = (\lambda + 1)\xi \quad (2.2.2)$$

と書ける。ここで ξ は縮重度である。 $(\lambda + \frac{1}{2})\hbar\omega_c = E_F$ となるまで、 λ は一定である。その間は、式 (2.1.11) より縮重度 ξ が磁場の一次に比例することから N は磁場に対して線形に増加する。さらに磁場が増加すると、最大のランダウ準位 $\lambda = n'$ が $\lambda = n' - 1$ に変化する。これにより、粒子数 N に不連続な変化が起こる。磁場中でエネルギー分散がランダウ準位に量子化されることからこのような不連続な変化が起こる。これが量子振動の起源となる。不連続な変化が起こるとき、

$$\left(\lambda + \frac{1}{2}\right) = \frac{E'_F}{\hbar\omega_c} \quad (2.2.3)$$

となることから、 λ の変化は $1/B$ の周期で現れる。粒子数が $1/B$ の周期で不連続な変化を起こすので、状態密度が $1/B$ で振動する。

実際に、自由電子の場合で状態密度の計算を行う。まず、グリーン関数を導入する。

$$G = \frac{1}{E_n - E_F + i\delta} \quad (2.2.4)$$

ここで、 δ は無限少量である。関係式、

$$\begin{aligned} \frac{1}{x + i\delta} &= \frac{P}{x} - i\pi\delta(x) \\ \rightarrow \delta(x) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\frac{1}{x + i\delta} \right) \end{aligned}$$

を用いる。ここで、 P は積分の主値を表し $\delta(x)$ はデルタ関数である。状態密度 D は、

$$D = \sum_{\mathbf{k}} \delta(E_{\mathbf{k}} - E_F) \quad (2.2.5)$$

で定義され、ランダウ準位 E_n を全て足すとグリーン関数を用いて次のように書ける。

$$D = -\frac{\xi}{\pi} \sum_{n=0}^{\xi} \int \text{Im} \left(\frac{1}{E_n - E_F + i\delta} \right) dk_z$$

自由電子の場合の計算結果は図 2.2.1 に示す。状態密度が $1/B$ に比例した周期で振動している。状態密度の発散は $1/2\hbar\omega_c$ ごとに起きている。これは自由電子におけるランダウ準位の底に該当している。つまり、状態密度の発散は E_F がバンドの極値に接したときに起こる。

2.3 磁場中電子の半古典的手法

ポアゾンマーフェルトの量子化条件を用いることで、ランダウ準位が量子化される様子を知ることができる。ポアゾンマーフェルトの量子化条件は次のように表される。

$$\oint pdq = (n + \gamma) 2\pi\hbar \quad (2.3.1)$$

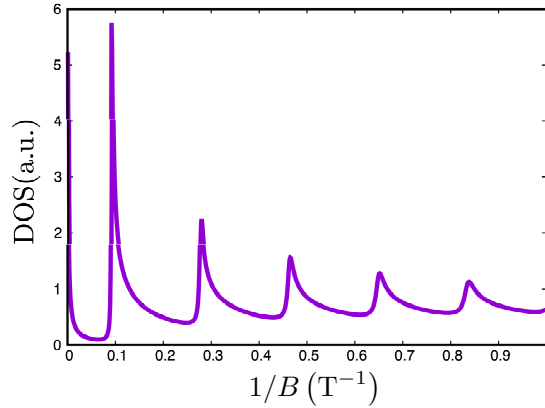


図 2.2.1 自由電子における状態密度の量子振動の様子. $1/B$ に比例した周期で振動していることが分かる.

γ は定数であり, 自由電子等放物線バンドでは $1/2$, 一般的には $1/2$ からややずれる [1,27]. 周回積分は, 磁場に対して垂直な面と等エネルギー面との交差によりつくられる曲線に沿って行われる. ハミルトニアンでは $\hbar\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ の変換を行うことで磁場中効果を導入できる. よって,

$$\begin{aligned} \oint \mathbf{p} d\mathbf{q} &= \oint (\hbar\mathbf{k} - e\mathbf{A}) \cdot d\mathbf{q} \\ &= \oint -e(\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B} + \mathbf{A}) \cdot d\boldsymbol{\rho} \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

と書ける. ここで,

$$\begin{aligned} \hbar\dot{\mathbf{k}} &= -e\mathbf{v} \times \mathbf{B} \\ \dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v} &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \end{aligned}$$

であるので, 磁場に垂直な平面での位置ベクトルを $\boldsymbol{\rho}$ とすると,

$$\hbar\mathbf{k} = -e\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B}$$

となることを使用した. 式 (2.3.2) の右辺第一項目は次のようになる.

$$\begin{aligned} \oint \boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B} \cdot d\boldsymbol{\rho} &= -\mathbf{B} \cdot \oint \boldsymbol{\rho} \times d\boldsymbol{\rho} = -2\pi\rho^2 B \\ &= -2\Phi \end{aligned}$$

ここで Φ は電子が軌道内の磁束である. 式 (2.3.2) 右辺第二項目はストークスの定理から,

$$\begin{aligned} \oint \mathbf{A} \cdot d\boldsymbol{\rho} &= \int (\nabla \times \mathbf{A}) d\boldsymbol{\sigma} \\ &= \int \mathbf{B} d\boldsymbol{\sigma} = \Phi \end{aligned}$$

である。σ は軌道が描く実空間の面積である。最終的に整理すると式 (2.3.2) は次のように書ける、

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = e\Phi \quad (2.3.3)$$

式 (2.3.1) と式 (2.3.3) から、次の関係式が成立する。

$$\Phi = (n + \gamma) \frac{2\pi\hbar}{e} \quad (2.3.4)$$

最後に実空間面積 σ と波数空間の面積 S の関係を考える。ħ $\hat{\mathbf{k}}$ = -e $\hat{\mathbf{r}}$ × \mathbf{B} に磁場方向の単位ベクトル $\hat{\mathbf{k}}_z$ をかける。

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{k}}_z \times \hbar\hat{\mathbf{k}} &= \hat{\mathbf{k}}_z \cdot \mathbf{B} \cdot (-e\hat{\mathbf{r}}) - \hat{\mathbf{k}}_z (-e\hat{\mathbf{r}}) B \\ &= -eB \left[\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{k}}_z (\hat{\mathbf{k}}_z \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right] = eB\hat{\boldsymbol{\rho}} \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

式 (2.3.5) を時間について積分すると次のようになる。

$$\boldsymbol{\rho}(t) - \boldsymbol{\rho}(0) = -\frac{\hbar}{eB} \hat{\mathbf{k}}_z \times [\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)] \quad (2.3.6)$$

この結果から、実空間 $\boldsymbol{\rho}$ から波数空間 \mathbf{k} への変換には ħ/eB をかけて π/2 回転すれば良い。よって、実空間面積 σ と波数空間の面積 S は、

$$\sigma = \hbar^2 e^2 B^2 S \quad (2.3.7)$$

の関係にある。よって、式 (2.3.3) は次のように書き換えることができる。

$$\begin{aligned} \Phi &= B \frac{\hbar^2}{e^2 B^2} S = \frac{2\pi}{e} (n + \gamma) \\ \rightarrow S &= \frac{2\pi e B}{\hbar^2} (n + \gamma) \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

2.4 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論はバンド端における有効質量 m^* を見出すために特に有効である。そのため、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論は有効質量を求められるだけの理論と考えられがちである。しかし実際には、磁場や不純物の効果を厳密に扱える優れた理論に拡張できる。 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論が磁場中や不純物効果を厳密に扱えることを示した J.M.Luttinger と W.Kohn の論文 [6] を中心に $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論について説明する。

2.4.1 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論

まず最初に標準的な $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論を説明する。この方法では、ある波数 k_0 を中心とした狭いブリルアンゾーンに限定し、摂動論を用いることで有効質量を計算する。本論文では、

この手法を Kittel の教科書 [24] にならい, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論と呼ぶ. 一粒子系で周期ポテンシャル $V(x)$ 中の電子を考える. シュレディンガー方程式は次のように書ける.

$$H\psi = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \right] \psi = E\psi \quad (2.4.1)$$

また, ブロッホの定理より波動関数 ψ は次のように表せる.

$$\psi = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.4.2)$$

ここで, n はバンド指標を表し, \mathbf{k} は第一ブリルアンゾーン内の波数を表す. 式 (2.4.1) に式 (2.4.2) を代入する.

$$\begin{aligned} H\psi &= \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \right] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla^2) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + V(r) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= E e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

式 (2.4.3) の二行目第一項目を整理すると,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} (-i\hbar)^2 [-\mathbf{k}^2 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + 2i\mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \nabla u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \nabla^2 u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})] \\ = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right] u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

となる. よって, 式 (2.4.3) の両辺を $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ で割って整理すると次のようになる.

$$\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right\} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.4.5)$$

左辺について, 式 (2.4.1) を考慮すると,

$$\left\{ H + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \right\} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

である. 以上の操作で新たに出てきた項である $H' = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$ を摂動として扱い, 波動方程式を解くのが $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論である. H' を摂動とするため \mathbf{k} が小さい範囲, すなわちバンド端においてのみこの理論は成り立つことを注意しなくてはならない. ある n 番目のバンドに注目する. このとき, エネルギーは二次摂動の範囲で, 次のように表せる.

$$\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon_n(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar}{2m} \sum_{j \neq n} \frac{|\langle n0 | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | j0 \rangle|^2}{\epsilon_n(0) - \epsilon_j(0)} \quad (2.4.6)$$

また, 有効質量 m^* の定義は,

$$m^* = \left[\frac{i}{\hbar} \frac{d^2 \epsilon_n(\mathbf{k})}{dk^2} \right]^{-1} \quad (2.4.7)$$

であるので, 式 (2.4.6) と式 (2.4.7) を考慮すると有効質量の表式を得ることができる.

$$\frac{m}{m^*} = 1 + \frac{2}{m} \sum_{j \neq n} \frac{|\langle n0 | \mathbf{p} | j0 \rangle|^2}{\epsilon_n(0) - \epsilon_j(0)} \quad (2.4.8)$$

2.4.2 Luttinger-Kohn の理論

前節では、磁場のかかっていない場合の $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論の説明を行った。 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論では、厳密に磁場中効果は扱うことは困難である。 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論では、ブロッホ関数を扱っていた。ブロッホ関数は周期的ポテンシャルに対するシュレディンガー方程式の解であった。しかし、磁場中ではポテンシャルが周期的でなくなるため、このままブロッホの関数を扱うことが出来なかった。この問題を解決したのが Luttinger と Kohn による論文である [6]。この理論により、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論は摂動論を使わない厳密な理論となった。以下その理論の詳しい内容を解説する。

周期ポテンシャル中における電子のハミルトニアンを H_0 とする。 U を不純物による追加のポテンシャルとする。 H_0 の固有関数を $\psi_{n\mathbf{k}}$ とし、固有値を $\epsilon_n(\mathbf{k})$ とする。ここで、 n はバンド指標、 \mathbf{k} は第一ブリルアンゾーンの波数である。シュレディンガー方程式は次のようになる。

$$H_0 \psi_{n\mathbf{k}} = \epsilon_n(\mathbf{k}) \psi_{n,\mathbf{k}} \quad (2.4.9)$$

不純物を考えた際の波動関数 ψ を見つけるため、次の波動方程式を解く必要がある。

$$(H_0 + U) \psi = \epsilon \psi \quad (2.4.10)$$

これを解くにあたり、一般的には波動関数をブロッホ関数もしくはワニエ関数で展開する。ブロッホの関数で展開すると次のようになる。

$$\psi_{n\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}} \quad (2.4.11)$$

ここで、 $u_{n\mathbf{k}}$ はブロッホの周期関数である。この $\psi_{n\mathbf{k}}$ は、完全系であればどのような波動関数でも展開することが可能である。そこで、Luttinger-Kohn の理論では次のような関数を考える。

$$\chi_{n\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n0} \quad (2.4.12)$$

ここで、 u_{n0} はバンドの底におけるブロッホの周期関数である。この新しい関数 χ は $\psi_{n\mathbf{k}}$ が完全直行系であれば、必ず完全直行系である。ブロッホ関数で展開可能な任意の関数 f が、Luttinger-Kohn の理論で導入された新たな関数 $\chi_{n\mathbf{k}}$ により展開可能であることを以下に示す。ある関数 $f(r)$ を $\psi_{n\mathbf{k}}$ で展開する。

$$\begin{aligned} f(r) &= \sum_n \int d\mathbf{k} g_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}} \\ &= \sum_n \int d\mathbf{k} g_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (2.4.13)$$

周期関数はバンドの底の周期関数で書き表すことができ、次のように書ける。

$$u_{n\mathbf{k}} = \sum_{n'} b_{nn'}(\mathbf{k}) u_{n'0} \quad (2.4.14)$$

式 (2.4.14) を式 (2.4.13) に代入すると次のようになる.

$$f(\mathbf{r}) = \sum_n \sum_{n'} \int d\mathbf{k} g_n(\mathbf{k}) b_{nn'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n'0} \quad (2.4.15)$$

n と n' を交換しても問題ないので,

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}) &= \sum_n \sum_{n'} \int d\mathbf{k} g_{n'}(\mathbf{k}) b_{n'n} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n0} \\ &= \sum_n \int d\mathbf{k} \tilde{g}_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \chi_{n\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (2.4.16)$$

となる. ここで,

$$\tilde{g}_n(\mathbf{k}) = \sum_{n'} g_{n'}(\mathbf{k}) b_{n'n}(\mathbf{k}) \quad (2.4.17)$$

である. 以上のように, ブロッホの周期関数 $u_{n\mathbf{k}}$ で展開可能な任意の関数は Luttinger-Kohn の理論で導入された新たな関数 $\chi_{n\mathbf{k}}$ により展開することが可能である.

次に $\chi_{n\mathbf{k}}$ の性質を考える. ブロッホの波動関数は直交性を持つ.

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n\mathbf{k}}, \psi_{n',\mathbf{k}'} \rangle &= \int \psi_{n\mathbf{k}}^* \psi_{n',\mathbf{k}'} d\mathbf{r} \\ &= \int e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}^* u_{n'\mathbf{k}'} d\mathbf{r} \\ &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{nn'} \end{aligned} \quad (2.4.18)$$

$\chi_{n\mathbf{k}}$ についても同様に考える.

$$\langle \chi_{n\mathbf{k}}, \chi_{n',\mathbf{k}'} \rangle = \int e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} u_{n0}^* u_{n'0} d\mathbf{r} \quad (2.4.19)$$

u_{n0} は格子の周期性を持っているため, フーリエ級数に展開が可能である.

$$u_{n0}^* u_{n'0} = \sum_m B_m^{nn'} e^{-i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} \quad (2.4.20)$$

ここで, $B_m^{nn'}$ はただの係数であり, \mathbf{K}_m は逆格子ベクトルである. 式 (2.4.20) を式 (2.4.19) に代入する.

$$\begin{aligned} \langle \chi_{n\mathbf{k}}, \chi_{n',\mathbf{k}'} \rangle &= \int e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} u_{n0}^* u_{n'0} d\mathbf{r} \\ &= \int e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{K}_m) \cdot \mathbf{r}} \sum_m B_m^{nn'} d\mathbf{r} \\ &= (2\pi)^3 \sum_m B_m^{nn'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{K}_m) \end{aligned} \quad (2.4.21)$$

\mathbf{k}, \mathbf{k}' は第一ブリルアンゾーンに存在する。よって、 $\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{K}_m = 0$ が成立するのは \mathbf{K}_m が第一ブリルアンゾーンに存在する場合 ($m=0$) のみである。このことから、式 (2.4.21) は次のように書き換えられる、

$$\langle \chi_{n\mathbf{k}}, \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = (2\pi)^3 B_0^{nn'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (2.4.22)$$

式 (2.4.20) より、フーリエ変換を考えると次のような式を得る。

$$B_m^{nn'} = \frac{1}{\Omega} \int e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} u_{n0}^* u_{n'0} d\mathbf{r} \quad (2.4.23)$$

$m = 0$ の場合を考える。式 (2.4.18) から、

$$\begin{aligned} B_0^{nn'} &= \frac{1}{\Omega} \int u_{n0}^* u_{n'0} d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \delta_{nn'} \end{aligned} \quad (2.4.24)$$

となる。式 (2.4.24) を式 (2.4.22) に代入する。

$$\langle \chi_{n\mathbf{k}}, \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \delta_{nn'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (2.4.25)$$

以上のことから、Luttinger-Kohn の理論により導入された関数 $\chi_{n\mathbf{k}}$ が直交性を満たしていることが確認できた。

ここからは、式 (2.4.10) のような固有値方程式について考える。まず、波動関数を次のように置く。

$$\psi = \sum_{n'} \int d\mathbf{k}' A_{n'}(\mathbf{k}') \chi_{n'\mathbf{k}'} \quad (2.4.26)$$

これを式 (2.4.10) に代入する。

$$(H_0 + U) \sum_{n'} \int d\mathbf{k}' A_{n'}(\mathbf{k}') \chi_{n'\mathbf{k}'} = \epsilon \sum_{n'} \int d\mathbf{k}' A_{n'}(\mathbf{k}') \chi_{n'\mathbf{k}'} \quad (2.4.27)$$

左から $\chi_{n\mathbf{k}}$ を掛ける。

$$\sum_{n'} \int d\mathbf{k} \chi_{n\mathbf{k}} (H_0 + U) \chi_{n'\mathbf{k}'} A_{n'}(\mathbf{k}') = \epsilon \sum_{n'} \int d\mathbf{k} A_{n'}(\mathbf{k}) \chi_{n\mathbf{k}} \chi_{n'\mathbf{k}'} \quad (2.4.28)$$

以下 $\chi_{n\mathbf{k}}, \chi_{n'\mathbf{k}'}$ を基底とした行列要素を $\langle n\mathbf{k} | H | n'\mathbf{k}' \rangle$ と表す。これを用いて式 (2.4.28) を整理する。

$$\sum_{n'} \int d\mathbf{k} \langle n\mathbf{k} | (H_0 + U) | n'\mathbf{k}' \rangle A_{n'}(\mathbf{k}') = \epsilon A_n(\mathbf{k}) \quad (2.4.29)$$

左辺の行列要素について考える。 H_0 は、

$$\langle n\mathbf{k} | H_0 | n'\mathbf{k}' \rangle = \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n0}^* H_0 e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} u_{n'0} \quad (2.4.30)$$

である。ここで、 $H_0 = \mathbf{p}^2/2m + V(x)$ であるので、

$$H_0 e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \psi = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \left(e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \psi \right) + V(x) \left(e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \psi \right) \quad (2.4.31)$$

となる。式 (2.4.31) の第 1 項目について考える。 $\mathbf{p} = -i\nabla$ であるので

$$\begin{aligned} \frac{-1}{2m} \left(\nabla^2 e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \psi \right) &= -\frac{1}{2m} \left(\nabla e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \nabla \psi + i\mathbf{k}' \nabla e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \psi \right) \\ &= \frac{-1}{2m} \left(i\mathbf{k}' e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \nabla \psi + e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \nabla^2 \psi - \mathbf{k}'^2 e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} + i\mathbf{k}' e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \nabla \psi \right) \\ &= e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \left(\frac{\mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\mathbf{k}'^2}{2m} \right) \psi \end{aligned} \quad (2.4.32)$$

よって、式 (2.4.31) は次のように書ける。

$$H_0 e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \left(\frac{\mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\mathbf{k}'^2}{2m} \right) + V(x) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \quad (2.4.33)$$

これを式 (2.4.30) に代入する。

$$\begin{aligned} \langle n\mathbf{k} | H_0 | n'\mathbf{k}' \rangle &= \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n0}^* H_0 e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} u_{n'0} \\ &= \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} u_{n0}^* \left(\frac{\mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\mathbf{k}'^2}{2m} + V(x) \right) u_{n'0} d\mathbf{r} \\ &= \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} u_{n0}^* \left(H_0 + \frac{\mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\mathbf{k}'^2}{2m} \right) u_{n'0} d\mathbf{r} \\ &= \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} u_{n0}^* \left(\epsilon_{n'} + \frac{\mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\mathbf{k}'^2}{2m} \right) u_{n'0} d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (2.4.34)$$

ここで、式 (2.4.25) より周期関数部分は、

$$\begin{aligned} \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} u_{n0}^* u_{n'0} d\mathbf{r} &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{nn'} \\ &= \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int u_{n0}^* u_{n'0} d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (2.4.35)$$

であるので、式 (2.4.34) を次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} \langle n\mathbf{k} | H_0 | n'\mathbf{k}' \rangle &= \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int u_{n0}^* \left(\epsilon_{n'} + \frac{\mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\mathbf{k}'^2}{2m} \right) u_{n'0} d\mathbf{r} \\ &= \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \left[\left(\epsilon_{n'} + \frac{\mathbf{k}'^2}{2m} \right) \delta_{nn'} + \frac{k_\alpha p_{nn'}^\alpha}{m} \right] \end{aligned} \quad (2.4.36)$$

ここで、 $p_{nn'}^\alpha$ は次のように定義した。 ($\hbar = 1$ とした)

$$p_{nn'}^\alpha = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int u_{n0}^* \left(\frac{1}{i} \nabla_\alpha \right) u_{n'0} d\mathbf{r} \quad (2.4.37)$$

$p_{nn'}^\alpha$ はバンドの底の運動量の行列表示である。 $p_{nn'}^\alpha(\mathbf{k}) = m \partial \epsilon(\mathbf{k}) / \partial k_\alpha$ であり、以下の様な性質を持つ。

$$p_{nn}^\alpha = 0, p_{nn'}^\alpha = p_{n'n}^\alpha = (p_{nn'}^\alpha)^* \quad (2.4.38)$$

次に、式 (2.4.29) における U の行列要素について考えていく。式 (2.4.20) を用いると、

$$\begin{aligned}\langle n\mathbf{k}|U|n'\mathbf{k}\rangle &= \int e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}Uu_{n0}^*u_{n'0}d\mathbf{r} \\ &= \sum_m \int e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}B_m^{nn'}e^{-i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}}Ud\mathbf{r} \\ &= (2\pi)^3 \sum_m B_m^{nn'}\mathcal{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{K}_m)\end{aligned}\quad (2.4.39)$$

となる。ここで $\mathcal{U}(\mathbf{k})$ は U のフーリエ変換であり、次のように定義した。

$$\mathcal{U}(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \quad (2.4.40)$$

ここで、Luttinger と Kohn の理論のポイントとなる重要な点がある。それは、 U がゆるやかに変化すると仮定をすることである。 U が穏やかであるとするとき、 \mathbf{k} と \mathbf{k}' は \mathbf{K}_m に比べて非常に小さくなる。そのため $m=0$ の場合と比べて $m \neq 0$ の場合は高次のフーリエ成分があり、式 (2.4.39) は結果として小さくなる。よって、 $m=0$ の場合のみを考えれば良い。式 (2.4.39) は次のように書き換えることが可能である。

$$\begin{aligned}\langle n\mathbf{k}|U|n'\mathbf{k}\rangle &= (2\pi)^3 B_0^{nn'}\mathcal{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \\ &= \delta_{nn'}\mathcal{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\end{aligned}\quad (2.4.41)$$

式 (2.4.36) と式 (2.4.41) より式 (2.4.29) は次のように書き表せる。

$$\begin{aligned}\left(\epsilon_n + \frac{\mathbf{k}^2}{2m}\right)A_n(\mathbf{k}) + \sum_{n' \neq n} \frac{k_\alpha p_{nn'}^\alpha}{m} A_{n'}(\mathbf{k}) \\ + \int d\mathbf{k}' \mathcal{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') A_n(\mathbf{k}') = \epsilon A_n(\mathbf{k})\end{aligned}\quad (2.4.42)$$

Luttinger-Kohn 理論の最大の特徴の一つが、磁場中効果を容易に導入できる点にある。磁場中効果を導入するには、式 (2.1.1) と同様に、 $\hbar\mathbf{k} \rightarrow \boldsymbol{\pi}$ の変換を行う必要がある。式 (2.4.11) のようにブロッホ関数を用いて波動関数を展開した場合、周期関数部分にも波数 \mathbf{k} を含む。この周期関数部分の波数 \mathbf{k} を $\boldsymbol{\pi}$ に変換するのは理論的に困難が伴う。一方で式 (2.4.12) のように展開を行うことで周期関数部分に波数 \mathbf{k} が含まれないので、 $\hbar\mathbf{k} \rightarrow \boldsymbol{\pi}$ の変換が容易になる。また、元々の周期関数とバンド底の周期関数の関係から [式 (2.4.14)], Luttinger-Kohn の理論は基底を無限に取れば厳密であることが分かる。以上のように Luttinger-Kohn の理論により、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論は磁場中効果を厳密に導入できる優れた理論となる。第4章以降では、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論を用いた磁場中の電子状態の計算方法とそれを実際の物質に対して適用した結果を示す。

2.5 スピン軌道結合効果とスピン分裂変数

本研究における重要なキーワードの一つがスピン軌道結合である。結晶中のスピン軌道結合の効果は磁場中で大きく現れる。この節では本研究の基礎知識となる、スピン軌道結合効果の解説と結晶中における評価方法について述べる。

スピン軌道結合の効果がディラック方程式の当然の帰結であることを示す。原子核の周りを電子が運動している場合を考える。 m を電子質量, $V(\mathbf{r})$ をポテンシャルとするとディラック方程式は次のように表される [28].

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = [\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m + V(\mathbf{r})] \Psi$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (2.5.1)$$

ここで, α, β は以下のような行列である.

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \quad (2.5.2)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.5.3)$$

σ はパウリ行列である. 式 (2.5.1) は次のように変形できる.

$$\left[\begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{p} + \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} m + V(\mathbf{r}) \right] \begin{bmatrix} \phi \\ \chi \end{bmatrix} = \hat{E} \begin{bmatrix} \phi \\ \chi \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \chi + m \phi + V(\mathbf{r}) \phi &= (\hat{E}' + m) \phi \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \phi - m \chi + V(\mathbf{r}) \chi &= (\hat{E}' + m) \chi \\ \Rightarrow \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \chi + V(\mathbf{r}) \phi - \hat{E}' \phi &= 0 \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \phi - 2m \chi + V(\mathbf{r}) \chi - \hat{E}' \chi &= 0 \\ \Rightarrow (\hat{E}' - V(\mathbf{r})) \phi - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \chi &= 0 \end{aligned} \quad (2.5.4)$$

$$(\hat{E}' + 2m - V(\mathbf{r})) \chi - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \phi = 0 \quad (2.5.5)$$

ここで,

$$\hat{E} = \hat{E}' + m \quad (2.5.6)$$

とした. 式 (2.5.5) より, $m \gg V(\mathbf{r})$ かつ $\hat{E}' \ll m$ のとき次のような関係式が成り立つ.

$$\begin{aligned} 2m \chi &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \phi \\ \Rightarrow \chi &= \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{2m} \phi \end{aligned} \quad (2.5.7)$$

$\mathbf{p}/m = v$ であるので,

$$\chi \propto v \phi \quad (2.5.8)$$

である. このことから, χ は ϕ と比べて v のオーダーで小さいことが分かる. 先ほどと同様に式 (2.5.5) より,

$$\chi = (\hat{E}' + 2m - V(\mathbf{r}))^{-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \phi \quad (2.5.9)$$

であり, これを式 (2.5.6) に代入すると次のようになる.

$$\begin{aligned} & \left(\hat{E}' - V(\mathbf{r}) \right) \phi - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \left(\hat{E}' + 2m - V(\mathbf{r}) \right)^{-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \phi \\ \Rightarrow \hat{E}' \phi &= \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \left(1 + \frac{\hat{E}' - V(\mathbf{r})}{2m} \right)^{-1} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi + V(\mathbf{r}) \phi \end{aligned} \quad (2.5.10)$$

これを $\left(\hat{E}' - V(\mathbf{r}) \right) / 2m$ のべきで展開し, 最低次までとる. 次の3つの関係式を用いる.

$$\left(1 + \frac{\hat{E}' - V(\mathbf{r})}{2m} \right)^{-1} \simeq 1 - \frac{\hat{E}' - V(\mathbf{r})}{2m} \quad (2.5.11)$$

$$\mathbf{p}V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\mathbf{p} - i\hbar\nabla\phi \quad (2.5.12)$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V(\mathbf{r})) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = (\nabla V(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot [(\nabla V(\mathbf{r})) \times \mathbf{p}] \quad (2.5.13)$$

これらの式を式 (2.5.9) に代入すると次のようになる.

$$\begin{aligned} \hat{E}' \phi &= \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi - \frac{1}{2m} \frac{\hat{E}'}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi \\ &+ \frac{1}{2m} \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) (V(\mathbf{r})) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi + V(\mathbf{r}) \phi \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \left(1 - \frac{\hat{E}' - V(\mathbf{r})}{2mc^2} + V(\mathbf{r}) \right) \phi + \frac{1}{4m^2} (-i\hbar) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V(\mathbf{r})) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \left(1 - \frac{\hat{E}' - V(\mathbf{r})}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \phi + \frac{\hbar^2}{4m^2} (\nabla V(\mathbf{r})) (\nabla V(\mathbf{r})) \\ &+ \frac{\hbar}{4m^2} [\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}] \psi_1 \end{aligned} \quad (2.5.14)$$

簡単のため, $\hat{E}' - V(\mathbf{r})$ 及び $\mathbf{p}^2/2m$ の期待値は m の期待値に対して1次のオーダーの微少量であると考え. その条件下においては $\left(\hat{E}' - V(\mathbf{r}) \right) \mathbf{p}^2$ を $\mathbf{p}^4/2m$ で置き換えられる. また, 静電ポテンシャルが球対称であると, 次のような関係式が成立する.

$$\nabla\phi \cdot \nabla = \frac{dV(\mathbf{r})}{dr} \frac{\partial}{\partial r} \quad (2.5.15)$$

$$\nabla\phi = \frac{1}{r} \frac{dV(\mathbf{r})}{dr} \mathbf{r} \quad (2.5.16)$$

これらを踏まえると, 式 (2.5.14) は以下のように書き直せる.

$$\hat{E}' \phi = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3} - \frac{\hbar^2}{4m^2} \frac{dV(\mathbf{r})}{dr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m^2} \frac{1}{r} \frac{dV(\mathbf{r})}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \right) \phi \quad (2.5.17)$$

ここで, \mathbf{S} はスピン角運動量演算子, \mathbf{L} は軌道角運動量である.

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}, \quad \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (2.5.18)$$

式 (2.5.17) の第一項および第二項は非相対論的な場合のシュレディンガー方程式と同一の形をしており, 第三項は相対論的質量補正の項である. 第四項目は静電エネルギーの相

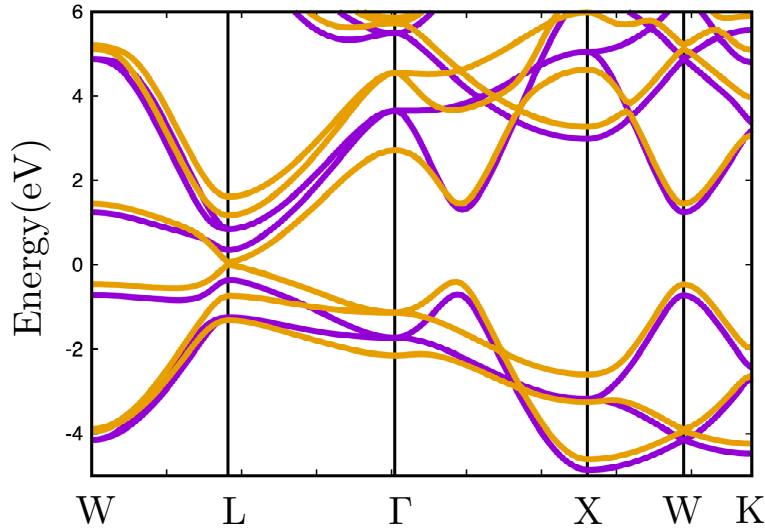


図 2.5.1 第一原理計算ソフト Wien2k [29] により計算された PbTe の電子状態。
紫：スピン軌道結合効果なし．黄色：スピン軌道結合効果あり．

対論的補正項である．最後の項がスピンと軌道の結合の項であり，これがスピン軌道結合効果である．

$$H_{\text{SOC}} = \frac{1}{2m^2} \frac{1}{r} \frac{dV(\mathbf{r})}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \left(= \frac{\hbar}{4m^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p} \right) \quad (2.5.19)$$

以上のように，スピン軌道結合の効果はディラック方程式の当然の帰結として出てくる．孤立した電子を考えた場合にはスピン軌道結合は十分理解が可能である．

結晶中においてもスピン軌道結合効果は大きく現れる場合がある．図 2.5.1 に PbTe におけるスピン軌道結合効果による電子状態の変化を示す．PbTe のようにバンドギャップが小さい物質ではスピン軌道結合効果が大きく現れ，大きく電子状態が変化することが分かる．特に伝導に参与するバンドギャップ周辺で大きな変化が起きており，スピン軌道結合効果による物性の変化が見られることが期待される．結晶中においては，軌道の対称性や結晶自体の対称性による影響を受けるため，スピン軌道結合効果単体を評価することが難しい．結晶中のスピン軌道結合効果の特徴的な現象の一つにゼーマン分裂が挙げられる．磁場中では前述のように電子状態が離散的なランダウ準位をとる．この磁場による分裂幅がサイクロトロンエネルギーである．このランダウ準位がスピン軌道結合効果により分裂する．このスピン軌道結合効果による分裂幅がゼーマン分裂である（強スピン軌道結合系の場合，裸のスピンの影響は十分小さく，無視できる．）．このゼーマン分裂とサイクロトロンエネルギーの比を取ることで，スピン軌道結合効果を評価することができる．ゼーマン-サイクロトロン比により定義される量がスピン分裂変数である．磁場中の自由電子にスピン軌道結合効果を加えた場合を考える．ランダウ準位 E_n がスピン軌道結合効果により分裂した準位をそれぞれ $E_{n,+}$, $E_{n,-}$ と置くと，ゼーマン分裂は次のように書

ける.

$$E_{n,\sigma} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \frac{\sigma}{2} g\mu_B B \quad (2.5.20)$$

$$E_z = E_{n,+} - E_{n,-} = g\mu_B B \quad (2.5.21)$$

ここで, g は g 因子, μ_B はボーア磁子で, $\mu_B = e\hbar/2m$ である. また, サイクロトロンエネルギーは連続する二つのランダウ準位のエネルギー差を取れば良いので,

$$E_c = E_{n,\pm} - E_{n-1,\pm} = \hbar\omega_c \quad (2.5.22)$$

である. よって, 自由電子の場合のスピンスplit変数 M_{ZC} は次のようになる.

$$M_{ZC} = \frac{E_Z}{E_C} = \frac{g\mu_B B}{\hbar\omega_c} = \frac{g}{2} \quad (2.5.23)$$

式 (2.5.23) の g をゼロとすると, スピンスplit変数もゼロとなる. つまり自由電子の場合, 裸のスピンを除けばスピンスplit変数はゼロとなる. またスピンスplit結合効果が大きくなる, つまり g が大きくなると, スピンスplit変数の値も大きくなる. このようにスピンスplit結合効果が大きくなるとスピンスplit変数が大きくなる. 今回の例は非常に簡易的な模型の場合であり, 実際の結晶中ではスピンスplit変数はこのような簡易な形にはならない. 実際のスピンスplit変数の計算にはスピンスplit結合効果を含み, 結晶中の情報を反映した磁場中電子状態の計算が必要不可欠である. 実験でも量子振動等によりスピンスplit変数が見積もられている [13, 15–18, 30–33].

第 3 章

トポロジカル物質の性質

トポロジカル物質とは、波動関数が非自明なトポロジーを持つ物質群のことである。固体物理では、結晶が持つ波動関数の形に着目される。よく用いられる例が、ドーナツの例である。真ん中に穴が空いているドーナツを考える。これをいくら連続的に変形しても、穴の無いボール状にはなれない。ドーナツとボールはトポロジー的に異なる。この考え方を固体物理の場合に当てはめる。普通の金属を穴のないボールとすると、トポロジカル絶縁体はドーナツに該当する。2005年 Kane-Mele らにより、二次元版トポロジカル絶縁体とも言える量子ホール系の提案がされた [34]。彼らは量子ホール系が現れる場合の波動関数がトポロジー的に異なることを指摘し、そのトポロジーは Z_2 とよばれるトポロジカル不変量で定義されるとした。 Z_2 はブリルアンゾーン全体で端状態がフェルミ面と交差する回数を偶数か奇数かで分類する。2007年には Fu らにより Bi 等の実際の物質での三次元トポロジカル絶縁体の存在が予言された [35]。三次元トポロジカル絶縁体は二次元の場合と異なり4つのトポロジカル不変量が必要である [36]。トポロジカル絶縁体物質の特徴の一つが、バルクが絶縁体なのに対し、表面（エッジ）は金属的な振る舞いを見せることである。この表面状態は線形な分散であり、伝導体と価電子帯の間で交差する。線形な分散は質量のないディラック電子の特徴と一致する。そのことから、トポロジカル絶縁体はディラック方程式で記述出来る可能性がある。近年ではさらに、ディラック半金属やワイル半金属、トポロジカル超伝導等の分類も現れた。今章では、トポロジカル物質に関わりが深い基礎理論について解説したのち、本論文の着目物質である Cd_3As_2 が分類されているディラック半金属並びにワイル半金属についての解説を行う。

3.1 ゲージ変換とベリー一位相

ベリー一位相 [37] とは、断熱的に経路に沿って一周した場合に波動関数が得た位相である。ベリー一位相はトポロジカル物質の分野でよく議論されている [38–43]。このベリー一位相はスピン軌道結合と密接な関係がある。スピンホール効果の起源には内因性のものと外因性のものの二つが存在する。バンド構造に依存し不純物に依存しない機構が内因性である。内因性のスピンホール効果はベリー一位相により理解される。このベリー一位相を応用す

ることで、トポロジカル絶縁体の予言が行われた。以下でベリー位相およびベリー曲率について議論する。以下の議論では、[44]を参考にした。

ハミルトニアンがパラメータに依存した際に、その固有状態がどう変化するかを考える。パラメータ \mathbf{R} に依存したシュレディンガー方程式は次のように書ける。

$$H(\mathbf{R})|\phi_n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R})|\phi_n(\mathbf{R})\rangle \quad (3.1.1)$$

ここで、 $|\phi_n(\mathbf{R})\rangle$ は状態 n の固有状態であり E_n は固有値である。今回は E_n に縮退はないとする。パラメータ \mathbf{R} が時間発展する場合、時間に依存したシュレディンガー方程式は、

$$H[\mathbf{R}(t)]|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle = E_n(\mathbf{R})|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle \quad (3.1.2)$$

と書ける。パラメータ \mathbf{R} の時間変化が十分ゆっくりであると、固有状態は n のまま保たれるので、次のような関係を持つ。

$$|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle = e^{i\theta(t)}|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle \quad (3.1.3)$$

ここで $\theta(t)$ は位相である。式 (3.1.1) に式 (3.1.3) を代入する。

$$\begin{aligned} \hbar e^{i\theta(t)} \left(-\frac{\partial\theta(t)}{\partial t}|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle + i\frac{\partial}{\partial t}|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle \right) \\ = E_n[\mathbf{R}(t)]e^{i\theta(t)}|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

式 (3.1.4) の左から $\langle\phi_n[\mathbf{R}(t)]|$ をかけると、

$$\frac{\partial\theta(t)}{\partial t} = i\langle\phi_n[\mathbf{R}(t)]|\frac{\partial}{\partial t}|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle - \frac{1}{\hbar}E_n[\mathbf{R}(t)]$$

となるので、 θ は、

$$\begin{aligned} \theta(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n[\mathbf{R}(t')]dt' \\ + i\int_0^t \langle\phi_n[\mathbf{R}(t')|\frac{\partial}{\partial t'}|\phi_n[\mathbf{R}(t')]\rangle dt' \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

と書ける。よって、 $|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle$ は次のように書ける。

$$|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle = e^{i\Phi_B[\mathbf{R}(t)]}e^{-i\int_0^t dt' E_n[\mathbf{R}(t')]/\hbar}|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle \quad (3.1.6)$$

$$\Phi_B[\mathbf{R}(t)] = i\int_0^t dt' \langle\phi_n[\mathbf{R}(t')|\frac{\partial}{\partial t'}|\phi_n[\mathbf{R}(t')]\rangle \quad (3.1.7)$$

ここで式 (3.1.6) の第二因子については時間に依存したシュレディンガー方程式で自然と出てくる項である。一方で、式 (3.1.6) の第一因子についてはパラメータ \mathbf{R} が断熱的に変化したことで現れた項であり、この Φ_B がベリー位相である。例えば、パラメータ \mathbf{R} が時間により変化しない場合、

$$|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle = |\phi_n[\mathbf{R}(t=0)]\rangle$$

が成り立ち，式 (3.1.4) は次のようになる．

$$-\hbar e^{i\theta(t=0)} \frac{\partial \theta(t)}{\partial t} |\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle = E_n[\mathbf{R}(t)] e^{i\theta(t)} |\phi_n[\mathbf{R}(t=0)]\rangle$$

よって，先ほどと同様の手順で式 (3.1.6) は，

$$|\phi_n[\mathbf{R}(t)]\rangle = e^{-i \int_0^t dt' E_n[\mathbf{R}(t')]/\hbar} |\phi_n[\mathbf{R}(0)]\rangle \quad (3.1.8)$$

となり， $\Phi_B = 0$ とすると式 (3.1.6) と一致する．このことからパラメータ \mathbf{R} の時間変化によりベリー位相 Φ_B が現れたことが分かる．ここからはベリー位相のゲージ自由度について考える．位相を $\theta_n(t)$ とし，固有関数 $|\phi_n(\mathbf{R})\rangle$ について，次のようなゲージ変換を考える．

$$|\phi'_n(\mathbf{R})\rangle = e^{i\theta_n(t)} |\phi_n(\mathbf{R})\rangle \quad (3.1.9)$$

ベリー位相 Φ_B が観測量であれば， Φ_B はゲージ不変である．ゲージ変換後の固有関数 $|\phi'_n(\mathbf{R})\rangle$ を用いてベリー位相 Φ'_B を計算すると次のように書ける．

$$\begin{aligned} \Phi'_B(t) &= i \int_0^t dt' \langle \phi'_n(\mathbf{R}(t')) | \frac{\partial}{\partial t'} |\phi'_n(\mathbf{R}(t'))\rangle \\ &= \gamma(t) - \int_0^t dt' \langle \phi_n(\mathbf{R}(t')) | \frac{\partial \theta_n(\mathbf{R})}{\partial t'} |\phi_n(\mathbf{R}(t'))\rangle \\ &= \gamma(t) - \int_0^t dt' \frac{\partial \theta_n(\mathbf{R})}{\partial t'} \\ &= \gamma(t) + \theta_n(\mathbf{R}(0)) - \theta_n(\mathbf{R}(t)) \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

式 (3.1.10) から，一般的にゲージ変換前のベリー位相 Φ_B とゲージ変換後のベリー位相 Φ'_B は一致しない．このことから，一般にはベリー位相は観測量でない．しかし $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}(0)$ の場合は $\Phi_B = \Phi'_B$ となりベリー位相はゲージ不変となる．この場合は，同一の点での位相差を見ることに該当しており， $t=0$ から $t=T$ の間で一周する経路をとることとなる．この経路を C とし，ベリー位相 $\Phi_B[C]$ は次のように書き表される．

$$\begin{aligned} \Phi_B(T)[C] &= i \int_0^T dt' \langle \phi_n(\mathbf{R}(t')) | \frac{\partial}{\partial t'} |\phi_n(\mathbf{R}(t'))\rangle \\ &= i \oint_C d\mathbf{R} \cdot \langle \phi_n(\mathbf{R}) | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} |\phi_n(\mathbf{R})\rangle \\ &\equiv \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

ここで，

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \equiv i \langle \phi_n(\mathbf{R}) | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} |\phi_n(\mathbf{R})\rangle \quad (3.1.12)$$

であり，これは磁場に対するベクトルポテンシャルに該当している．以上のようにパラメータ変化が断熱的などとき，ベリー位相は観測量となり，経路 C にのみ依存する．式

(3.1.11) にストークスの定理を用いると,

$$\begin{aligned}\Phi_B(T)[C] &= \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \\ &= \int_S d\mathbf{S} \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \\ &= \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_n(\mathbf{R})\end{aligned}\quad (3.1.13)$$

となる。ここで,

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{R}) \equiv \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \left\langle \frac{\partial \phi_n}{\partial \mathbf{R}} \middle| \times \middle| \frac{\partial \phi_n}{\partial \mathbf{R}} \right\rangle \quad (3.1.14)$$

であり, 磁場とベクトルポテンシャルの関係と同様な関係を持つ。この \mathbf{A}_n をベリー位相, \mathbf{B}_n をベリー曲率とよぶ。 $\mathbf{B}(\mathbf{R})$ を成分表示すると,

$$\mathbf{B}_{n,i}(\mathbf{R}) = i\epsilon_{ijk} \left\langle \frac{\partial \phi_n}{\partial R_j} \middle| \frac{\partial \phi_n}{\partial R_k} \right\rangle \quad (3.1.15)$$

である。このとき, ϵ_{ijk} は完全反対称テンソルである。ここで式 (3.1.15) に完全系を導入すると,

$$\mathbf{B}_{n,i}(\mathbf{R}) = i\epsilon_{ijk} \sum_m \left\langle \frac{\partial \phi_n}{\partial R_j} \middle| \phi_m \right\rangle \left\langle \phi_m \middle| \frac{\partial \phi_n}{\partial R_k} \right\rangle \quad (3.1.16)$$

となる。この m に関する和について場合分けを行う。

[1] $m=n$ のとき

$\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1$ の両辺を R_k について微分すると,

$$\frac{\partial}{\partial R_k} \langle \phi_n | \phi_n \rangle = \left\langle \frac{\partial \phi_n}{\partial R_k} \middle| \phi_n \right\rangle + \left\langle \phi_n \middle| \frac{\partial \phi_n}{\partial R_k} \right\rangle = 0 \quad (3.1.17)$$

よって,

$$\left\langle \frac{\partial \phi_n}{\partial R_k} \middle| \phi_n \right\rangle = - \left\langle \phi_n \middle| \frac{\partial \phi_n}{\partial R_k} \right\rangle \quad (3.1.18)$$

となる。同様にして次の関係も得られる。

$$\left\langle \frac{\partial \phi_n}{\partial R_j} \middle| \phi_n \right\rangle = - \left\langle \phi_n \middle| \frac{\partial \phi_n}{\partial R_j} \right\rangle \quad (3.1.19)$$

以上2式を式 (3.1.16) に代入すると次のようになる。

$$\begin{aligned}\mathbf{B}_{n,i}(\mathbf{R}) &= i\epsilon_{ijk} \left\langle \frac{\partial \phi_n}{\partial R_j} \middle| \phi_n \right\rangle \left\langle \phi_n \middle| \frac{\partial \phi_n}{\partial R_k} \right\rangle \\ &= i\epsilon_{ijk} \left\langle \phi_n \middle| \frac{\partial \phi_n}{\partial R_j} \right\rangle \left\langle \frac{\partial \phi_n}{\partial R_k} \middle| \phi_n \right\rangle = 0\end{aligned}\quad (3.1.20)$$

[2] $m \neq n$ のとき

$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$ を R_k で微分すると,

$$\frac{\partial H}{\partial R_k}|\phi_n\rangle + H\left|\frac{\partial\phi_n}{\partial R_k}\right\rangle = \frac{\partial E_n}{\partial R_k}|\phi_n\rangle + E_n\left|\frac{\partial\phi_n}{\partial R_k}\right\rangle \quad (3.1.21)$$

となる. これに左から $\langle\phi_m|$ をかけると, $n \neq m$, $E_m \neq E_n$ より

$$\left\langle\phi_m\left|\frac{\partial\phi_n}{\partial R_k}\right\rangle = \frac{1}{E_n - E_m}\left\langle\phi_m\left|\frac{\partial H}{\partial R_k}\right|\phi_n\right\rangle \quad (3.1.22)$$

である. また, 同様にして

$$\left\langle\frac{\partial\phi_n}{\partial R_j}\left|\phi_m\right\rangle = \frac{1}{E_n - E_m}\left\langle\phi_n\left|\frac{\partial H}{\partial R_j}\right|\phi_m\right\rangle \quad (3.1.23)$$

の関係を得る. よって, これら二式を式 (3.1.16) に代入すると

$$B_{n,i}(\mathbf{R}) = i\epsilon_{ijk} \sum_{m \neq n} \frac{\langle\phi_n|\frac{\partial H}{\partial R_j}|\phi_m\rangle \langle\phi_m|\frac{\partial H}{\partial R_k}|\phi_n\rangle}{(E_n - E_m)^2} \quad (3.1.24)$$

を得る. 式 (3.1.24) から $\mathbf{B}_n(\mathbf{R})$ はゲージ不変であることがわかる. また, 注目している第 n バンドが他のバンドと近接するとき, 式 (3.1.24) の分母が小さくなることから, ベリー曲率が大きくなることがわかる.

3.2 ベリー位相とスピン分裂変数

前節でベリー位相の導出を行った. ベリー曲率は量子振動の実験では位相部分として観測される. 量子振動 (シュブニコフ・ドハース振動) における位相部分はリフシッツ-コセビッチの理論から, 次のように書ける [1,45].

$$\Delta\sigma_{xx} \propto \cos\left[2\pi\left(\frac{F}{B} + \gamma \pm \delta\right)\right] \quad (3.2.1)$$

ここで, F は振動の周期であり, γ はポーア-ゾンマーフェルトの量子化条件,

$$S_n = \frac{2\pi eB}{\hbar}(n + \gamma) \quad (3.2.2)$$

により導かれる. この γ とベリー位相 Φ_B は $\gamma = \frac{1}{2} - \frac{\Phi_B}{2\pi}$ の関係にある [2]. δ は 3 次元のバルクの場合は $1/8$, 二次元の表面の場合は 0 となる定数である. 一方で, スピン分裂変数 M も量子振動により観測される. スピン分裂変数も量子振動の位相部分として観測され, 次のように書ける [1].

$$\frac{F}{B} = n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}M \quad (3.2.3)$$

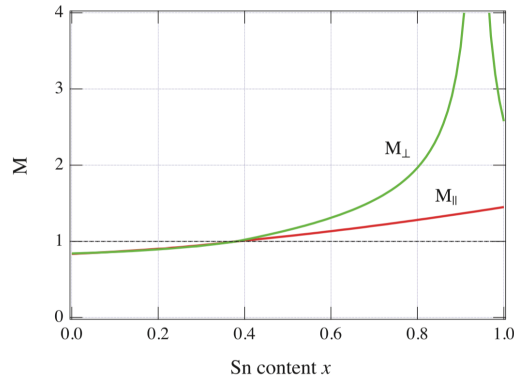


図 3.2.1 PbTe に Sn を混ぜることによるスピン分裂変数 M の変化 [14].

ここで δ は無視した. このスピン分裂変数とベリー位相の関係を考える. 式 (3.2.3) を式 (3.2.1) の位相部分に代入する.

$$\begin{aligned} 2\pi \left(\frac{F}{B} + \frac{1}{2} - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) &= 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}M + \frac{1}{2} - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \\ &= 2\pi(n+1) \pm \frac{1}{2}M - \frac{\Phi_B}{2\pi} \end{aligned}$$

量子振動において式 (3.2.2) が成り立つのは振動の頂点であるので, 式 (3.2.1) の \cos の中は 0 となる. よって次の関係が成り立つ.

$$\pm \frac{1}{2}M - \frac{\Phi_B}{2\pi} = 0 \rightarrow \phi_B = \pi M \quad (3.2.4)$$

このように, ベリー位相とスピン分裂変数の間には密接な関係がある. また, ベリー位相は 0 (自明) か 1 (非自明) かで判断される不連続な数であると考えられていたが, スピン分裂変数との関係により連続的な数であることが分かる. 例えば図 3.2.1 のような $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ におけるスピン分裂変数の報告がある. 自明な物質である PbTe から非自明な物質である SnTe への連続的変化を考えると, バンドギャップが閉じた場合にスピン分裂変数 $M_{\text{ZC}} = 1$ となり, その前後で連続的に変化することが示されている [14].

3.3 トポロジカル半金属

ここでは, 近年盛んに研究されているワイル半金属ならびにディラック半金属について簡単に解説する. より詳しい内容を知るためには, Armitage らによるレビューを参照されたい [46]. 1928 年にディラックにより量子力学での特殊相対性理論の融合を可能にしたディラック方程式が提案された [28]. その派生として, 質量のない粒子を記述したワイル方程式が誕生した [47]. このディラック方程式およびワイル方程式により記述される粒子をそれぞれディラック粒子ならびにワイル粒子とよぶ. 現在までのところ, 筆者の知る限りでは質量のないワイル粒子の存在は確認されていない. しかし固体物理においては,

このワイル粒子に似た性質を持つ電子が存在する。Herring らによりバンドが縮退する条件が調べられた [48]。この縮退する点周辺では一般的に分散は線形となっており、その形はワイル方程式が満たす分散に似ている。また、ワイル粒子の特徴の一つであるカイラル異常などといった性質は、この固体物理中でのワイル粒子的な分散からも得られている。カイラル異常は Adler と Bell らにより議論された [49,50]。このような性質をもつ分散は、2011 年に Wang らによりワイルノードと名付けられた。時間と空間の反転対称性を満たす場合、自明な絶縁体から非自明なトポロジカル絶縁体へ変異する場合、ギャップが閉じた状態を経由することが知られている [51] (このギャップが閉じた状態は多くの場合三次元ディラック分散とよばれる.)。このギャップが閉じた状態で、反転対称性を破ることで縮退していた分散が解け、ワイルノードをもつギャップが閉じた状態へと推移する。これらの分散を持つ物質は半金属ではない。しかし、2011 年に X.Wang らによりワイル半金属とよばれた [52]。これは、化学ポテンシャルがワイルノード付近に存在することに起因する。以下では、ワイル半金属並びにディラック半金属について詳しく説明をしたのち、これらの物質における磁場中の輸送現象について解説する。

3.3.1 ワイル半金属およびディラック半金属と対称性

トポロジカル半金属物質では価電子帯と伝導帯のバンドが接触する。一般的に縮退したバンド同士が接触する場合をディラック半金属とよび、縮退のないバンド同士が接触する場合をワイル半金属とよぶ。縮退の有無は対称性により決められている。以下の 3 種類の対象性について考える。

[1] 時間反転対称性および空間反転対称性を保っている場合

この場合は必ず二重に縮退を起こす。これがディラック半金属の状態である。

[2] 時間反転対称性のみを保っている場合

この場合は逆格子ベクトルを法として $\mathbf{k} \equiv -\mathbf{k}$ となるような TRIM (time-reversal invariant momenta) とよばれる特別な点でのみ縮退を起こす。この場合、ある点 $k = k_0$ にワイルノードが存在すれば $k = -k_0$ にもワイルノードが存在する。よって、スピンのアップとダウンを考えると全部で 4 つのワイルノードが存在することとなる。

[3] 空間反転対称性のみを保っている場合

この場合は一般的にバンド縮退を起こさない。スピンの異なる二つのワイルノードが存在し、ワイル半金属となる最低条件である。つまり、ワイル半金属物質では、最低でも二つの円錐形の分散を持つ。

ディラック半金属物質かも対称性によりある程度理解することができる。全ての物質がディラック半金属となり得るわけではなく、二重群の既約表現によりディラック半金属となり得るかが決まっている [53]。ディラック半金属物質はスピンにより縮退した伝導帯バンドと価電子帯バンドが交点を持つ必要がある。交点を持つためには、価電子帯と伝導帯のもつ対称性が異なる必要がある。例えば、 $I4/mcm$ の対称性を持つ正方晶は c 軸方向に C_{2v} の対称性を持つ。 C_{2v} の二重群の既約表現は一つのみである。そのため、全ての状態

が同じ対称性を持つ。価電子帯と伝導帯の縮退が許されず、ディラック半金属となることが出来ない。一方で Cd_3As_2 が持つ対称性としてあげられる $I4_1/acd$ は C_4 の対称性を持ち、これは複数の既約表現を持つ。そのため、 Cd_3As_2 はディラック半金属物質となりうる。以上のように、トポロジカル半金属物質は対称性と非常に密接な関係を持つ。トポロジカル半金属物質ではこのような対称性についての議論の他に、電気陰性度と原子番号の比とバンドギャップの大きさの議論等も行われ、物質探索が盛んに行われている [53]。

3.3.2 トポロジカル半金属における量子振動

1章でも見たように、ボア-ゾンマーフェルトの量子化条件によりランダウ準位は次のような関係を持つ。

$$S = \frac{2\pi eB}{\hbar} (n + \gamma \pm \delta)$$

ここで、 δ は補正項であり二次元物質の場合は 0、三次元物質の場合は $1/8$ となる [1, 42]。ボア-ゾンマーフェルトの量子化条件により現れた γ はベリー位相と関係があり。前節と同様に $\gamma = \frac{1}{2} - \frac{\Phi_B}{2\pi}$ の関係にある。ディラック電子系の場合、ベリー位相は π となり、自由電子の場合は 0 となる。実験では、fan-diagram plot を使用することでベリー位相を決定できる [54, 55]。トポロジカル半金属物質の代表的なモデルである Cd_3As_2 では、図 3.3.1 のように fan-diagram plot を使用してベリー位相を決定した実験が報告されている。ベリー位相が π に近い値 [切片 $\Phi_B / (2\pi) = 0.56, 0.58$] であることが報告された [56]。一方で C.M.Wang らにより、非常に簡易的な 2 ノードモデルでベリー位相がフェルミエネルギーの変化に敏感に反応することが示された [22]。トポロジカル半金属物質では、リフシッツ点を境にベリー位相が δ を含め、 π から 0 へと変わる結果が報告されている。このようにトポロジカル物質におけるベリー位相は非常に複雑であり、注目されている。

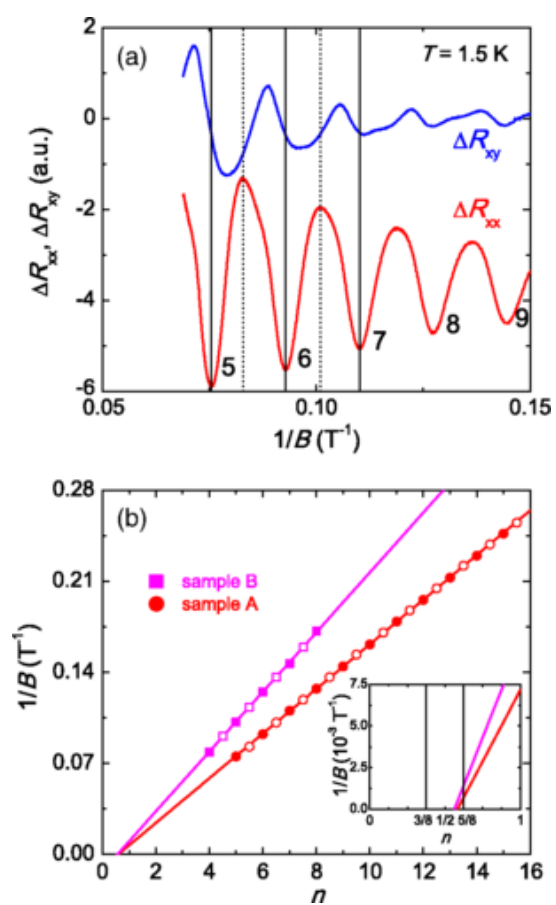


図 3.3.1 Cd_3As_2 における量子振動の実験結果 [56].

第 4 章

$k \cdot p$ 模型における磁場中電子状態 とスピン分裂変数

磁場中の電子状態を計算することは困難が伴う。前章で見たように、 $k \cdot p$ 理論を用いることで、磁場中効果を厳密に導入できるが、非可換な演算子 π の存在により手で解ける範囲まで模型を小さくする必要があった。そのため、物質ごとに個別の対応を行ってきた [57–62]。例えばディラック電子系物質の代表物質である Bi では、2 バンドディラック模型やウルフ模型を使用して磁場中電子状態にアプローチしてきた [63]。しかし、Bi や PbTe 等のスピン軌道結合効果が強い物質での異常な g 因子を説明するためには、多バンドの効果を考慮に入れる必要があった。この問題に対して、一種の摂動論である Löwdin partitioning を使用することで、多バンド効果を含んだ異常な g 因子の計算を可能とした [10]。この手法により Bi や PbTe で異常な g 因子の計算が行われた [10, 14]。今章では Löwdin partitioning を使用した方法を含め、 $k \cdot p$ 理論を用いた磁場中電子状態の計算方法を記す。

4.1 ディラック電子系物質の有効模型

ディラック電子系物質の最大の特徴が線形なエネルギー分散を持つことである。この線形な分散はディラック模型により議論される。今回はこのディラック模型の導出を行う。

4.1.1 ディラック模型

ディラック電子系の代表的な物質が Bi である。Cohen と Blount により $k \cdot p$ 模型を使用した 2 バンド模型が作成された [11]。この模型はスピン軌道結合の効果を含んでおり、Bi の L 点付近を十分に再現することが分かっている。Cohen-Blount 模型は次のように

表される.

$$H = \begin{bmatrix} \Delta & 0 & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} \\ 0 & \Delta & -\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}^* & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}^* \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}^* & -\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} & -\Delta & 0 \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}^* & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t} & 0 & -\Delta \end{bmatrix} \quad (4.1.1)$$

ここで, Δ はバンドギャップの半分の大きさである. ここで, \mathbf{t}, \mathbf{u} は対称性から速度行列成分 $\mathbf{v}_{i,j}$ を用いて以下のように定義される.

$$\begin{aligned} \mathbf{t} &\equiv \mathbf{v}_{1,3} = \mathbf{v}_{4,2} \\ \mathbf{u} &\equiv \mathbf{v}_{1,4} = -\mathbf{v}_{3,2} \end{aligned}$$

ウルフはこの模型に適切な変換を行うことで, $\text{Re}(\mathbf{t}) = 0$ とした [12]. ハミルトニアンは次のような非常に簡易的な形で書ける.

$$H = \Delta\beta + i\hbar\mathbf{k} \cdot \left[\sum_{\mu=1}^3 \mathbf{W}(\mu) \beta\alpha_{\mu} \right] \quad (4.1.2)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \mathbf{W}(1) &= \text{Im}(\mathbf{u}) \\ \mathbf{W}(2) &= \text{Re}(\mathbf{u}) \\ \mathbf{W}(3) &= \text{Im}(\mathbf{t}) \end{aligned}$$

である. この式 (4.1.2) をウルフハミルトニアンと呼ぶ. このハミルトニアンの構造を理解するため, 次のような場合を考える.

$$\begin{aligned} \mathbf{W}(1) &= (\gamma, 0, 0) \\ \mathbf{W}(2) &= (0, \gamma, 0) \\ \mathbf{W}(3) &= (0, 0, \gamma) \end{aligned}$$

すると式 (4.1.2) は,

$$H = \begin{pmatrix} \Delta & i\hbar\gamma\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -i\hbar\gamma\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{pmatrix} \quad (4.1.3)$$

となる. 式 (4.1.3) はディラックハミルトニアン,

$$H_{\text{Dirac}} = \begin{pmatrix} m & \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -m \end{pmatrix}$$

と等価であり, 等方的ディラック模型とよぶ [8, 63]. 等方的ディラック模型の固有値 E について考える. A, B, C, D を行列としたとき,

$$\det \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \det A \det [D - CA^{-1}B]$$

で表せることから [64, 65], 固有値 E を求めるには次の方程式を解けばよい.

$$\begin{aligned} & \det \begin{bmatrix} \Delta - E & i\hbar\gamma\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -i\hbar\gamma\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta - E \end{bmatrix} \\ &= \det[\Delta - E] \det \left[(-\Delta - E) - (-i\hbar\gamma\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\Delta - E)^{-1}(i\hbar\gamma\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \right] = 0 \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

ここで \mathbf{I} は単位行列で, $\Delta = \Delta\mathbf{I}$ および $E = E\mathbf{I}$ である. $k_{\pm} = (k_x \pm ik_y)/\sqrt{2}$, $\gamma' = \sqrt{2}\gamma$ として,

$$\begin{aligned} (-i\hbar\gamma'\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\Delta - E)^{-1}(i\hbar\gamma'\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= \frac{\hbar^2\gamma'^2}{\Delta - E} \begin{pmatrix} k_z & k_- \\ k_+ & -k_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_z & k_- \\ k_+ & -k_z \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2\gamma'^2}{\Delta - E} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \mathbf{I} \end{aligned}$$

であるので, 式 (4.1.4) は次のように解ける.

$$\begin{aligned} -\Delta^2 + E^2 - \hbar^2\gamma'^2(k_z^2 + k_-k_+) &= 0 \\ \rightarrow E &= \pm\sqrt{\Delta^2 + \hbar^2\gamma'^2(k_z^2 + k_-k_+)} \end{aligned} \quad (4.1.5)$$

図 4.1.1 にそのバンド分散を示す. この円錐状の分散がディラックコーンと呼ばれる. 磁場中の固有値について考える. 磁場中では, 式 (4.1.3) において $\hbar\mathbf{k} \rightarrow \boldsymbol{\pi}$ の変換を行えば良い.

$$H = \begin{pmatrix} \Delta & i\hbar\gamma\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -i\hbar\gamma\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{pmatrix} \quad (4.1.6)$$

ここで, 固有値を E として固有値方程式 $H\psi = E\psi$ の両辺の二乗を考えると,

$$\begin{aligned} H^2 &= \begin{pmatrix} \Delta & i\hbar\gamma\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -i\hbar\gamma\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta E & i\gamma\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -i\gamma\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \Delta^2 + \gamma^2(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma}) & 0 \\ 0 & \Delta^2 + \gamma^2(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

となり, ブロック対角化される.

$$(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \begin{pmatrix} \hbar^2k_z^2 + 2\pi_-\pi_+ & 0 \\ 0 & \hbar^2k_z^2 + 2\pi_+\pi_- \end{pmatrix}$$

および,

$$\begin{aligned} 2\pi_+\pi_- &= \pi_x^2 + \pi_y^2 + i(\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi})_z \\ &= (2n+1)e\hbar B + e\hbar B \\ 2\pi_-\pi_+ &= \pi_x^2 + \pi_y^2 - i(\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi})_z \\ &= (2n+1)e\hbar B - e\hbar B \end{aligned}$$

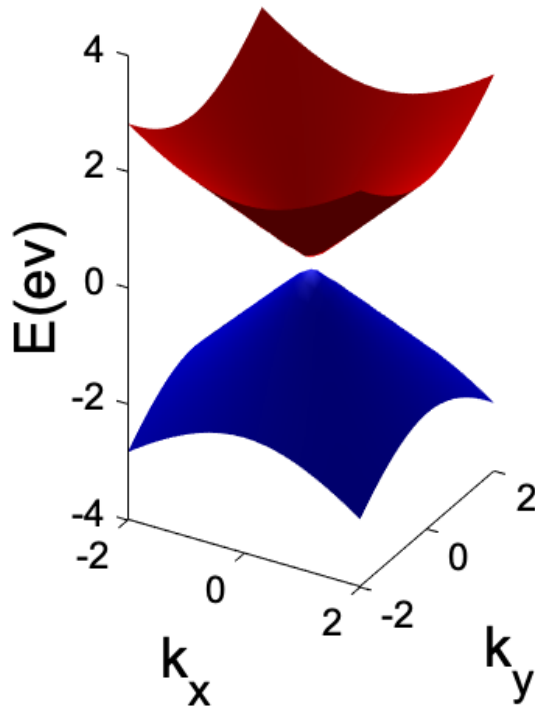


図 4.1.1 2 バンドディラック模型のエネルギー分散. $\Delta = 0.1, \gamma = 1$ とした.

なので, 固有値は次のようになる.

$$\Delta^2 + (2n + 1 \pm 1) e\hbar B \gamma^2 + \hbar^2 k_z^2 \gamma^2 - E^2 = 0 \quad (4.1.8)$$

$$\rightarrow E = \pm \sqrt{\Delta^2 + 2\gamma^2 \left(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) e\hbar B + \hbar^2 k_z^2 \gamma^2} \quad (4.1.9)$$

最低ランダウ準位を考える. $j = n + 1/2 \pm 1/2$ とすると, $j = 0$ の場合が最低ランダウ準位である. この場合, 最低ランダウ準位が磁場に依存しないことが分かる. これがディラック電子系の特徴である.

ディラック模型におけるスピン分裂変数についても考える. 式 (4.1.8) より, ゼーマン

分裂およびサイクロトロンエネルギーは次のように書ける.

$$\begin{aligned} E_z &= E_{n,+} - E_{n,-} \\ &= \sqrt{\Delta^2 + 2\gamma^2 \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \hbar e B + \hbar^2 k_z^2 \gamma^2} - \sqrt{\Delta^2 + 2\gamma^2 \left(n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) \hbar e B + \hbar^2 k_z^2 \gamma^2} \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

$$\begin{aligned} E_C &= E_{n,+} - E_{n-1,+} \\ &= \sqrt{\Delta^2 + 2\gamma^2 \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) e \hbar B + \hbar^2 k_z^2 \gamma^2} - \sqrt{\Delta^2 + 2\gamma^2 \left(n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) e \hbar B + \hbar^2 k_z^2 \gamma^2} \end{aligned} \quad (4.1.11)$$

よって, E_Z と E_C の比から定義される M_{ZC} は,

$$M_{ZC} = 1 \quad (4.1.12)$$

である. このことから, ディラック電子系であればスピン分裂変数が1であると言え, 1からどの程度離れているかを見ることで, ディラック電子系らしさを判断することが出来る.

4.1.2 拡張ディラック模型

Zhu らにより, 実験と合うような拡張ディラック模型が提案された [13]. Bi の電子状態には当然ディラック模型に反映される2バンド以外にもバンドが存在する. これらのバンドの効果を現象論的に考慮した模型が拡張ディラック模型である. これら多バンドの効果は磁場の一次までで十分であり, 次のような項を加えることで摂動的に表される [66–69].

$$\frac{\sigma}{2} g' \mu_B B$$

ここで g' は追加 g 因子とよばれ, 実験により現象論的に決定されてきた [13, 33, 70]. 最終的に, 拡張ディラック模型における磁場中のエネルギー固有値は次のように書ける.

$$E_{n,\sigma}^{\text{Ex-Dirac}} = \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z}} + \frac{\sigma}{2} g' \mu_B B \quad (4.1.13)$$

スピン分裂変数について考える. サイクロトロンエネルギーはディラック模型の場合と同様である. ゼーマンエネルギーはディラック模型の場合のゼーマン分裂 E_Z^{Dirac} を用いて, $E_Z = E_Z^{\text{Dirac}} + g' \mu_B B$ と表せる. よって,

$$M_{ZC} = \frac{E_Z}{E_C} = 1 + \frac{g' \mu_B B}{E_{n,+}^{\text{Dirac}} - E_{n-1,+}^{\text{Dirac}}} \quad (4.1.14)$$

となる.

4.2 多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型

ここまでは、有効模型の計算を行ってきた。ここからはより一般性を高めるため、多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型の計算について解説する。前述のとおり磁場中では力学的運動量 π の存在により、多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型を解くことは困難である。この問題に対しては様々な手法によりアプローチが可能である。以下で、多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型の解き方について議論する。

結晶中のスピン軌道結合の効果を含む一電子系のハミルトニアンは次のように書ける。

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p} \quad (4.2.1)$$

磁場中の効果を導入するために Luttinger-Kohn の理論を適用する [6]。この $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論の固有値方程式は次のように書ける [71, 72]。

$$\sum_{n'} \left[\left(E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \delta_{nn'} \delta_{\sigma\sigma'} + \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{nn'}^{\sigma\sigma'} \right] c_{n'\sigma'}(\mathbf{k}) = E c_{n\sigma}(\mathbf{k}) \quad (4.2.2)$$

n バンドの系を考える。ハミルトニアンはバンドの指標を基底として次のような $2n \times 2n$ の行列で表現できる。

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \begin{bmatrix} E_1 & 0 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_2 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_2 & \cdots \\ 0 & E_1 & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1^* & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_2^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_2^* & \cdots \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1^* & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 & E_3 & 0 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_1 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_1 & \cdots \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1 & 0 & E_3 & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_1^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_1^* & \cdots \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_2^* & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_2 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_1^* & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_1 & E_4 & 0 & \cdots \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_2^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_2 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_1^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_1 & 0 & E_4 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (4.2.3)$$

ここで、次のような対称性を考慮した。

$$v_{mn}^{\uparrow\uparrow} = \langle \psi_{m\uparrow} | \mathbf{v} \psi_{n\uparrow} \rangle = \langle C \mathbf{v} \psi_{m\uparrow} | C \psi_{n\uparrow} \rangle = \langle \psi_{n\downarrow} | \mathbf{v} \psi_{m\downarrow} \rangle = v_{nm}^{\downarrow\downarrow} \quad (4.2.4)$$

$$v_{mn}^{\uparrow\downarrow} = \langle \psi_{m\uparrow} | \mathbf{v} \psi_{n\downarrow} \rangle = \langle \psi_{m\uparrow} | \mathbf{v} C \psi_{n\uparrow} \rangle = \langle C \mathbf{v} C \psi_{n\uparrow} | C \psi_{m\uparrow} \rangle = -v_{nm}^{\downarrow\uparrow} \quad (4.2.5)$$

$C = JK$, $C \psi_{n\uparrow} = \psi_{n\downarrow}$, $\langle \phi | \psi \rangle = \langle C \psi | C \phi \rangle$, $C^2 = -1$ という関係式を用いた。 J が空間反転, K が時間反転の演算子である。このことを踏まえ, 式 (4.2.3) バンド指標ごとに $t_n = v_{0n}^{\uparrow\uparrow}$, $u_n = v_{0n}^{\uparrow\downarrow}$ と定義し, $E_{2n} = E_{2n-1}$ とした。式 (4.2.4), 式 (4.2.5) の関係は数値計算におけるチェック等にも有用な関係式である。

4.3 Löwdin partitioning による解析的手法

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論の枠組みにおいて、非可換な演算子 π を用いることで厳密に磁場中効果を導入できる、 π の存在により多バンド模型のサイズ（行列サイズ）を手で解ける範囲まで小

さくする必要がある。今節では、多バンド効果を含んだまま磁場中の固有値方程式を解くために、着目する1バンドに対して一種の摂動論である Löwdin partitioning を用いて多バンド効果を加えた1バンド模型 (2×2 行列) を導出する。Löwdin partitioning を用いることで、式 (4.2.3) は次のように書ける [10, 71].

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)} + \mathcal{H}^{(2)} + \dots \quad (4.3.1)$$

$$\mathcal{H}_{mm'}^{(0)} = \mathcal{H}_{mm'}^0 \quad (4.3.2)$$

$$\mathcal{H}_{mm'}^{(1)} = \mathcal{H}'_{mm'} \quad (4.3.3)$$

$$\mathcal{H}_{mm'}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_l \mathcal{H}'_{ml} \mathcal{H}'_{lm'} \left(\frac{1}{E_m - E_l} + \frac{1}{E_{m'} - E_l} \right) \quad (4.3.4)$$

具体的には、次のようになる。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{11}^{(2)} &= \frac{\mathcal{H}_{13}\mathcal{H}_{31}}{E_1 - E_3} + \frac{\mathcal{H}_{14}\mathcal{H}_{41}}{E_1 - E_3} + \dots \\ &= \frac{(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_1)(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_1^*)}{E_1 - E_3} + \frac{(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_1)(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_1^*)}{E_1 - E_3} + \dots \\ &= \sum_{n \neq 1} \frac{1}{E_1 - E_{2n-1}} [(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_n)(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_n^*) + (\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_n)(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_n^*)] \\ &= \sum_{n \neq 1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha}_n \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + \frac{(-i)e\hbar}{2c} \mathbf{A}_n \cdot \mathbf{B} \right] \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

$$\alpha_{n,i,j} = \frac{1}{E_1 - E_{2n-1}} (t_{ni}t_{nj}^* + t_{nj}t_{ni}^* + u_{ni}u_{nj}^* + u_{nj}u_{ni}^*) \quad (4.3.6)$$

$$\mathbf{A}_n = \frac{1}{E_1 - E_{2n-1}} (\mathbf{t}_n \times \mathbf{t}_n^* + \mathbf{u}_n \times \mathbf{u}_n^*) \quad (4.3.7)$$

ここで、次のような関係式を用いた。

$$(\mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\pi})(\mathbf{t}^* \cdot \boldsymbol{\pi}) = \frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + \frac{(-i)e\hbar}{2} (\mathbf{t} \times \mathbf{t}^*) \cdot \mathbf{B} \quad (4.3.8)$$

同様にして、

$$\mathcal{H}_{12}^{(2)} = \sum_{n \neq 1} \frac{1}{E_1 - E_{2n-1}} [-(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_n)(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_n) + (\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_n)(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_n)] \quad (4.3.9)$$

$$= \sum_{n \neq 1} \frac{ie\hbar}{E_1 - E_{2n-1}} (\mathbf{t}_n \times \mathbf{u}_n) \cdot \mathbf{B} \quad (4.3.10)$$

$$\mathcal{H}_{21}^{(2)} = \sum_{n \neq 1} \frac{1}{E_1 - E_{2n-1}} [-(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_n^*)(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_n^*) + (\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_n^*)(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_n^*)] \quad (4.3.11)$$

$$= \sum_{n \neq 1} \frac{-ie\hbar}{E_1 - E_{2n-1}} (\mathbf{t}_n^* \times \mathbf{u}_n^*) \cdot \mathbf{B} \quad (4.3.12)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{22}^{(2)} &= \sum_{n \neq 1} \frac{1}{E_1 - E_{2n-1}} [(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_n^*) (\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_n) + (\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_n^*) (\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_n)] \\
&= \sum_{n \neq 1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha}_n \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} - \frac{(-i) e \hbar}{2} \mathbf{A}_n \cdot \mathbf{B} \right]
\end{aligned} \tag{4.3.13}$$

よって、解くべき有効ハミルトニアンは次のようになる。

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{eff}} &= \frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} \\
&+ \sum_{n \neq 1} \left[\frac{im\mu_B}{E_1 - E_{2n-1}} \begin{pmatrix} -(\mathbf{t}_n \times \mathbf{t}_n^* + \mathbf{u}_n \times \mathbf{u}_n^*) & 2\mathbf{t}_n \times \mathbf{u}_n \\ -2\mathbf{t}_n^* \times \mathbf{u}^* & \mathbf{t}_n \times \mathbf{t}_n^* + \mathbf{u}_n \times \mathbf{u}_n^* \end{pmatrix} \cdot \mathbf{B} \right]
\end{aligned} \tag{4.3.14}$$

ここで、 α は逆有効質量で、

$$\alpha_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{m} + \sum_{n \neq 1} \frac{t_{ni}t_{nj}^* + t_{nj}t_{ni}^* + u_{ni}u_{nj}^* + u_{nj}u_{ni}^*}{E_1 - E_{2n-1}} \tag{4.3.15}$$

である。 $\mu_B = e\hbar/2m$ はボーア磁子である。また式 (4.3.5) 以降、磁場中効果を導入するため $\hbar\mathbf{k} \rightarrow -i\hbar\nabla + e\mathbf{A} \equiv \boldsymbol{\pi}$ の変換を行った。式 (4.3.15) の第一項目は強スピン軌道結合系では非常に小さい。そのため、以下ではこの項は無視する。式 (4.3.14) の第一項目より、サイクロトロンエネルギー $\hbar\omega_c$ を得ることが可能である。

$$\hbar\omega_c = e\hbar B \sqrt{\det \alpha (\alpha^{-1})_{ii}} \tag{4.3.16}$$

ここで、磁場方向を i とした。第二項目はゼーマンエネルギー E_z は次のように求まる。

$$\begin{aligned}
E_z^2 &= m^2 \mu_B^2 \left[4 \left| \sum_{n \neq 1} \frac{(\mathbf{t}_n \times \mathbf{u}_n) \cdot \mathbf{B}}{E_1 - E_{2n-1}} \right|^2 - \left\{ \sum_{n \neq 1} \frac{(\mathbf{t}_n \times \mathbf{t}_n^* + \mathbf{u}_n \times \mathbf{u}_n^*) \cdot \mathbf{B}}{E_1 - E_{2n-1}} \right\}^2 \right] \\
&= m^2 \mu_B^2 \mathbf{B} \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{B}
\end{aligned} \tag{4.3.17}$$

$$\begin{aligned}
G_{ij} &= 4 \left(\sum_{n \neq 1} \frac{\mathbf{t}_n \times \mathbf{u}_n}{E_1 - E_{2n-1}} \right)_i \left(\sum_{n \neq 1} \frac{\mathbf{t}_n^* \times \mathbf{u}_n^*}{E_1 - E_{2n-1}} \right)_j \\
&- \left(\sum_{n \neq 1} \frac{\mathbf{t}_n \times \mathbf{t}_n^* + \mathbf{u}_n \times \mathbf{u}_n^*}{E_1 - E_{2n-1}} \right)_i \left(\sum_{n \neq 1} \frac{\mathbf{t}_n \times \mathbf{t}_n^* + \mathbf{u}_n \times \mathbf{u}_n^*}{E_1 - E_{2n-1}} \right)_j
\end{aligned} \tag{4.3.18}$$

磁場方向を i とすると $E_z = \pm (g/2) \mu_B B$ であり、有効 g 因子は $2m\sqrt{G_{ii}}$ で与えられる。以上より、磁場方向を z 方向とするとゼーマン-サイクロトロン比 M_{ZC} は次のように表せる。

$$M_{ZC} = \frac{\Delta E_z}{\hbar\omega_c} = \sqrt{\frac{G_{zz}}{\alpha_{xx}\alpha_{yy} - \alpha_{xy}^2}} \tag{4.3.19}$$

特に，2バンド模型については，バンドギャップを Δ とすると，

$$\begin{aligned}
G_{zz} &= \frac{1}{\Delta^2} \left[4 \left(|t_{ix}|^2 |u_{iy}|^2 + |t_{iy}|^2 |u_{ix}|^2 \right) + 2 \left(|t_{ix}|^2 |t_{iy}|^2 + |u_{iy}|^2 |u_{ix}|^2 \right) \right. \\
&\quad - \left(t_{1x}^2 t_{1y}^{*2} + t_{1y}^2 t_{1x}^{*2} + u_{1x}^2 u_{1y}^{*2} + u_{1y}^2 u_{1x}^{*2} \right) \\
&\quad \left. - 2 \left(t_{1x} t_{1y}^* u_{1y} u_{1x}^* + t_{1y} t_{1x}^* u_{1x} u_{1y}^* - t_{1x} t_{1y}^* u_{1x} u_{1y}^* + t_{1y} t_{1x}^* u_{1y} u_{1x}^* \right) \right] \\
&= \alpha_{xx} \alpha_{yy} - \alpha_{xy}^2
\end{aligned} \tag{4.3.20}$$

となり，2バンド模型では M_{ZC} の値は1となる．この結果もまた，数値計算の確認に有用である．実際の物質で計算を行うと，Biのホール (trigonal 方向) で $M_{ZC} = 2.08$ ，PbTe で $M_{ZC} = 0.801$ (式 (4.3.15) の第一項目を考慮すると 0.834 [14]) である．

4.3.1 2バンド+多バンド効果 (対角項のみ)

近年注目されているワイル電子系はバンドギャップが0である．輸送現象においては，フェルミ準位近傍の2本のバンドが大きく寄与する．前節では1バンドに対して摂動を加えることで多バンド効果を含むより精緻なハミルトニアンを導出した．そのため，バンドギャップが0であるワイル電子系への方法の適用は不適當であると考えられる．2バンドのディラック模型において，スピン分裂変数 (M_{ZC}) は最大でも1としかならないことが示されている．しかし，結晶中のスピン軌道結合効果が強い Bi_2Se_3 においては， M_{ZC} が2程度と大きくなることが知られている [10, 15, 16]．この問題に対して，現象論的な 4×4 模型を用いることが提案されている [17]．そこで本節では，多バンドの $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論に基づき，フェルミ準位近傍の2バンドに加えて，より高いエネルギーをもつ他のバンドの寄与を摂動的に加えることで，微視的な 4×4 行列を導出した．より精緻なこの行列を用いて，ゼーマン分裂とサイクロトロンエネルギーの式を導出し， M_{ZC} の表式を得た．

まず最初に，簡単のために対角項にのみ他バンドの寄与を加えることを考える． $2n \times 2n$ の行列のハミルトニアンを考える．式 (4.2.3) と同じく次のようなハミルトニアンとなる．

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} E_1 & 0 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_2 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_2 & \cdots \\ 0 & E_2 & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1^* & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_2^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_2^* & \cdots \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1^* & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 & E_3 & 0 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_1 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_1 & \cdots \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1 & 0 & E_4 & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_1^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_1^* & \cdots \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_2^* & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_2 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_1^* & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_1 & E_5 & 0 & \cdots \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_2^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_2 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_1^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_1 & 0 & E_6 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

前節と同様に Löwdin partitioning を用いて、 4×4 行列に多バンドの寄与を加える。

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{11} &= \sum_l \frac{\mathcal{H}_{1l}\mathcal{H}_{l1}}{E_1 - E_l} \\
&= \frac{\mathcal{H}_{15}\mathcal{H}_{51}}{E_1 - E_5} + \frac{\mathcal{H}_{16}\mathcal{H}_{61}}{E_1 - E_6} + \dots \\
&= \frac{(\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_2)(\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_2^*)}{E_1 - E_5} + \frac{(\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_2)(\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_2^*)}{E_1 - E_5} + \dots \\
&= \sum_{n \neq 0,1} \frac{1}{E_1 - E_{2n+1}} [(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_n)(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_n^*) + (\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_n)(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_n^*)] \\
&= \sum_{n \neq 0,1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha}_n^{tu} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + \frac{(-i)e\hbar}{2c} \mathbf{A}_n^{tu} \cdot \mathbf{B} \right] \tag{4.3.21}
\end{aligned}$$

ここで、

$$\alpha_{n,ij}^{tu} = \frac{t_{ni}t_{nj}^* + t_{nj}t_{ni}^* + u_{ni}u_{nj}^* + u_{nj}u_{ni}^*}{E_1 - E_{2n+1}} \tag{4.3.22}$$

$$\mathbf{A}_n^{tu} = \frac{t_n \times t_n^* + u_n \times u_n^*}{E_0 - E_{2n+1}} \tag{4.3.23}$$

と定義した。同様に、

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{22} &= \sum_{n \neq 0,1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha}_n^{tu} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + \frac{(-i)e\hbar}{2c} \mathbf{A}_n^{tu} \cdot \mathbf{B} \right] \\
&= \mathcal{H}_{11} \tag{4.3.24}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{33} &= \sum_{n \neq 0,1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha}_n^{sw} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + \frac{(-i)e\hbar}{2} \mathbf{A}_n^{sw} \cdot \mathbf{B} \right] \\
&= \mathcal{H}_{44} \tag{4.3.25}
\end{aligned}$$

である。先ほどまでと同様に α について次のように定義した。

$$\alpha_{n,ij}^{sw} = \frac{s_{n-1i}s_{n-1j}^* + s_{n-1j}s_{n-1i}^* + w_{n-1i}w_{n-1j}^* + w_{n-1j}w_{n-1i}^*}{E_3 - E_n} \tag{4.3.26}$$

以上から、対角項にのみ摂動を加えた 4×4 行列のハミルトニアンは次のようになる。

$$\begin{aligned}
H &= \begin{bmatrix} E_1 + \mathcal{H}_{11} & 0 & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1 & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 \\ 0 & E_1 + \mathcal{H}_{11} & -\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1^* & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1^* \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1^* & -\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 & E_3 + \mathcal{H}_{33} & 0 \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1^* & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1 & 0 & E_3 + \mathcal{H}_{33} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \Delta + \mathcal{H}_d & 0 & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1 & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 \\ 0 & \Delta + \mathcal{H}_d & -\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1^* & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1^* \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1^* & -\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 & -(\Delta + \mathcal{H}_d) & 0 \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1^* & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1 & 0 & -(\Delta + \mathcal{H}_d) \end{bmatrix} \tag{4.3.27}
\end{aligned}$$

ここで,

$$\Delta = E_1 - E_3 \quad (4.3.28)$$

$$\mathcal{H}_d = \mathcal{H}_{11} - \mathcal{H}_{33} \quad (4.3.29)$$

とした. このとき, $\text{Re}(t) = 0$ とすると, 次のような単純な形に書き直せる. (ウルフハミルトニアン [12])

$$H = \Delta\beta + i\hbar\mathbf{k} \cdot \left[\sum_{\mu=1}^3 \mathbf{W}(\mu) \beta\alpha_\mu \right] \quad (4.3.30)$$

ここで,

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

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

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

これをディラックハミルトニアンと同様の形に整理すると,

$$H = \begin{bmatrix} \Delta + \mathcal{H}_d & i\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda} \\ -i\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda} & -(\Delta + \mathcal{H}_d) \end{bmatrix} \quad (4.3.31)$$

となる. このとき,

$$i\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} \hbar\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_1 & \hbar\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_1 \\ \hbar\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_1^* & \hbar\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_1^* \end{bmatrix} \quad (4.3.32)$$

と置いた. 固有値を求めるために, 両辺を二乗する.

$$\begin{aligned} H^2\psi &= \begin{bmatrix} (\Delta + \mathcal{H}_d)^2 + (\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda})^2 & 0 \\ 0 & (\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda})^2 + (\Delta + \mathcal{H}_d)^2 \end{bmatrix} \psi \\ &= \begin{bmatrix} \Delta^2 + 2\Delta\mathcal{H}^* & 0 \\ 0 & \Delta^2 + 2\Delta\mathcal{H}^* \end{bmatrix} \psi \\ &= E^2\psi \end{aligned} \quad (4.3.33)$$

有効質量は簡単には $\lim_{k \rightarrow 0} (\partial^2 E / \partial k^2)^{-1}$ で求めることができる. 最後に \mathbf{k} のゼロ極限と全体の逆数を取ることを考えると, 有効質量を求めるに当たり k^3 以上の項は 0 となる. \mathcal{H}_d は k^2 のオーダーであるので \mathcal{H}_d^2 は無視できる. よって,

$$\begin{aligned} (\Delta + \mathcal{H}_d)^2 &= \Delta^2 + 2\Delta\mathcal{H}_d + \mathcal{H}_d^2 \\ &\simeq \Delta^2 + 2\Delta\mathcal{H}_d \end{aligned} \quad (4.3.34)$$

である. このことを踏まえると,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^* &= \mathcal{H}_d + \frac{(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda})^2}{2\Delta} \\ &= \sum_{n \neq 0,1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha}_n^{tu} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + \frac{(-i)e\hbar}{2} \mathbf{A}_n^{tu} \cdot \mathbf{B} \right] - \sum_{n \neq 0,1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha}_n^{sw} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + \frac{(-i)e\hbar}{2} \mathbf{A}_n^{sw} \cdot \mathbf{B} \right] \\ &\quad + \frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha}_1^{tu} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + \frac{(-i)e\hbar}{2} \mathbf{A}_1^{tu} \cdot \mathbf{B} \\ &= \frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + (-i)m\mu_B \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \end{aligned} \quad (4.3.35)$$

このとき,

$$\boldsymbol{\alpha} = \sum_{n \neq 0} \boldsymbol{\alpha}_n^{tu} - \sum_{n \neq 0,1} \boldsymbol{\alpha}_n^{sw} \quad (4.3.36)$$

$$\mathbf{A} = \sum_{n \neq 0} \mathbf{A}_n^{tu} - \sum_{n \neq 0,1} \mathbf{A}_n^{sw} \quad (4.3.37)$$

である. 式 (4.3.35) 第一項について考える. この固有値は次のような形で与えられる.

$$\hbar\omega_c^* \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \quad (4.3.38)$$

k_h は磁場方向の波数ベクトルである. サイクロトロン周波数 ω_c^* は次のように与えられる.

$$\omega_c^* = \frac{eB}{m_c^*} \quad (4.3.39)$$

サイクロトロン質量 m_c^* は次のように与えられる.

$$m_c^* = \sqrt{\frac{\det \hat{m}}{m_h}} \quad (4.3.40)$$

$$\begin{aligned} \hat{m} &= \boldsymbol{\alpha}^{-1} \\ m_h &= \mathbf{h} \cdot \hat{m} \cdot \mathbf{h} \end{aligned}$$

以下, 磁場が z 軸方向にかけられていると考えると,

$$m_c^* = \sqrt{\frac{\det \hat{m}}{m_z}} \quad (4.3.41)$$

$$= \sqrt{\frac{1}{\alpha_{xx}\alpha_{yy} - \alpha_{xy}^2}} \quad (4.3.42)$$

式 (4.3.39),(4.3.41) より, サイクロトロンエネルギー $\hbar\omega_c^*$ は次のようになる.

$$\begin{aligned} \hbar\omega_c^* &= \hbar \frac{eB}{m_c^*} \\ &= 2m\mu_B \sqrt{\alpha_{xx}\alpha_{yy} - \alpha_{xy}^2} \end{aligned} \quad (4.3.43)$$

式 (4.3.35) 第二項について考える. この式の固有値はゼーマンエネルギー E_Z である.

$$\begin{aligned} E_Z^2 &= ((-i) m\mu_B \mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^2 \\ &= m^2 \mu_B^2 \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{G}} \cdot \mathbf{B} \end{aligned} \quad (4.3.44)$$

ここで,

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{G}}_{ij} &= -A_i A_j \\ &= - \left(\sum_{n \neq 0} A_n^{tu} - \sum_{n \neq 0, 1} A_n^{sw} \right)_i \left(\sum_{n \neq 0} A_n^{tu} - \sum_{n \neq 0, 1} A_n^{sw} \right)_j\end{aligned}$$

とした. 有効 g 因子は $\hat{g} = 2m\sqrt{G_{zz}}$ で与えられる. また, $E_Z = \hat{g}\mu_B B_z$ であるので

$$E_Z = 2m\mu_B \sqrt{G_{zz}} \quad (4.3.45)$$

以上から, ゼーマン分裂とサイクロトロン周波数の比 M_{ZC} は式 (4.3.43) および式 (4.3.45) より,

$$M = \frac{\Delta E_Z}{\hbar\omega_c} = \sqrt{\frac{G_{zz}}{\alpha_{xx}\alpha_{yy} - \alpha_{xy}^2}} \quad (4.3.46)$$

となり, 中身こそ違えど式 (4.3.19) と同様な形となる.

4.3.2 非対角項への摂動を考えた計算

前節では対角成分に入る摂動のみを考慮していた。しかし、実際には非対角項にも摂動が入る。Löwdin partitioning を用いて得られる摂動項は次のようになる。

$$\mathcal{H}_{11} = \sum_{n \neq 0,1} \epsilon_{n11}^{-1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot (\boldsymbol{\alpha}_n^{tt^*} + \boldsymbol{\alpha}_n^{uu^*}) \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + (-i) m \mu_B (\mathbf{A}_n^{tt^*} + \mathbf{A}_n^{uu^*}) \cdot \mathbf{B} \right] \quad (4.3.47)$$

$$\mathcal{H}_{12} = \sum_{n \neq 0,1} \epsilon_{n11}^{-1} 2(i) m \mu_B \mathbf{A}_n^{tu} \cdot \mathbf{B} \quad (4.3.48)$$

$$\mathcal{H}_{13} = \sum_{n \neq 0,1} \epsilon_{n13}^{-1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot (\boldsymbol{\alpha}_n^{ts^*} + \boldsymbol{\alpha}_n^{uw^*}) \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + (-i) m \mu_B (\mathbf{A}_n^{ts^*} + \mathbf{A}_n^{uw^*}) \cdot \mathbf{B} \right] \quad (4.3.49)$$

$$\mathcal{H}_{14} = \sum_{n \neq 0,1} \epsilon_{n13}^{-1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot (-\boldsymbol{\alpha}_n^{tw} + \boldsymbol{\alpha}_n^{us}) \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + (-i) m \mu_B (-\mathbf{A}_n^{tw} + \mathbf{A}_n^{us}) \cdot \mathbf{B} \right] \quad (4.3.50)$$

$$\mathcal{H}_{22} = \sum_{n \neq 0,1} \epsilon_{n11}^{-1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot (\boldsymbol{\alpha}_n^{uu^*} + \boldsymbol{\alpha}_n^{tt^*}) \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} - (-i) m \mu_B (\mathbf{A}_n^{uu^*} + \mathbf{A}_n^{tt^*}) \cdot \mathbf{B} \right] \quad (4.3.51)$$

$$\mathcal{H}_{23} = \sum_{n \neq 0,1} \epsilon_{n13}^{-1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot (-\boldsymbol{\alpha}_n^{u^*s^*} + \boldsymbol{\alpha}_n^{t^*w^*}) \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + (-i) m \mu_B (-\mathbf{A}_n^{u^*s^*} + \mathbf{A}_n^{t^*w^*}) \cdot \mathbf{B} \right] \quad (4.3.52)$$

$$\mathcal{H}_{24} = \sum_{n \neq 0,1} \epsilon_{n13}^{-1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot (\boldsymbol{\alpha}_n^{u^*w} + \boldsymbol{\alpha}_n^{t^*s}) \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + (-i) m \mu_B (\mathbf{A}_n^{u^*w} + \mathbf{A}_n^{t^*s}) \cdot \mathbf{B} \right] \quad (4.3.53)$$

$$\mathcal{H}_{33} = \sum_{n \neq 0,1} \epsilon_{n33}^{-1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot (\boldsymbol{\alpha}_n^{ss^*} + \boldsymbol{\alpha}_n^{ww^*}) \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + (-i) m \mu_B (\mathbf{A}_n^{ss^*} + \mathbf{A}_n^{ww^*}) \cdot \mathbf{B} \right] \quad (4.3.54)$$

$$\mathcal{H}_{34} = \sum_{n \neq 0,1} \epsilon_{n33}^{-1} 2(-i) m \mu_B \mathbf{A}_n^{sw} \cdot \mathbf{B} \quad (4.3.55)$$

$$\mathcal{H}_{44} = \sum_{n \neq 0,1} \epsilon_{n33}^{-1} \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \cdot (\boldsymbol{\alpha}_n^{ww^*} + \boldsymbol{\alpha}_n^{ss^*}) \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} - (-i) m \mu_B (\mathbf{A}_n^{ww^*} + \mathbf{A}_n^{ss^*}) \cdot \mathbf{B} \right] \quad (4.3.56)$$

ここで、次のように定義した。

$$\frac{1}{\epsilon_{nij}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{E_i - E_{2n+1}} - \frac{1}{E_j - E_{2n+1}} \right) \quad (4.3.57)$$

$$\alpha_{n,ij}^{ab} = a_{ni} b_{nj} + a_{nj} b_{ni} \quad (4.3.58)$$

$$\mathbf{A}^{ab} = (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (4.3.59)$$

$$\mathcal{H}_{ij} = -(\mathcal{H}_{ji})^* \quad (4.3.60)$$

$$(\mathbf{A}^{ab})^* = \mathbf{A}^{a^*b^*} \quad (4.3.61)$$

よって、 4×4 行列 H は次のようになる。

$$H = \begin{bmatrix} \Delta + \mathcal{H}_{11} & \mathcal{H}_{12} & \pi \cdot \mathbf{t}_1 + \mathcal{H}_{13} & \pi \cdot \mathbf{u}_1 + \mathcal{H}_{14} \\ \mathcal{H}_{21} & \Delta + \mathcal{H}_{22} & -\pi \cdot \mathbf{u}_1^* + \mathcal{H}_{23} & \pi \cdot \mathbf{t}_1^* + \mathcal{H}_{24} \\ \pi \cdot \mathbf{t}_1^* + \mathcal{H}_{31} & -\pi \cdot \mathbf{u}_1 + \mathcal{H}_{32} & -\Delta + \mathcal{H}_{33} & \mathcal{H}_{34} \\ \pi \cdot \mathbf{u}_1^* + \mathcal{H}_{41} & \pi \cdot \mathbf{t}_1 + \mathcal{H}_{42} & \mathcal{H}_{43} & -\Delta + \mathcal{H}_{44} \end{bmatrix} \quad (4.3.62)$$

バンドが対称的であると考え、この行列は次のように書き直せる。

$$H = \begin{bmatrix} \mathcal{H}_u & \Lambda \\ \Lambda^\dagger & -\mathcal{H}_u \end{bmatrix} \quad (4.3.63)$$

$$\mathcal{H}_u = \begin{bmatrix} E_1 - E_3 + \mathcal{H}_{11} - \mathcal{H}_{33} & \mathcal{H}_{12} - \mathcal{H}_{34} \\ \mathcal{H}_{21} - \mathcal{H}_{43} & E_1 - E_3 + \mathcal{H}_{11} - \mathcal{H}_{33} \end{bmatrix} \quad (4.3.64)$$

$$= \begin{bmatrix} \Delta + \mathcal{H}_d & \mathcal{H}_D \\ \mathcal{H}_D^* & \Delta + \mathcal{H}_d \end{bmatrix} \quad (4.3.65)$$

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \pi \cdot \mathbf{t}_1 + \mathcal{H}_{13} & \pi \cdot \mathbf{u}_1 + \mathcal{H}_{14} \\ -\pi \cdot \mathbf{u}_1^* + \mathcal{H}_{23} & \pi \cdot \mathbf{t}_1^* + \mathcal{H}_{24} \end{bmatrix} \quad (4.3.66)$$

式 (4.3.62) の固有値を計算する。磁場の一次までを考えると、 Λ の磁場一次の項は固有値のときに二次で入る。そこで、簡単のために磁場一次の項を落とした計算を行う。つまり、

$$\Lambda \simeq \begin{bmatrix} \pi \cdot \mathbf{t}_1 & \pi \cdot \mathbf{u}_1 \\ -\pi \cdot \mathbf{u}_1^* & \pi \cdot \mathbf{t}_1^* \end{bmatrix} \quad (4.3.67)$$

とした場合について考える。 $\Delta + \mathcal{H}_d = \Delta'$ 、固有値を E とすると、次のような式となる。

$$(H - E)\psi = \begin{bmatrix} \Delta' - E & \mathcal{H}_D & \pi \cdot \mathbf{t}_1 & \pi \cdot \mathbf{u}_1 \\ -\mathcal{H}_D^* & \Delta' - E & -\pi \cdot \mathbf{u}_1^* & \pi \cdot \mathbf{t}_1^* \\ \pi \cdot \mathbf{t}_1^* & -\pi \cdot \mathbf{u}_1 & -\Delta' - E & -\mathcal{H}_D \\ \pi \cdot \mathbf{u}_1^* & \pi \cdot \mathbf{t}_1 & \mathcal{H}_D^* & -\Delta' - E \end{bmatrix} \psi \quad (4.3.68)$$

以下、この固有値方程式を解き、固有値 E の値を求める。 $\det(H - EI) = 0$ を E について解けば良い。

$$\det(H - E) = \begin{vmatrix} \Delta' - E & \mathcal{H}_D & \pi \cdot \mathbf{t}_1 & \pi \cdot \mathbf{u}_1 \\ -\mathcal{H}_D^* & \Delta' - E & -\pi \cdot \mathbf{u}_1^* & \pi \cdot \mathbf{t}_1^* \\ \pi \cdot \mathbf{t}_1^* & -\pi \cdot \mathbf{u}_1 & -\Delta' - E & -\mathcal{H}_D \\ \pi \cdot \mathbf{u}_1^* & \pi \cdot \mathbf{t}_1 & \mathcal{H}_D^* & -\Delta' - E \end{vmatrix} = 0 \quad (4.3.69)$$

対角項のみに摂動を加えた解析計算については H_{12}, H_{21} および H_{34}, H_{43} 成分が 0 であったため、簡単に解析計算を行う事が出来た。しかし、今回の方法では摂動項が新たに加えられておりこのまま手計算を行う事は困難である。

4.4 磁場中演算子の固有関数への演算

前節までは1バンド，もしくは2バンドに摂動を加えることでより精緻なハミルトニアンを導出していた．しかしこの方法は前章でも述べたように，いくつかの困難が存在した．この困難における最大の問題点は非可換な演算子 π の存在である．以下ではこの演算子 π を先に演算し，固有値計算を行うことを考える．この方法はラッティンジャー模型等で実際に行われている手法である [61, 62, 73, 74]．

4.4.1 ディラック模型+固有値演算

2バンドのディラックハミルトニアンは次のような 4×4 行列である．

$$\mathcal{H}_{iso} = \begin{bmatrix} \Delta & i\gamma\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -i\gamma\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{bmatrix} \quad (4.4.1)$$

$\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ について着目する．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} &= \begin{bmatrix} \hbar k_z & \pi_x - i\pi_y \\ \pi_x + i\pi_y & -\hbar k_z \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \hbar k_z & \pi_- \\ \pi_+ & -\hbar k_z \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.4.2)$$

よって，2バンドディラック模型のハミルトニアンは次のようになる ($k_z = 0$ とした)．

$$\mathcal{H}_{iso} = \begin{bmatrix} \Delta & 0 & 0 & i\gamma\sqrt{2}\pi_- \\ 0 & \Delta & i\gamma\sqrt{2}\pi_+ & 0 \\ 0 & -i\gamma\sqrt{2}\pi_- & -\Delta & 0 \\ -i\gamma\sqrt{2}\pi_+ & 0 & 0 & -\Delta \end{bmatrix} \quad (4.4.3)$$

ここで，次のような波動関数を考える．

$$\psi = \begin{bmatrix} c_1 G_a \\ c_2 G_b \\ c_3 G_c \\ c_4 G_d \end{bmatrix} \quad (4.4.4)$$

a, b, c, d はそれぞれランダウ準位を示している． G_a, G_b, G_c, G_d それぞれに対して， π_+, π_- はそれぞれつぎのように演算する．

$$\pi_+ G_a = \sqrt{e\hbar B (a+1)} G_{a+1} \quad (4.4.5)$$

$$\pi_- G_a = \sqrt{e\hbar B (a)} G_{a-1} \quad (4.4.6)$$

$\mathcal{H}_{iso}\psi = E\psi$ という波動方程式を考える.

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{iso}\psi &= \begin{bmatrix} \Delta & 0 & 0 & i\gamma\sqrt{2}\pi_- \\ 0 & \Delta & i\gamma\sqrt{2}\pi_+ & 0 \\ 0 & -i\gamma\sqrt{2}\pi_- & -\Delta & 0 \\ -i\gamma\sqrt{2}\pi_+ & 0 & 0 & -\Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 G_a \\ c_2 G_b \\ c_3 G_c \\ c_4 G_d \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} c_1 \Delta G_a + ic_4 \gamma \sqrt{2} \pi_- G_d \\ c_2 \Delta G_b + ic_3 \gamma \sqrt{2} \pi_+ G_c \\ -ic_2 \gamma \sqrt{2} \pi_- G_b - c_3 \Delta G_c \\ -ic_1 \gamma \sqrt{2} \pi_+ G_a - c_4 \Delta G_d \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} c_1 \Delta G_a + ic_4 \sqrt{2e\hbar B} (d) G_{d-1} \\ c_2 \Delta G_b + ic_3 \sqrt{2e\hbar B} (c+1) G_{c+1} \\ -ic_2 \sqrt{2e\hbar B} (b) G_{b-1} - c_3 \Delta G_c \\ -ic_1 \sqrt{2e\hbar B} (a+1) G_{a+1} - c_4 \Delta G_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_a c_1 G_a \\ E_b c_2 G_b \\ E_c c_3 G_c \\ E_d c_4 G_d \end{bmatrix} \quad (4.4.7)
\end{aligned}$$

固有値が存在するためには、ハミルトニアンに関数を演算した際に固有関数が存在する必要がある。今回の場合においては、演算の前後で波動関数の指標が変化しなければ良い。よって、

$$\begin{aligned}
a &= d - 1 \\
b &= c + 1
\end{aligned}$$

を満たすことで、固有値を持つことが可能である。

4.4.2 多バンド $k \cdot p$ 模型 + 固有値演算

簡単のため、まず Cohen-Blount の 4×4 行列を考える。

$$H = \begin{bmatrix} E_1 & 0 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1 & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 \\ 0 & E_1 & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1^* \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1^* & -\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 & E_2 & 0 \\ \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1^* & \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_1 & 0 & E_2 \end{bmatrix} \quad (4.4.8)$$

対称的なバンドを想定し、二つのバンドのギャップを 2Δ とする。磁場中効果を考慮して、ハミルトニアンを書き直す。

$$H = \begin{bmatrix} \Delta & 0 & \boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_1 & \boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_1 \\ 0 & \Delta & -\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_1^* & \boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_1^* \\ \boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_1^* & -\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_1 & -\Delta & 0 \\ \boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u}_1^* & \boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{t}_1 & 0 & -\Delta \end{bmatrix} \quad (4.4.9)$$

磁場の方向を z 方向と定めると、 $\pi_z = \hbar k_z$ である。以下、 $k_z = 0$ の場合を考える。 t_1, u_1 は速度演算子である。 t_1, u_1 を一般的な v で表し、式 (4.4.9) を π_+, π_- で表すことを考える。

$$\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{v} = \pi_x v_x + \pi_y v_y \quad (4.4.10)$$

ここで,

$$\begin{aligned}\pi_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\pi_x + i\pi_y) \\ \pi_- &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\pi_x - i\pi_y) \\ \Leftrightarrow \pi_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\pi_+ + \pi_-) \\ \pi_y &= \frac{-i}{\sqrt{2}} (\pi_+ - \pi_-)\end{aligned}$$

であることを考えると,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{v} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\pi_+ + \pi_-) v_x - \frac{i}{\sqrt{2}} (\pi_+ - \pi_-) v_y \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (v_x - iv_y) \pi_+ + \frac{1}{\sqrt{2}} (v_x + iv_y) \pi_-\end{aligned}\quad (4.4.11)$$

である. よって, $v_+ = (v_x + iv_y)/\sqrt{2}$, $v_- = (v_x - iv_y)/\sqrt{2}$ と書き表すと式 (4.4.9) は次のように書き直せる.

$$H = \begin{bmatrix} \Delta & 0 & -\left(\frac{1}{2}t_{1-\pi_+} + \frac{1}{2}t_{1+\pi_-}\right) & \frac{1}{2}u_{1-\pi_+} + \frac{1}{2}u_{1+\pi_-} \\ 0 & \Delta & \left(\frac{1}{2}u_{1-\pi_+} + \frac{1}{2}u_{1+\pi_-}\right) & \frac{1}{2}t_{1-\pi_+} + \frac{1}{2}t_{1+\pi_-} \\ \frac{1}{2}t_{1-\pi_+}^* + \frac{1}{2}t_{1+\pi_-}^* & -\left(\frac{1}{2}u_{1-\pi_+} + \frac{1}{2}u_{1+\pi_-}\right) & -\Delta & 0 \\ \frac{1}{2}u_{1-\pi_+}^* + \frac{1}{2}u_{1+\pi_-}^* & -\left(\frac{1}{2}t_{1-\pi_+} + \frac{1}{2}t_{1+\pi_-}\right) & 0 & -\Delta \end{bmatrix}\quad (4.4.12)$$

ここで, ディラックの場合と同様に次のような波動関数を考える.

$$\psi = \begin{bmatrix} c_1 G_a \\ c_2 G_b \\ c_3 G_c \\ c_4 G_d \end{bmatrix}\quad (4.4.13)$$

a,b,c,d はそれぞれランダウ準位を示している. G_a, G_b, G_c, G_d それぞれに対して, π_+, π_- はそれぞれ以下のように演算する.

$$\pi_+ G_a = \sqrt{e\hbar B (a+1)} G_{a+1}\quad (4.4.14)$$

$$\pi_- G_a = \sqrt{e\hbar B (a)} G_{a-1}\quad (4.4.15)$$

$\mathcal{H}_{\text{iso}}\psi = E\psi$ という固有値方程式を考える. ディラックの場合と同様, 固有値を持つためには演算した結果の波動関数の成分の指標が演算前と等しくなれば良い. 式 (4.4.9) で表されるハミルトニアンを波動関数に演算したとき, $\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{v} G_a$ という項が必ず存在する. これと式 (4.4.11) に着目すると,

$$\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{v} G_a = \left[\frac{1}{2} v_{1-} \sqrt{e\hbar B (a+1)} G_{a+1} + \frac{1}{2} v_{1+} \sqrt{e\hbar B (a+1)} G_a \right]\quad (4.4.16)$$

となる. 波動関数 G_{a+1} と G_{a-1} が混在しており, 元の波動関数 G_a に戻ることは出来ない. よって, この枠組みにおける, 多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型の波動方程式は固有値を持つこ

とが出来ない。ディラック模型では、 π_+, π_- がハミルトニアンと同じ行列要素に入ることにはなかった。そのため、ハミルトニアンを波動関数に演算した結果、 G_{a-1} と G_{a+1} といった同じ文字で異なるランダウ準位を示す波動関数が混在することはなかった。これに対し多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型では、ハミルトニアンと同じ行列要素に π_+, π_- が混在している。そのため、ハミルトニアンを波動関数に演算した結果、 G_{a-1} と G_{a+1} といった同じ文字で異なるランダウ準位を示す波動関数が混在してしまう。以上のことから、一般性を保ったまま「純粋に磁場中演算子 π を演算し、磁場中固有値を厳密に求める」ことは出来ないと考えられる。物質ごとの対応としては、ランダウ準位の基底数を増やす (G_{a-1} と G_{a+1} も基底として取る) ことで対応している [75]。

4.5 Fan-diagram plot によるスピン分裂変数の評価

ここまでは、各磁場に対応するゼーマンエネルギーとサイクロトロンエネルギーを計算することにより、スピン分裂変数の計算を行う方法を解説してきた。しかし、量子振動を用いた実験では特定の磁場に対するエネルギーを得ることは難しい。そこでスピン分裂変数を評価する別の方法として、fan-diagram plot を使用する方法がある [1]。以降は、特定の磁場でのゼーマンエネルギーとサイクロトロンエネルギーの比を取る評価方法によるスピン分裂変数の値を M_{ZC} 、fan-diagram plot を用いて計算されたスピン分裂変数の値を M_{fan} として区別する。今回はスピン分裂変数 M_{fan} の評価方法について解説する。

4.5.1 自由電子の場合

まず最初に自由電子の場合を考える。ゼーマン項を考慮すると、自由電子の磁場中電子状態は以下のように書くことができる。

$$E_{n,\sigma}^{\text{free}} = (n + \gamma) \hbar \omega_c + \frac{\sigma}{2} g \mu_B B \quad (4.5.1)$$

ここで、 Γ はボーア-ゾンマーフェルトの量子化条件で現れる位相項である。厳密には $\gamma = 1/2$ であるが、実際には $1/2$ からややずれることがある (例えば, [18, 27])。化学ポテンシャルを μ とする。化学ポテンシャルにランダウ準位が一致する場合を考えると、以下ようになる。

$$\begin{aligned} \mu &= (n + \gamma) \frac{e \hbar B_n}{m_c} + \frac{\sigma}{2} g \mu_B B \\ \rightarrow \frac{1}{B_n} &= \frac{1}{\mu} \left[\frac{e \hbar}{m_c} (n + \gamma) + \frac{\sigma}{2} g \mu_B \right] \end{aligned} \quad (4.5.2)$$

ここで、 B_n は n 番目のランダウ準位が化学ポテンシャルとぶつかる際の磁場の値である。この $1/B_n$ を縦軸に、ランダウ準位 n を横軸に取った図が fan-diagram plot である。

ここで, x 切片について考える. x 切片をスピンごとに x_{\pm} とすると,

$$\frac{1}{\mu} \left[\frac{e\hbar}{m_c} (x_{\sigma} + \gamma) + \frac{\sigma}{2} g\mu_B \right] = 0$$

$$\rightarrow x_{\sigma} = -\gamma - \frac{\sigma}{2} \frac{g\mu_B m_c}{e\hbar} \quad (4.5.3)$$

$$(4.5.4)$$

となる. 両辺の平均を取ると,

$$\gamma = -\frac{x_+ + x_-}{2} \quad (4.5.5)$$

となり, γ の値を得ることができる. また, 切片同士の差を取ると,

$$M_{\text{fan}} = x_- - x_+ = \frac{g\mu_B m_c}{e\hbar}$$

$$= \frac{gm_c}{2m_e} \quad (4.5.6)$$

ここで, $\mu_B = e\hbar/(2m_e)$ であることを用いた. また,

$$M_{\text{ZC}} = \frac{E_Z}{E_C} = \frac{g\mu_B B}{\hbar\omega_c} = \frac{gm_c}{2m_e} \quad (4.5.7)$$

なので, 自由電子の場合 $M_{\text{fan}} = M_{\text{ZC}}$ の関係が成立する.

4.5.2 ディラック電子の場合

同様にディラック電子の場合も考える. ディラック電子の場合のエネルギー固有値は次のようになる.

$$E_{n,\sigma}^{\text{Dirac}} = \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2} \right)} \quad (4.5.8)$$

自由電子の場合と同様に, 化学ポテンシャル μ と n 番目のランダウ準位が一致する場合を考える.

$$\mu^2 = \Delta^2 + 2\Delta\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2} \right)$$

$$\rightarrow \frac{1}{B_n} = \frac{2\Delta}{\mu^2 - \Delta^2} \frac{e\hbar}{m_c} \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2} \right) \quad (4.5.9)$$

よって, x 切片は,

$$x_{\sigma} = -\frac{1}{2}(\sigma + 1) \quad (4.5.10)$$

となる. 以上より, ディラック電子の場合の M_{fan} は次のように求められる.

$$M_{\text{fan}} = x_- - x_+ = 1 \quad (4.5.11)$$

ディラック電子の M_{ZC} は 1 であるので [11,12,63], ディラック電子の場合も $M_{\text{fan}} = M_{\text{ZC}}$ の関係が成立する.

4.5.3 拡張ディラック模型の場合

拡張ディラック模型の場合のエネルギー固有値はつぎの通りである。

$$E_{n,\sigma}^{\text{Ex-Dirac}} = \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2} \right) + \frac{\sigma}{2} g' \mu_B B} \quad (4.5.12)$$

ここで、 g' は追加 g 因子である。両辺二乗して整理する。いままでと同様に、化学ポテンシャル μ とランダウ準位 n のバンドがぶつかる場合を考えると、 x 切片を用いて、

$$\begin{aligned} \left(\mu - \frac{\sigma}{2} g' \mu_B B \right)^2 &= \Delta^2 + 2\Delta\hbar\omega_c \left(x_\sigma + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2} \right) \\ \rightarrow x_\sigma &= \left[\left(\mu - \frac{\sigma}{2} g' \mu_B B \right)^2 - \Delta^2 \right] \frac{1}{\Delta\hbar\omega_c} + \frac{\sigma}{2} + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (4.5.13)$$

と表せる。 M_{fan} は、

$$\begin{aligned} M_{\text{fan}} &= x_- - x_+ = 1 + \frac{\mu g' \mu_B B}{\Delta\hbar\omega_c} \\ &= 1 + \frac{\mu g' m_c}{2\Delta m_e} \end{aligned} \quad (4.5.14)$$

となり、 M_{fan} は化学ポテンシャルに依存する。一方で、 M_{ZC} については、

$$M_{ZC} = \frac{E_{n,+}^{\text{Dirac}} - E_{n,-}^{\text{Dirac}} + g' \mu_B B}{E_{n,+}^{\text{Dirac}} - E_{n-1,+}^{\text{Dirac}}} = 1 + \frac{g' \mu_B B}{E_{n,+}^{\text{Dirac}} - E_{n-1,+}^{\text{Dirac}}} \quad (4.5.15)$$

であり、 M_{ZC} は磁場に依存することが分かる。以上のように、拡張ディラック模型の場合は M_{fan} と M_{ZC} は一致しない。しかし式 (4.5.16) について化学ポテンシャル弱極限 $\mu \simeq \Delta$ をとると、

$$M_{\text{fan}} \simeq 1 + \frac{g' m_c}{2m_e} \quad (4.5.16)$$

となる。また、 M_{ZC} については弱磁場極限をとると、

$$\begin{aligned} E_{n,+}^{\text{Dirac}} &= \Delta \left[1 + \frac{2\hbar\omega_c}{\Delta} \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2} \right) \right]^{1/2} \\ &\simeq \Delta + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2} \right) \end{aligned}$$

であるから、

$$M_{ZC} \simeq 1 + \frac{g' \mu_B}{\hbar\omega_c} = 1 + \frac{g' m_c}{2m}$$

となる。よって、拡張ディラック模型の場合は、 M_{ZC} の弱磁場極限と M_{fan} の弱化学ポテンシャル極限を取った場合のみ $M_{\text{fan}} = M_{ZC}$ の関係が成立する。

第 5 章

磁場中電子状態の非摂動理論

グリーン関数と磁場中電子状態を合わせることで、多くの物理量を計算可能となる。しかし、前章でも見てきたように磁場中電子状態を精緻に計算することには困難があった。Luttinger-Kohn の理論を用いることで結晶中でも磁場中効果を厳密に導入できる [6]。しかし、その複雑さから自由電子や 2 バンドディラック模型等、非常に簡単な場合でしか磁場中の電子状態を計算することが出来なかった。現在まで多くの研究では、磁場中電子状態の解析にポーア-ゾンマーフェルトの量子化条件等の半古典的理論が使われている [46]。しかしこの枠組みでは、スタートの第一原理計算が「量子論」でありゴールの量子振動も「量子論」であるのに対して、間に挟むポーア-ゾンマーフェルトの量子化条件は「半古典論」である。実際、Bi における異常な g 因子の説明をこの枠組みでは出来なかった。この問題は、量子論である $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論と多バンド効果を加える摂動論を用いることで解決された [10]。今回、我々は新たに π -matrix と呼ぶ手法を開発した [23]。 π -matrix 法は行列力学の手法に習うことで、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論の枠組みで厳密に多バンドの磁場中電子状態の計算を可能とする手法である。この手法を用いることでスタートからゴールまで、全て量子論の枠組みで説明可能である。今章ではこの π -matrix 法の解説を行う。

5.1 独自の手法, π -matrix

磁場と並行な方向を z 方向と定義する。ハミルトニアンでは $\hbar\mathbf{k} \rightarrow \boldsymbol{\pi}$ の変換が行われる。この力学的運動量 $\boldsymbol{\pi}$ がもつ関係式 (2.1.4) について考える。この式は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned}
 [\pi_x, \pi_y] &= (\pi_x \pi_y - \pi_y \pi_x) \\
 &= (\pi_x + i\pi_y)(\pi_x - i\pi_y) - (\pi_x - i\pi_y)(\pi_x + i\pi_y) \\
 &= \pi_+ \pi_- - \pi_- \pi_+
 \end{aligned} \tag{5.1.1}$$

ここで、 $\pi_{\pm} = (\pi_x \pm i\pi_y)/\sqrt{2}$ である。また、 $\pi_x = (\pi_+ + \pi_-)/\sqrt{2}$ 、 $\pi_y = (\pi_+ - \pi_-)/\sqrt{2}i$ である。 π_{\pm} は次のような性質を持つ。

$$\pi_+ |n\rangle = \sqrt{e\hbar B (n+1)} |n+1\rangle \quad (5.1.2)$$

$$\pi_- |n\rangle = \sqrt{e\hbar B (n)} |n-1\rangle \quad (5.1.3)$$

ここで、 $|n\rangle$ はランダウ準位 n 番目の固有関数である。この関係を用いて改めて式 (5.1.1) を計算すると次のようになる。

$$\begin{aligned} [\pi_x, \pi_y] |n\rangle &= i(\pi_+\pi_- - \pi_-\pi_+) |n\rangle \\ &= i\left(\pi_+\sqrt{e\hbar B (n)} |n-1\rangle - \pi_-\sqrt{e\hbar B (n+1)} |n+1\rangle\right) \\ &= i[e\hbar B (n) - 2e\hbar B (n+1)] |n\rangle \\ &= -i\hbar eB |n\rangle \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

結果は式 (2.1.4) と一致した。式 (5.1.2) の関係式と行列力学の手法に習い、力学的運動量 π_{\pm} を行列表示すると、

$$\pi_+ = \sqrt{e\hbar B} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \quad (5.1.5)$$

$$\pi_- = \sqrt{e\hbar B} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \quad (5.1.6)$$

となる。見てわかるように、 π -matrix 法ではベクトルポテンシャルがあらわに現れてこない。そのため、ゲージ不変性を保ったまま議論できる。これは Löwdin partitioning を用いた手法でも同様である。また、Löwdin partitioning を使用した手法が磁場の一次で止めることに該当していたのに対して、 π -matrix は磁場を無限次まで取ることが可能である。

5.2 π -matrix の応用例 -自由電子の場合-

自由電子の場合を考える。自由電子の場合は磁場中の電子状態は式 (2.1.12) のようになる。 π -matrix を使用して解いた場合はどうなるか見てみる。 $k_z = 0$ とすると出発のハミルトニアンは次のような形である。

$$H = \frac{\pi^2}{2m_e} = \frac{1}{2m_e} (\pi_x\pi_x + \pi_y\pi_y)$$

ここで,

$$\begin{aligned}\pi_x \cdot \pi_x &= \frac{(\pi_+ + \pi_-)(\pi_+ + \pi_-)}{2} \\ &= \frac{\pi_+ \pi_+ + \pi_+ \pi_- + \pi_- \pi_+ + \pi_- \pi_-}{2} \\ \pi_y \cdot \pi_y &= \frac{-(\pi_+ - \pi_-)(\pi_+ - \pi_-)}{2} \\ &= \frac{-(\pi_+ \pi_+ - \pi_+ \pi_- - \pi_- \pi_+ + \pi_- \pi_-)}{2}\end{aligned}$$

であるので, 最終的に次のように書ける.

$$H = \frac{1}{2m_e} (\pi_+ \pi_- + \pi_- \pi_+) \quad (5.2.1)$$

π_+ および π_- を行列として計算すると, $\pi_+ \pi_-$ および $\pi_- \pi_+$ はそれぞれ,

$$\pi_+ \pi_- = e\hbar B \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \quad (5.2.2)$$

$$\pi_- \pi_+ = e\hbar B \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}. \quad (5.2.3)$$

と書け, ハミルトニアンは自動的に対角化される.

$$H = \frac{\hbar\omega_c}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (5.2.4)$$

π -matrix を使用して解いても式 (2.1.12) と同じ形になる. 実際の計算時には, π -matrix の行列サイズを有限に限る必要がある. 例えば π -matrix の基底数を 4 とした場合, π_{\pm} は 4×4 行列で書くことが出来, 結果としてハミルトニアンは次のような形になる.

$$H = \frac{\hbar\omega_c}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}. \quad (5.2.5)$$

式 (5.2.4) と比較すると, 行列 (4,4) 成分の値が 7 であるべきところが 3 に変わっている. これはランダウ準位を有限にした影響である. 本論文では, 準位を有限にしたことで値が変わってしまう準位をゴースト準位と呼ぶ. そのため, π -matrix を使用した計算を行うためには十分なランダウ準位を基底として取る必要がある.

5.3 π -matrix の応用例 -ディラック電子の場合-

2バンドのディラック模型は以下のような形である [12, 63].

$$H_{\text{Dirac}} = \begin{bmatrix} \Delta & i\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \gamma \\ -i\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \gamma & -\Delta \end{bmatrix} \quad (5.3.1)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} &= \begin{bmatrix} \hbar k_z & \pi_x - i\pi_y \\ \pi_x + i\pi_y & -\hbar k_z \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \hbar k_z & \sqrt{2}\pi_- \\ \sqrt{2}\pi_+ & -\hbar k_z \end{bmatrix} \end{aligned}$$

であり, 2Δ はバンドギャップを示し, γ は電子の速度である. これに式 (5.1.5) および式 (5.1.6) を代入する. 先程までと同様に $k_z = 0$, ランダウ準位数4とすると, $\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ は次のように書ける.

$$\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{e\hbar B} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2e\hbar B} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3e\hbar B} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{e\hbar B} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2e\hbar B} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3e\hbar B} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.3.2)$$

これを踏まえて式 (5.3.1) を解くと, 固有値は次のようになる.

$$E_n = \pm\Delta, \pm\sqrt{\Delta^2 + e\hbar B\gamma^2}, \pm\sqrt{\Delta^2 + 2e\hbar B\gamma^2}, \pm\sqrt{\Delta^2 + 3e\hbar B\gamma^2} \quad (5.3.3)$$

これは式 (4.1.8) と一致する. 以上のように, 手で解ける範囲の模型に π -matrix を適用し, その結果を比較することで π -matrix の正当性が示された.

5.4 π -matrix の応用例 -多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型の場合-

スピン軌道結合を考慮したハミルトニアンから出発する.

$$H = \frac{p^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_e^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p} \quad (5.4.1)$$

この式は一般的なシュレディンガー方程式であり, 特殊なことは何も仮定していない. \mathbf{p} は運動量演算子, m_e は電子質量, $V(\mathbf{r})$ は周期ポテンシャル, \hbar はディラック定数, $\boldsymbol{\sigma}$ はパウリ行列である, Luttinger-Kohn の理論を用いることで, ハミルトニアンは次の形に書ける.

$$\sum_{n'} \left[\left(E_l + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \right) \delta_{ln'} \delta_{\sigma\sigma'} + \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{l'l}^{\sigma\sigma'} \right] c_{l'\sigma'}(\mathbf{k}) = E c_{l\sigma}(\mathbf{k}) \quad (5.4.2)$$

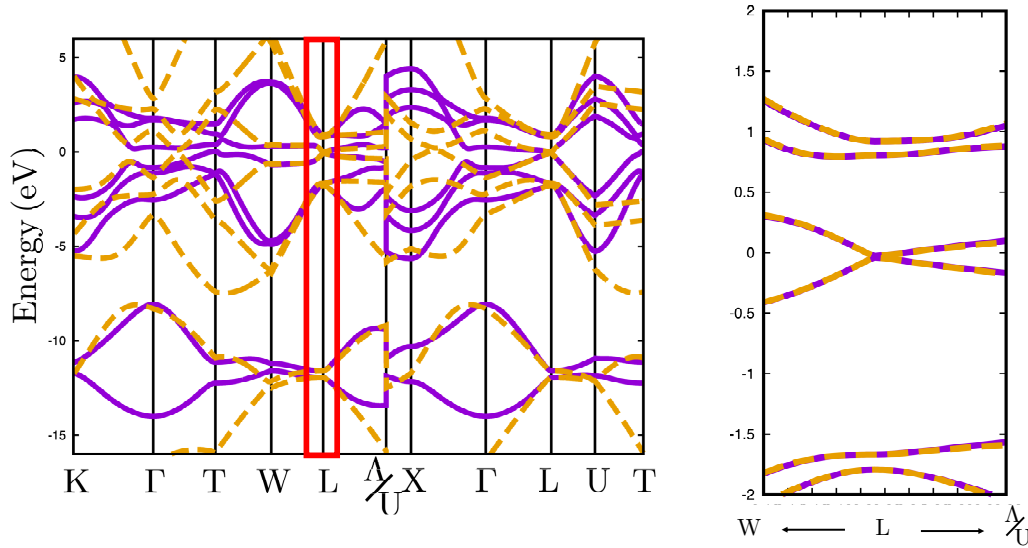


図 5.4.1 Liu と Allen による強束縛模型 [76] の電子状態と L 点周辺で作成した $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型の電子状態の比較. 右図は左図を拡大したものである. 実践が強束縛模型の計算結果, 点線が $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型の計算結果である. 高々 16 バンドしか取っていないが, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型を作成した L 点周辺では非常に良い一致を見せていることがわかる.

ここで,

$$v_{ll'}^{\sigma\sigma'} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int_{cell} d\mathbf{r} c_{l\sigma}^*(\mathbf{r}) \left[\mathbf{p}m_e + \frac{\hbar}{4m_e^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r}) \right] c_{l'\sigma'}(\mathbf{r})$$

であり, E_n は対称点 $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ における l 番目のエネルギー固有値である, Ω は単位胞の体積である. 式 (5.4.2) は基底を無限にとれば厳密な方程式である. 半導体等の波数空間の狭い範囲での性質が支配的な物質では, 少ない基底でも十分である. 例えば, Bi の場合に強束縛模型と $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型の分散を比較した結果 (図 5.4.1) は, 狭い範囲で十分に一致している. L バンド模型の場合, ハミルトニアンは次のような $2L \times 2L$ の行列で書ける.

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \begin{bmatrix} E_0 & 0 & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{01}^{\uparrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{01}^{\uparrow\downarrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{02}^{\uparrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{02}^{\uparrow\downarrow} & \cdots \\ 0 & E_0 & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{01}^{\downarrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{01}^{\downarrow\downarrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{02}^{\downarrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{02}^{\downarrow\downarrow} & \cdots \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{10}^{\uparrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{10}^{\uparrow\downarrow} & E_1 & 0 & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12}^{\uparrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12}^{\uparrow\downarrow} & \cdots \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{10}^{\downarrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{10}^{\downarrow\downarrow} & 0 & E_1 & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12}^{\downarrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12}^{\downarrow\downarrow} & \cdots \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{20}^{\uparrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{20}^{\uparrow\downarrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{21}^{\uparrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{21}^{\uparrow\downarrow} & E_2 & 0 & \cdots \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{20}^{\downarrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{20}^{\downarrow\downarrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{21}^{\downarrow\uparrow} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{21}^{\downarrow\downarrow} & 0 & E_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (5.4.3)$$

多くの場合, スピン軌道結合効果は摂動として入れられるが [71], 式 (5.4.3) では基底にスピン軌道結合が含まれている. そのためスピン軌道結合効果を厳密に導入することが出来る. また, 一般にスピン軌道結合効果が強い物質では, 式 (5.4.3) の第一項目 (自由電子項) は無視できる. 図 5.4.2 に Bi における $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型での自由電子項の有無による変化

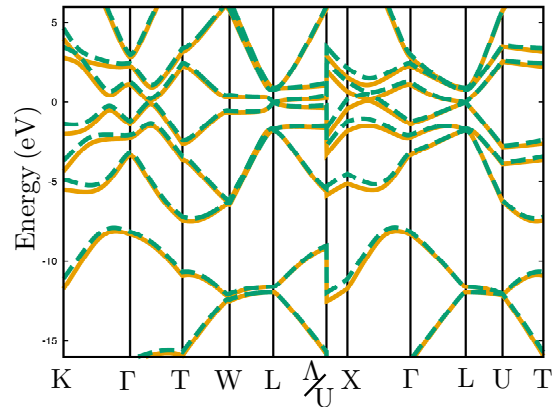


図 5.4.2 Liu と Allen による強束縛模型 [76] の電子状態から L 点周辺で作成した $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型における，式 (5.4.3) の第一項目の有無による変化．実線が第一項目を抜いた場合．点線が第一項目を入れた場合．多少の変化はあるものの，L 点周辺では大きな変化はないことが分かる．

を示す．自由電子項の有無による変化はほとんどないことが分かる．PbTe および Bi の計算ではこの自由電子項を無視する．この多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型に磁場中効果を導入する．Luttinger-Kohn の理論により， $\hbar\mathbf{k}$ を力学的運動量 $\boldsymbol{\pi}$ で書き換えれば良い．この $\boldsymbol{\pi}$ に行列表示を代入することで，単に数学的に対角化するだけでエネルギー固有値を計算することが可能となる ($\boldsymbol{\pi}$ -matrix 法)．

第 6 章

ディラック電子系物質におけるスピン分裂変数の非摂動理論

π -matrix 法を使用して、ディラック電子系物質における磁場中電子状態の計算を行う。PbTe および Bi における磁場中電子状態について計算し、スピン分裂変数の実験結果との比較を行う。

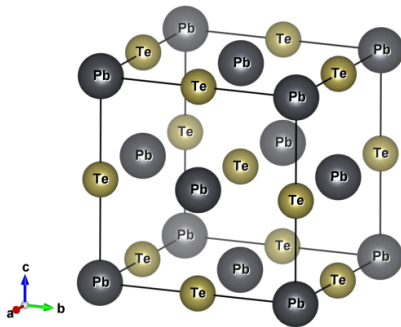


図 6.1.1 PbTe の結晶構造. VESTA により作成した [77].

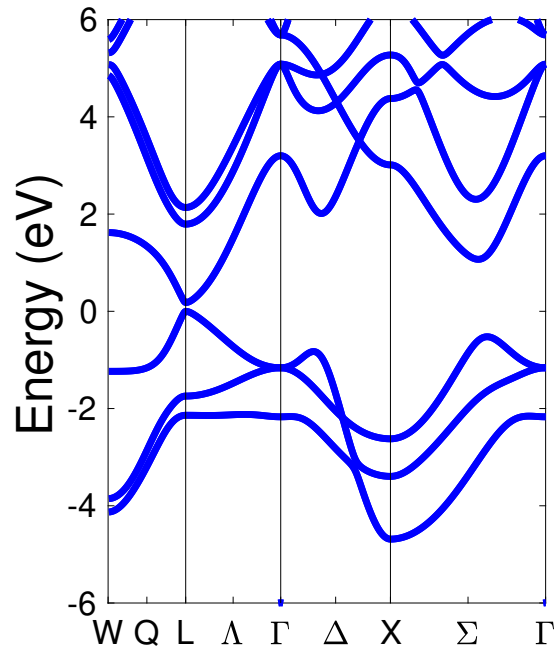


図 6.1.2 Lent らの強束縛模型による PbTe のバンド分散 [78]. L 点にバンドギャップを持つことが分かる.

6.1 PbTe における異常なゼーマン効果

PbTe は NaCl 型の非常に単純な結晶構造を持つ (図 6.1.1). L 点に直接遷移のバンドギャップを持つ (図 6.1). トポロジカル物質や熱電物質として注目を集めている [79–83]. 本章では Lnet らによる強束縛模型 [78] 並びに Lach-hab らによる強束縛模型 [84] の二つを使って議論する. PbTe における量子振動測定では, スピン分裂変数の値は 0.52 であった [18]. この実験は 55T まで磁場をかけている. 一方で, 1 バンドに対して Löwdin partitioning により多バンド効果を加えた手法では, スピン分裂変数は磁場に対して一定であり, 0.83 [14] である. このように本研究以前では既存の実験と理論の間に大きな差があった. π -matrix 法を使用して, 磁場中の電子状態をより精緻に計算を行うことでこの問題に取り組む.

6.1.1 Lent 模型

Lent らによる模型はアニオンとカチオンそれぞれの s,p,d 軌道にスピンの up と down を含めた 36×36 行列で構成される. ホッピングは第一近接のみで形成されている. L 点におけるバンドギャップは 0.182eV と実験の値 0.18eV [85] とよく一致している. Lent らの模型では, パラメータを変えるだけで 6 種類の物質 (PbTe, PbSe, PbS, SnTe, GeTe 二種類) の電子状態をパラメータを変えるだけで計算可能である. PbTe だけでなく SnTe にも π -matrix 法を適用する. π -matrix の基底として, ランダウ準位を 41 状態 ($n=0..40$) とする場合を考える. この場合, s,p 軌道の 16 バンドのみを取ると, 656×656 の行列を数値的に解くことになる. 結果は図 6.1.3 のようになる. 自由電子の場合でも述べているように π -matrix 法でランダウ準位を有限に取ることで, 物理的に意味のない固有値が現れる. これを我々はゴースト準位と呼ぶ. このゴースト準位は π -matrix の基底数を変えて, 計算結果を比較することにより容易に取り除くことが出来る. 図 6.1.3 ではランダウ準位数が 41 状態の場合と 120 状態の場合を比較している. これを見れば明らかに分かるように, ランダウ準位数 41 の計算結果の 50T で下から 4 番目のバンドが基底数の変化により動いている. また π -matrix 法でランダウ準位を有限に取ることで高いランダウ準位では計算精度が落ちている. π -matrix 法の結果だけではランダウ準位の指標を決定することができない. そこで Löwdin partitioning の結果を参照する. スピン分裂変数は図 6.1.4 に示すようにスピン分裂変数が 1 を超えるかでランダウ準位の入れ替えの有無を確認できる. Löwdin partitioning を使用した方法はゼロ磁場極限を取ることに該当する. Lent 模型での Löwdin partitioning を使用した計算結果では, スピン分裂変数 M_{ZC} が 0.80 である [14] (自由電子項を入れると $M_{ZC} = 0.83$ となる). よって, PbTe のランダウ指標は素直に下から取れば良いことが分かる. このことから, ゼーマンエネルギー $E_Z = E_{n,+} - E_{n,-}$ 並びにサイクロトロンエネルギー $E_C = E_{n,+} - E_{n-1,+}$ が計算でき, 図 6.1.5 左のようになる. 図 6.1.5 から,

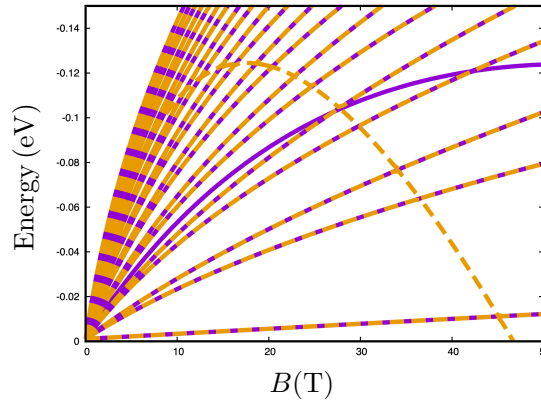


図 6.1.3 PbTe のランダウ準位の図. s,p 軌道の 16×16 行列の各項にある π に π -matrix 法を適用した. ランダウ準位を 0 から 40 までとった場合 (紫, 実線) と 0 から 120 まで取った場合 (黄色, 点線) を重ねている. ランダウ準位は 20 本分出力している.

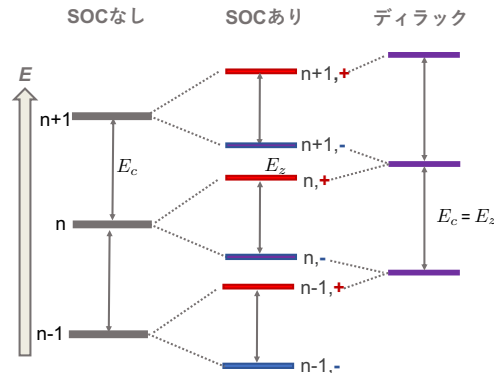


図 6.1.4 ランダウ準位の模式図. スピン軌道結合効果がない場合, 磁場中ではエネルギー準位はランダウ準位に分裂する. このランダウ準位がスピン軌道結合効果によりプラスとマイナスの二つの準位に分裂する. ディラック電子系では, プラスの準位がひとつ上の量子数のマイナスの準位と縮退する特殊な状態となる.

ゼーマンエネルギーおよびサイクロトロンエネルギーが磁場に対して依存していることが分かる. スピン分裂変数 M_{ZC} についても考える. 完全なディラック電子の場合, スピン分裂変数が 1 となる必要がある. $E_Z = E_{n,+} - E_{n,-}$ に対応するのは, 図 6.1.4 から $E_C = E_{n+1,-} - E_{n,-}$ および $E_C = E_{n,+} - E_{n-1,+}$ であることが分かる. 本研究では, スピン分裂変数 M_{ZC} は次の表式で計算する.

$$M_{ZC} = \frac{E_Z}{E_C} = \frac{E_{n,+} - E_{n,-}}{E_{n,+} - E_{n-1,+}} \quad (6.1.1)$$

計算結果を図 6.1.5 に示す. π -matrix を使用した計算結果では図 6.1.5 に示されたようにスピン分裂変数が磁場に対して大きく依存することが分かった. 現在までの研究では, ゼーマンエネルギーが磁場の一次, サイクロトロンエネルギーが磁場の一次であることが

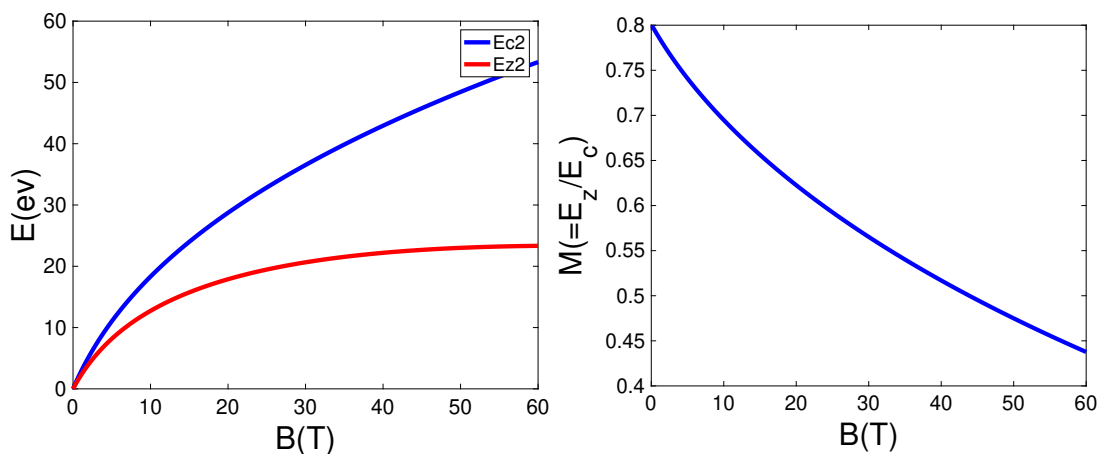


図 6.1.5 (左) π -matrix 法によるゼーマンエネルギーおよびサイクロトロンエネルギーの計算結果. (右) は (左) の結果を使用して計算したスピン分裂変数 M_{ZC} の結果. 磁場に大きく依存していることが分かる.

ら, その比をとるスピン分裂変数は磁場に対して定数であると考えられていた [10,14,17]. これは, 弱磁場極限を仮定しているためである. 実際 π -matrix の計算結果でも, 磁場が小さい場合には図 6.1.5(左) に示されているように, ゼーマンエネルギーおよびサイクロトロンエネルギーが磁場に対して線形な立ち上がりを見せている. ゼロ磁場付近を考えると, 先行研究の理論値と同じくスピン分裂変数が 0.80 を取るのに対して, 40T 周辺では実験値である 0.53 付近まで減少することがわかった. 以上の結果から, π -matrix 法を使用したことにより今まで存在した実験と理論の不一致を解消することが出来た.

π -matrix 法を使用した計算方法は厳密であるが, それゆえに解析性が失われている. π -matrix 法による計算結果を解析するために有効模型を使用して, 比較を行う. 図 6.1.3 をみると, PbTe の磁場中エネルギー準位は磁場の \sqrt{B} に近い形をしていることが分かる. このことから, ディラック電子的な模型を使用すると良いことが分かる. ディラック模型の特徴の一つに最低ランダウ準位が磁場に依存しないことが挙げられる. しかし図 6.1.3 に示された π -matrix 法により計算された電子状態の最低ランダウ準位は磁場の一次に比例しているようにみえる. そのことから, ディラック模型に対して多バンドの補正を加えた拡張ディラック模型を使用する. 式 (4.1.13) から拡張ディラックの最低ランダウ準位の傾きが additional g 因子 g' により決定されていることが分かる. 先行研究では, この additional g 因子は実験結果と合うように現象論的な決定がなされてきた [13,33,86]. しかし, π -matrix 法を使用したことで, 最低ランダウ準位の傾きから, 始めて微視的に additional g 因子を決定することが出来る. その結果, $g' = -10.4$ と定められる. 拡張ディラック模型での計算結果と π -matrix の計算結果を比較した結果は図 6.1.6 に示す. 図 6.1.6 に示されるように, 60T 付近までは π -matrix と拡張ディラック模型の計算結果はよく一致しているようにみえる. 同様に, ゼーマンエネルギーおよびサイクロトロンエネルギーについても議論する. 図 6.1.7 に示されたようにゼーマンエネルギー

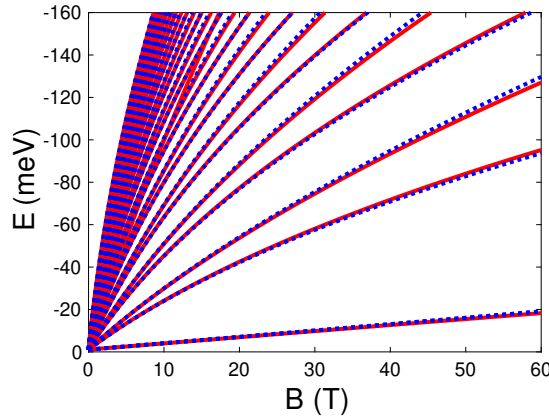


図 6.1.6 π -matrix 法による磁場中エネルギー準位 (赤実線) と拡張ディラック模型による磁場中エネルギー準位 (青点線) の比較. π -matrix 法による厳密な計算の結果, 初めて理論の枠組みで additional g-factor を決定することが出来た.

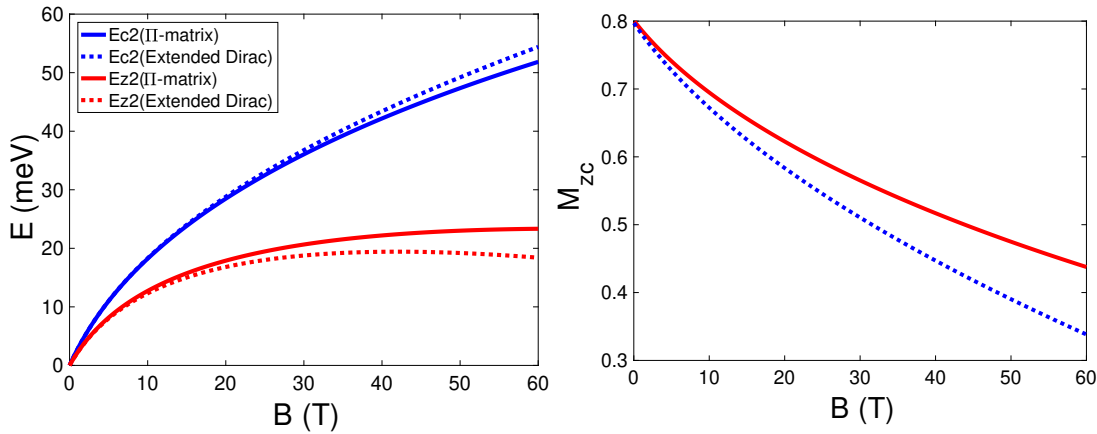


図 6.1.7 π -matrix 法による計算結果 (実線) と拡張ディラック模型による計算結果 (点線) の比較. (左) ゼーマンエネルギーおよびサイクロトロンエネルギーの計算結果. (右) は (左) の結果を使用して計算したスピン分裂変数 M_{ZC} の結果. 磁場が大きくなるにつれて, 差が大きくなっている.

ギーとサイクロトロンエネルギーは磁場が強くなることで, π -matrix 法と拡張ディラック模型の結果に差が大きくあらわれている. これは, π -matrix 法で含まれている高次の磁場の項が効いている証しである. スピン分裂変数の磁場依存性については, 拡張ディラックから十分に理解できる. 拡張ディラック模型でのスピン分裂変数は式 (4.5.15) のように表されることから, 追加 g 因子 g' の符号により, 増減が決まっていることが分かる. PbTe のように $g' < 0$ の場合は, スピン分裂変数は 1 よりも小さくなり磁場に対して減少する関数となる. 一方で $g' > 0$ の場合は, スピン分裂変数は 1 を超えて磁場に対して増加する関数となる. このことを確かめるために, PbTe の Pb を Sn で置換する. $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ は $x = 0.4$ 付近でバンドが伝導帯と価電子帯のバンドが反転することが知られている [85, 87](図 6.1.8). このバンドの反転に伴い, スピン分裂変数もバンド反転前

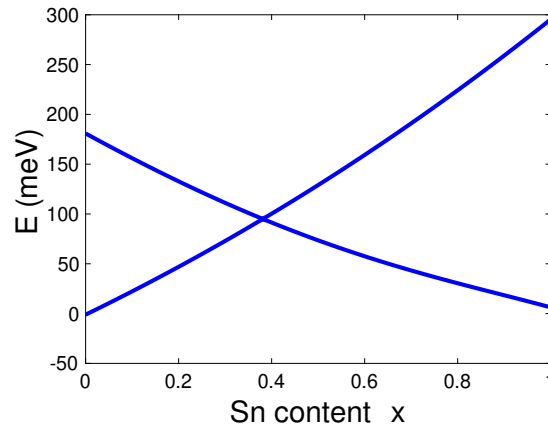


図 6.1.8 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ の x によるギャップの変化. $x = 0.38$ 付近でギャップが閉じ, バンドが反転することが分かる.

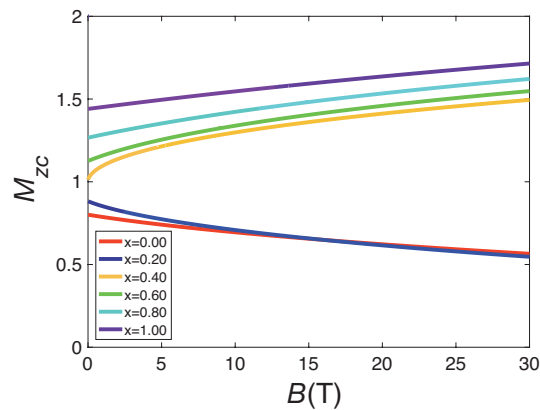


図 6.1.9 π -matrix 法により計算された $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ における x ごとのスピン分裂変数の磁場依存性.

では 1 より小さく, バンド反転後は 1 より大きくなることが分かっている [14]. 以上のことから, バンド反転前では, スピン分裂変数が 1 以下なので, 追加 g 因子が負となり, スピン分裂変数は減少関数となることが予想される. 一方でバンド反転後はスピン分裂変数が 1 以上であることから additional g 因子が正となり, スピン分裂変数は増加関数となることが予想される. Lent による強束縛模型の PbTe と SnTe のパラメータを用いて仮想結晶近似により $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ の模型を作成し, π -matrix 法を使用することでスピン分裂変数の変化を確認する. 結果は図 6.1.9 の通りである. 図 6.1.9 に示すように Sn の含有率 x を変えてスピン分裂変数の磁場依存性の変化をみると, バンド反転が起こる前後で磁場に対する増減が変わっていることが分かる. バンド反転前は最低ランダウ準位の傾きが負であり, スピン分裂変数が磁場に対して減少する. 一方で, バンド反転後は最低ランダウ準位の傾きが正であり, スピン分裂変数が磁場に対して増加する. これはまさに拡張ディラック模型から予想される結果と同様である.

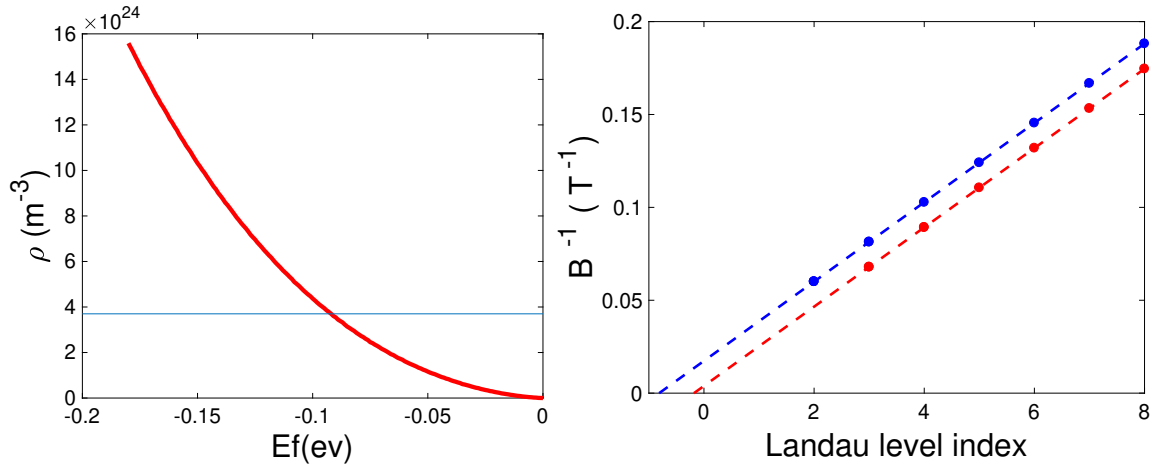


図 6.1.10 (左)Lenz 模型におけるホール密度と化学ポテンシャルの関係。青い線が実験値のホール密度 $3.7 \times 10^{24} \text{m}^{-3}$ である。(右) 左の結果から決定した化学ポテンシャル ($\mu = 92 \text{meV}$) を使用した fan-diagram plot の結果。

スピン分裂変数のもう一つの評価法として、fan diagram plot を使用したものについても考える。化学ポテンシャルを設定し、そのエネルギーにランダウ準位がかかった時の $1/B$ の値を記録していく。まず、化学ポテンシャルの決定方法について考える、実験との比較を行うためにホール密度を考える。実験では、 $3.7 \times 10^{24} \text{m}^{-3}$ がホール密度として与えられている [18]。そこで、化学ポテンシャルを変えることでホール密度がどのように変化するかを確認した (図 6.1.10(左))。Lenz 模型を使用した計算では、価電子帯の頂点から 92meV 離れたところに化学ポテンシャルを設定することでホール密度が実験値と一致することが分かった。化学ポテンシャル -92meV で計算した fan diagram plot は図 6.1.10(右) のようになる。図 6.1.10(右) では、ランダウ準位 $n = 1, 2$ のプロットがかけられている。これは計算した範囲の磁場内では化学ポテンシャルとの交差が起きなかったためである。より低い準位ほど同じエネルギーに達するまでには強い磁場が必要となる。これは実験でも同様である。最小二乗法により、プラスとマイナスそれぞれを直線に近似し、 x 切片を計算する。式 (4.5.3) に示したように、 x 切片からスピン分裂変数の計算を行う。今回の場合、 $M_{\text{fan}} = |x_+ - x_-| = 0.63$ であった。また $\gamma = -(x_- + x_+)/2 = 0.50$ であり、ゾンマーフェルトの位相係数と一致している。次に化学ポテンシャルの変化によるスピン分裂変数 M_{fan} の変化を調べた。図 6.1.11 に示すように、化学ポテンシャルを変えていくことでスピン分裂変数もそれに比例した形で変化していくことが分かった。スピン分裂変数の二つの評価方法 M_{ZC} と M_{fan} は同じだと信じられていた。しかし M_{ZC} が磁場に依存するのに対し M_{fan} が化学ポテンシャルに依存することから、この二つは一般的に一致しない。ただし、 μ のゼロ極限を考えると M_{fan} は丁度 0.80 程度とゼロ磁場での M_{ZC} と一致する。

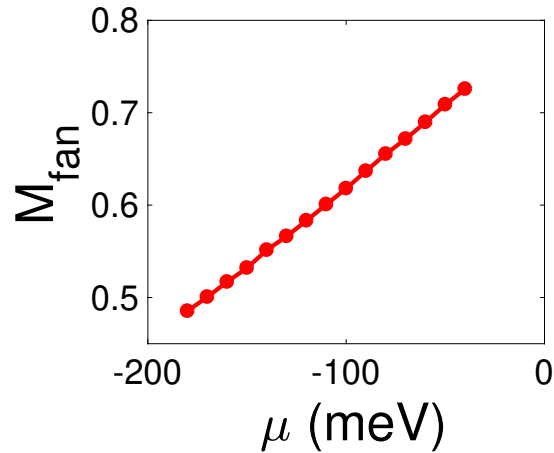


図 6.1.11 スピン分裂変数 M_{fan} の化学ポテンシャル μ 依存性

6.1.2 Lach-hab 模型

Lach-hab 模型は線形化補強平面波法 (LAPW) を用いた第一原理計算から PbTe の電子状態の計算を行なっている [84]。第一原理計算で得たバンド構造における L 点のバンドギャップは 0.64eV である。一方で実験で観測されるバンドギャップ 0.18eV [85] と、二つの間には大きく差があった。Lach-hab らは第一原理計算のバンド計算結果を使用して s,p 軌道のみを使用した強束縛模型を作成した。この模型のパラメータを変化させることで、L 点でのバンドギャップを変化させ 0.19eV としている。ゼロ磁場での電子状態は図 6.1.12 の通りである。L 点直接遷移のバンドギャップを持っている。Lach-hab 模型の電子状態 (図 6.1.12) と Lent 模型の電子状態 (図 6.1) を比較すると、X - Γ 間にある Σ 点と呼ばれる位置でのピークにやや違いがあることが分かる。Lent 模型では L 点価電子帯のピークに対して Σ 点価電子帯のピークは低い位置にあるが、Lach-hab 模型では L 点価電子帯のピークと Σ 点価電子帯のピークはほとんど同じ位置にある。Lach-hab 模型に π -matrix 法を使用して計算した結果が図 6.1.13 である。図 6.1.13 にあるように、最低ランダウ準位が線形に立ち上がっていることが分かる。Lent の場合と同じように、ランダウ準位の指標を決定する。この結果を用いてゼーマンエネルギーとサイクロトロンエネルギーおよびその比であるスピン分裂変数を計算した結果が図 6.1.14 である。図 6.1.14(左) をみると、ゼーマンエネルギー並びにサイクロトロンエネルギーが $B = 2\text{T}$ 程度までの弱磁場では磁場に対して線形な立ち上がりを見せているが、強磁場では磁場の高次の項が効いていることが分かる。図 6.1.14(右) に示されたように、スピン分裂変数が磁場に対して大きく依存していることが分かる。ゼロ磁場付近ではスピン分裂変数が 0.7 程度であるのに対して、15T 程度で 0.5 を下回っている。最後に図 6.1.15 に fan-diagram plot を示す。ホール密度が実験値に近い $3.5 \times 10^{24}\text{m}^{-3}$ となる化学ポテンシャル $\mu = -74\text{meV}$ として計算を行った。この結果 $M_{fan} = |x_+ - x_-| = 0.40$ である。

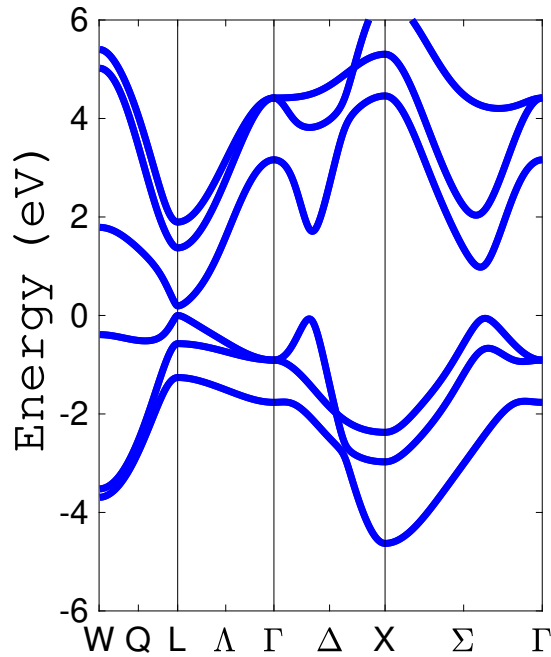


図 6.1.12 (a) Lach-hab らによる PbTe に対する強束縛模型 [84] の電子状態

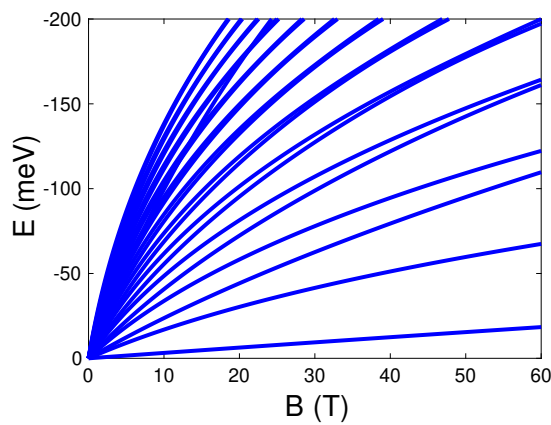


図 6.1.13 Lach-hab 模型におけるランダウ準位の図. s, p 軌道の 16×16 行列の各項にある π に π -matrix 法を適用した. 基底のランダウ準位数は 0 から 40 までの 41 個とした.

6.1.3 PbTe のまとめ

今まで見てきたように Lent 模型と Lach-hab 模型の計算結果に大きな差はないが、やや違いが見られている箇所がある。まず、ゼーマンエネルギーおよびサイクロトロンエネルギーについて比較を行う。Lent 模型 [図 6.1.5(左)] の場合、ゼーマンエネルギーおよびサイクロトロンエネルギーは磁場に対して増加する傾向が見られる。一方 Lach-hab 模型 [図 6.1.14(左)] では 10T 付近までは磁場に対して増加する様子が見られるが、それ

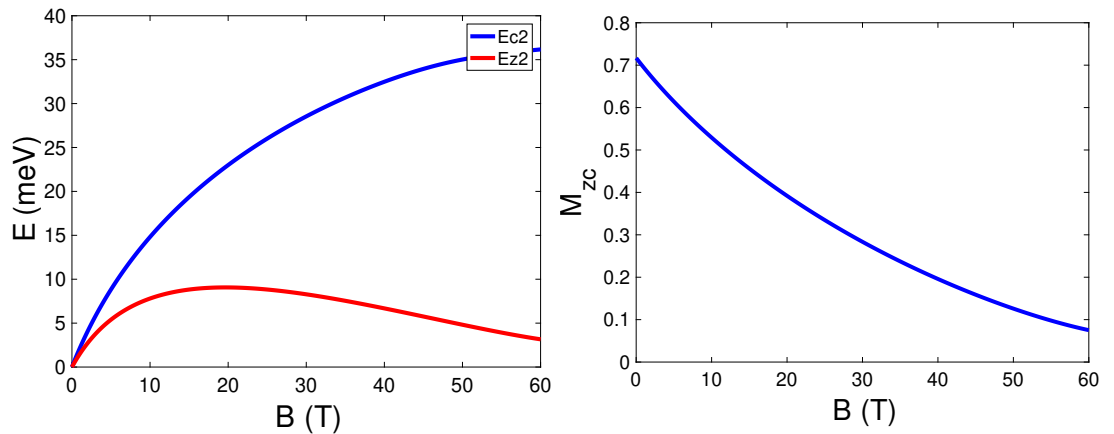


図 6.1.14 (左) π -matrix 法によるゼーマンエネルギーおよびサイクロトロンエネルギーの計算結果. (右) は (左) の結果を使用して計算したスピン分裂変数 M_{ZC} の結果. Lent 模型の場合と同じく磁場に大きく依存していることが分かる.

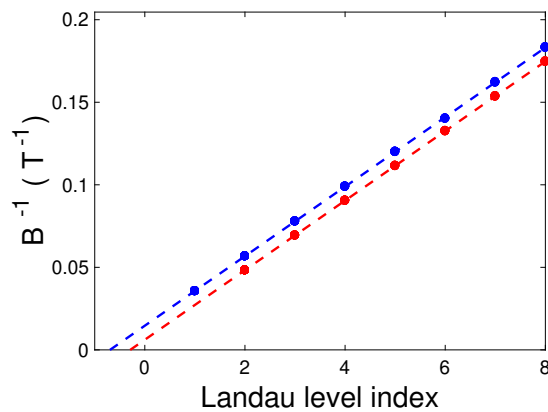


図 6.1.15 Lach-hab 模型での化学ポテンシャル ($\mu = 74\text{meV}$) を使用した fan-diagram plot の結果.

以降は磁場に対して減少していく振る舞いが確認できる. また, この結果を反映してスピン分裂変数にも違いが現れている. 図 6.1.5(右) に示されるように Lent 模型でのスピン分裂変数 M_{ZC} は, ゼロ磁場付近では 0.80 であるのに対して, 55T では 0.46 まで減少している. 一方で図 6.1.14(右) に示す Lach-hab 模型におけるスピン分裂変数 M_{ZC} は, ゼロ磁場付近で 0.72 であるのに対して, 55T では 0.098 まで減少する. Lent 模型におけるスピン分裂変数の減少幅は $0\text{-}55\text{T}$ の間で 42.5% であるのに対して, Lach-hab 模型では 86.4% と二つの間に大きな差がある. M_{fan} については, Lent 模型の場合が 0.63 であるのに対して Lach-hab 模型は 0.40 である. また, 実験結果 [18] から我々が計算した結果は $M_{\text{fan}} = 0.56$ であった. 同じ PbTe の計算を行っていてもこのように違いが出る. Lent 模型と Lach-hab 模型の最大の違いはそのバンド数である. Lent 模型では Lach-hab 模型では含まれていない d 軌道の寄与も含まれている. これらのバンドは L 点のバンドギャップからは 1eV 以上離れたところに存在するが, 実はスピン分裂変数に大

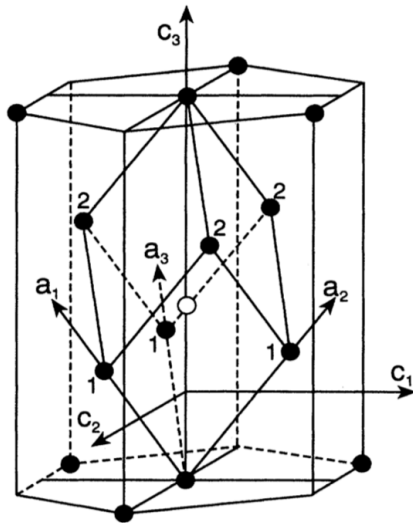


図 6.2.1 Bi の結晶構造 [76]. ラベル 1, 2 は第一近接と第二近接の原子位置, C_1 が Bisectrix, C_2 が Binary, C_3 が Trigonal 方向を示す. (a_1, a_2, a_3) は基本並進ベクトルである.

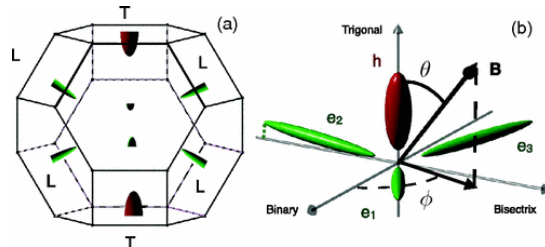


図 6.2.2 Bi のフェルミ面 [13]. 一つのホール面 (h) と 3 つの電子面 (e_1, e_2, e_3) をもつ.

きな影響を与えていることが分かる. 以上のように, 磁場中において実は多バンドの効果が非常に大きな寄与を与えていることが分かった.

6.2 Bi における異常なゼーマン効果

Bi はディラック電子系を代表する物質である. 今まで多くの研究がなされ, 物性物理学の歴史においても重要な物質である [32, 63, 88–92]. Bi の結晶構造は面心立方格子にわずかに歪みが生じた菱面体構造である (図 6.2.1). スピン軌道結合効果が強い物質としても知られ, その値は 1.8eV と大きな値を持つ [93]. Bi のフェルミ面は 1 つのホール面と 3 つの電子面を持つ (図 6.2.2). 3 つ電子面のうち Bisectrix 方向に平行なものが孤立しており, 残り 2 つが縮退している. 以下では, 3 つの L 点のうち, 縮退したものを L_1 点と L_2 点, 残りの一つを L_3 点と呼ぶ. L 点では小さなバンドギャップを持ち, ディラックコーンと呼ばれる円錐形の分散をもつ. また T 点にはホールを持ち, 前述のようにスピン分裂変数が 2 を超える特異な性質を持つ. Liu と Allen の模型 [76] と π -matrix 法を使用してスピン分裂変数 (M_{ZC}) の計算を行う. 図 6.2.3 に Liu-Allen 模型における Bi の計算結果を示す. この模型を波数で微分し, 多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型を作成する (図 5.4.1, 図 6.2.4). この模型中の π を π -matrix 法により行列表示し, 磁場中電子状態の計算を行う.

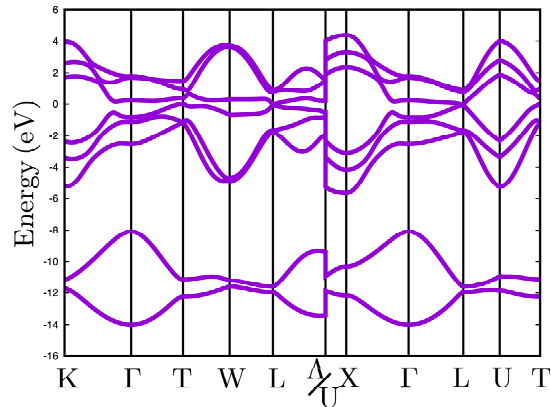


図 6.2.3 Liu と Allen による強束縛模型 [76] のバンド図

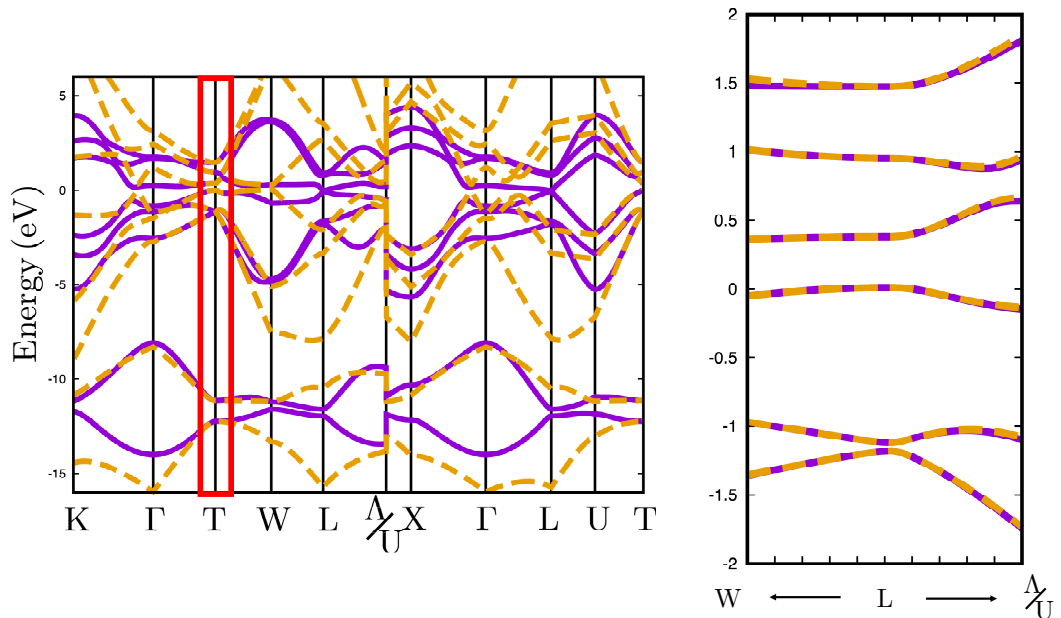


図 6.2.4 Liu と Allen による強束縛模型 [76] のバンド図と T 点周辺で作成した $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型のバンド図の比較. b) は (a) を拡大した図である. 実践が強束縛模型の計算結果, 点線が $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型の計算結果である. 高々 16 バンドしか取っていないが, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型を作成した T 点周辺では非常に良い一致を見せていることがわかる.

6.2.1 Trigonal 方向

まず最初に, 磁場を Trigonal 方向にかける場合を考える. Trigonal 方向に磁場をかけた場合には, 3つの L 点は縮退している. 図 6.2.5 に π -matrix 法を使用して計算された磁場中エネルギーを示す. 低ランダウ準位 (ゼロ磁場のエネルギーからのエネルギー変化が小さい準位) では π -matrix 法でとった基底の数による変化はないが, 高ランダウ準位 (ゼロ磁場エネルギーからのエネルギー変化が大きい準位) では基底数によるズレが

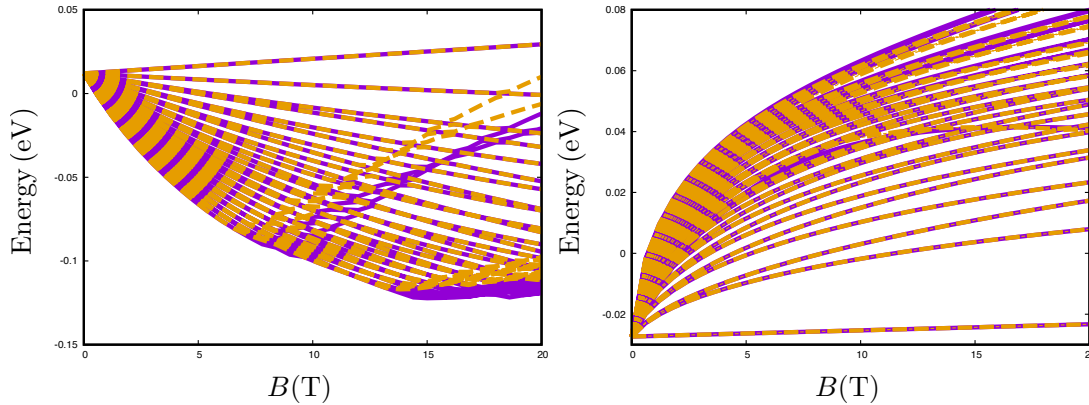


図 6.2.5 π -matrix 法により計算された T 点における磁場中エネルギー準位. それぞれ 30 本の準位を出力している. (左) T 点の磁場中エネルギー準位. 実線がランダウ準位を 0-100 までの 101 個取った場合. 点線がランダウ準位を 0-120 までの 121 個取った場合の結果 (右) L 点の磁場中エネルギー準位. 実線がランダウ準位を 0-200 までの 201 個取った場合. 点線がランダウ準位を 0-220 までの 221 個取った場合の結果. 磁場を Trigonal 方向にかけた場合は, 3 つの L 点は縮退している.

大きくなる. これはランダウ準位を有限にとったことによる影響である. T 点および L 点どちらの場合でも低準位では磁場に対して線形に近い分散をもつものに対して, 高準位ではルートに近い分散になっている. 図 6.2.6 に π -matrix 法により得た結果から計算した M_{ZC} の計算結果を示す. 図 6.2.6(左) から, T 点におけるスピン分裂変数は磁場に依存しており, ほとんど線形であることが分かる. ゼロ磁場付近では M_{ZC} の値は 2.08 と Löwdin partitionig を使用した結果と完全に一致している [63]. しかし, 20T ではおよそ 2.7 付近まで上昇しており, 30% 程度の変化が見られる. 図 6.2.6(右) は L 点におけるスピン分裂変数を示している. こちらもゼロ磁場ではスピン分裂変数が 0.96 と先行研究の結果と一致している. こちらも磁場に大きく依存し, 20T では 0.5 程度と 50% 程度の減少が見られた. 以上のように, 先行研究では定数であると考えられていた M_{ZC} が実は磁場に対して大きく依存していることがわかった.

6.2.2 Bisectrix 方向

次に Bisectrix 方向に磁場をかけた場合を考える. π -matrix 法により計算された L_1 点 (L_2 点) および L_3 点の磁場中エネルギーを図 6.2.7 に示す. 全体の磁場依存性の形は L_1 点と L_3 点での結果は似ている. しかし磁場に対する傾きは L_3 点の結果の方が大きい. この傾向を, 最低ランダウ準位の傾きから定量的に確認する. 最低ランダウ準位 E_0 の傾きから式 (4.1.13) で与えられる g' を決定する. L_1 点では $g' = 6.47$ であるのに対して, L_3 点では $g' = 16.18$ である. L_1 点より L_3 点の方が約 2.5 倍ほど傾きが大きいたことが分かる. 実験では, L_1 点で $g' = 0.545$, L_3 点で $g' = 24.0$ と現象論的に決定されている [13]. π -matrix 法を用いた結果と実験の結果とは値は異なるが, 二つの L 点の大

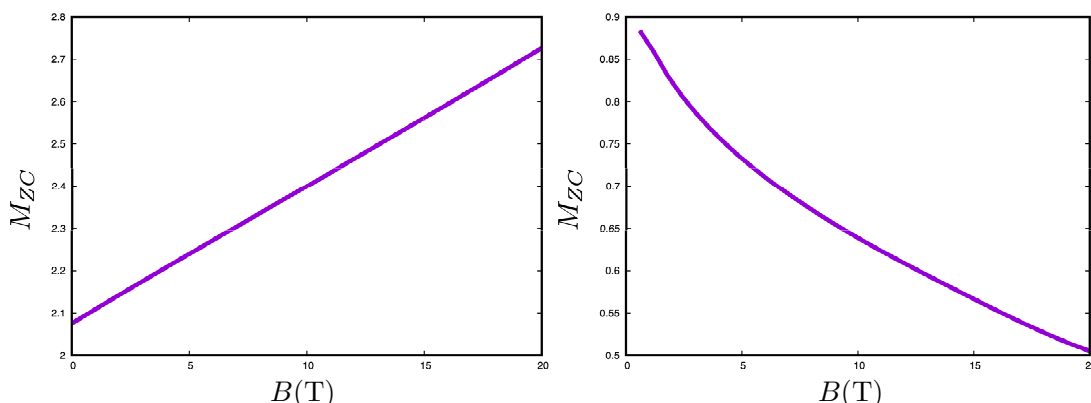


図 6.2.6 (a)T 点におけるゼーマンサイクロトロン比. (b)L 点におけるゼーマンサイクロトロン比.

小関係は一致している. 図 6.2.8 に π -matrix 法を用いた計算結果から算出したスピン分裂変数 M_{ZC} の振る舞いを示す. $B = 0.01\text{T}$ では $M_{ZC}^{L_1} = 1.01, M_{ZC}^{L_3} = 1.02$ と Löwdin partitionig を用いた結果と一致している. 弱磁場付近では, L_1 点と L_3 点のスピン分裂変数の値に大きな差はない. しかし, L_1 点では 20T で $M_{ZC}^{L_1} = 1.33$ と 30% 程度の増加であるのに対して L_3 点では 20T で $M_{ZC}^{L_3} = 1.54$ と 50% 近い増加がみられ, L_1 点と L_3 点での磁場依存性に大きく差がある. この磁場依存性の大小関係は g' の大小関係と一致している. 拡張ディラックモデルにおける M_{ZC} の磁場依存性は g' に依存しており, この値が大きければ磁場依存性も大きくなる. 図 6.2.9(左) から T 点ではより線形な磁場依存性を持つ. 磁場を Trigonal 方向にかけた場合とは異なり, ゼーマン分裂が非常に小さく, $E_{n,+}$ と $E_{n,-}$ がほとんど縮退しているように見える. 図 6.2.9(右) に示すように, $B = 0.01\text{T}$ ではスピン分裂変数が Löwdin partitionig の結果と同じくでゼロであり, 20T でも約 0.05 と非常に小さい.

6.2.3 Binary 方向

磁場を Binary 方向にかけた場合についても議論する. T 点の結果は Bisectrix 方向の結果と同じである. L_1 点と L_3 点の結果を図 6.2.10 に示す. Bisectrix 方向の場合とは逆で, L_1 点の結果の方が L_3 点の結果より磁場に対する傾きが大きくなっている. 式 (4.1.13) で与えられる g' は L_1 点では $g' = 13.2$, L_2 点では $g' = -2.26$ である. 大きさが 5.8 倍程度 L_1 点の方が大きい. 先行研究では, L_1 点で $g' = 16.2$, L_3 点で $g' = -7.26$ と現象論的に決定されている [13]. この結果とも定性的に一致している. 図 6.2.11 の結果から L_1 点ではスピン分裂変数が磁場に対して増加しており, 20T で 48% 増加している. 一方で L_3 点ではスピン分裂変数が磁場に対して減少しており, 20T では 90% 減少している. PbTe の場合と同様に最低ランダウ準位の傾きから, スピン分裂変数が磁場に対して増加関数か減少関数か分かる.

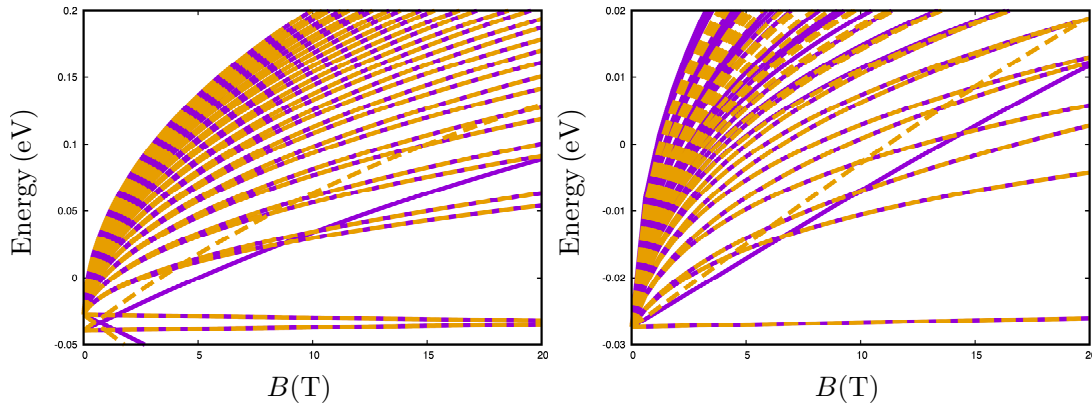


図 6.2.7 π -matrix 法により計算された磁場中エネルギー準位. 磁場は Bisectrix 方向である. それぞれ 32 本の準位を出力している. (左) L_1 点の磁場中エネルギー準位. 実線がランダウ準位を 0-40 までの 41 個取った場合. 点線がランダウ準位を 0-60 までの 61 個取った場合の結果 (右) L_3 点の磁場中エネルギー準位. 実線がランダウ準位を 0-20 までの 21 個取った場合. 点線がランダウ準位を 0-40 までの 41 個取った場合の結果.

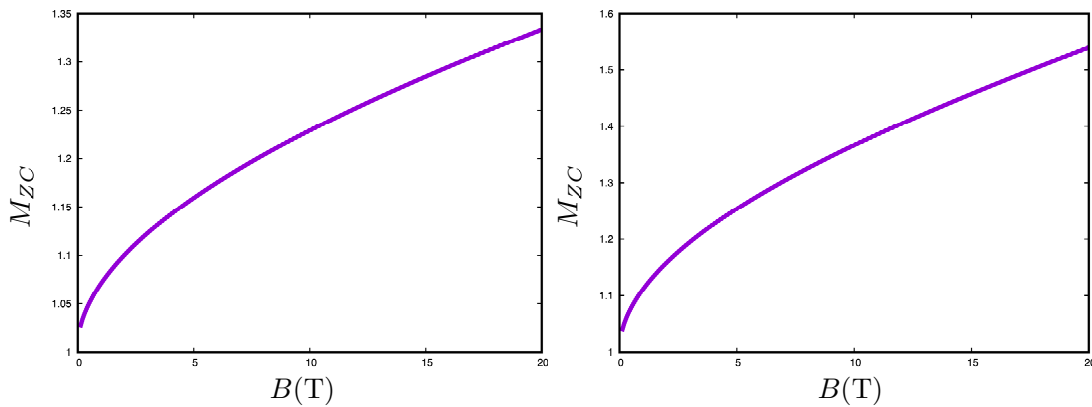


図 6.2.8 (a) L_1 点におけるスピン分裂変数 $M_{ZC}^{L_1}$. (b) L_3 点におけるスピン分裂変数 $M_{ZC}^{L_3}$.

6.2.4 Bi のまとめ

π -matrix 法により, 最低ランダウ準位の傾きを初めて微視的に計算可能となった. 表 6.2.4 に各磁場方向の π -matrix 法により計算された g' の値を示す. この結果は Zhu らにより現象論的に決定された値 [13] と定性的に一致している. Bi における最低ランダウ準位には, 伝導帯と価電子帯の最低ランダウ準位のバンド反発の有無が議論されている [68]. これに対して Vecchi らは現象論的にバンド反発が有る結果を示している [67]. また $Pb_{1-x}Sn_xSe$ の実験でも最低ランダウ準位のバンド反発が示唆されている [94]. 図 6.2.12 に示す π -matrix 法による計算結果では最低ランダウ準位のバンド反発がない. 図 6.2.12 (左) では磁場方向を最低ランダウ準位の交差が低い磁場で発生する Binary 方向

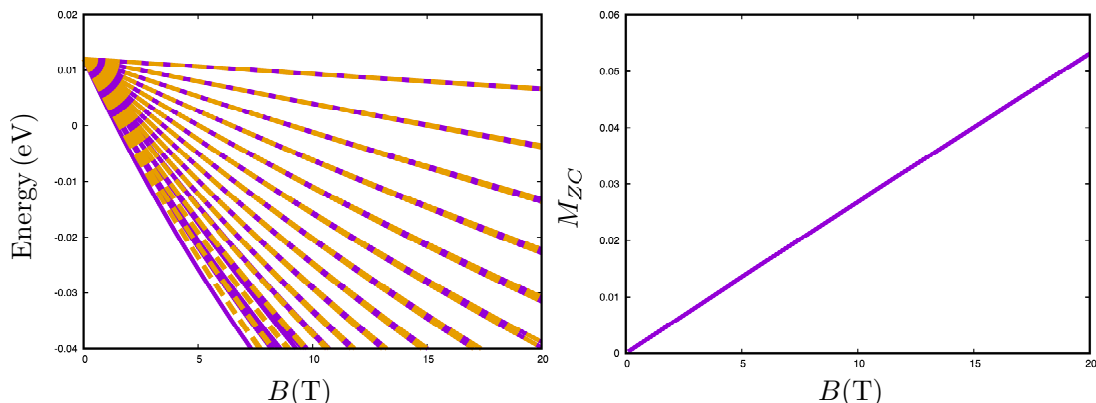


図 6.2.9 (左) π -matrix 法により計算された T 点における磁場中エネルギー準位. 30 本の準位を出力している. 実線がランダウ準位を 0-40 までの 41 個取った場合. 点線がランダウ準位を 0-60 までの 31 個取った場合の結果 (右)T 点におけるスピン分裂変数 M_{ZC}^T

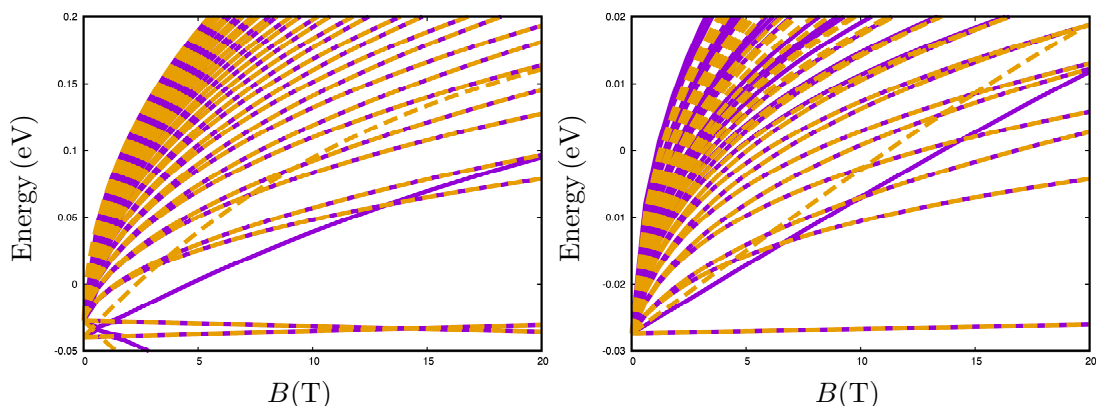


図 6.2.10 π -matrix 法により計算された L 点における磁場中エネルギー準位. 磁場は Binary 方向である. (左) L_1 点の磁場中エネルギー準位. 実線がランダウ準位を 0-40 までの 41 個取った場合. 点線がランダウ準位を 0-60 までの 61 個取った場合の結果. それぞれ 32 本の準位を出力している. (右) L_3 点の磁場中エネルギー準位. 実線がランダウ準位を 0-100 までの 101 個取った場合, 点線がランダウ準位を 0-120 までの 121 個取った場合の結果. それぞれ 30 本の準位を出力している.

とした. 最低ランダウ準位の反発の有無が議論となるのは, 最低ランダウ準位の傾きが負 (g' が正) の場合のみである. 60T 付近まで磁場を大きくすることで, Trigonal 方向の T 点, Bisectrix 方向での二つの L 点でもバンド反発のない結果が得られた. これは Vecchi らの結果とは矛盾している. この矛盾を解消するために, 簡単に不純物効果を考える. Luttinger-Kohn 模型では一般的に同じ量子数を持ち, スピンが異なる項 [例えば, 式 (5.4.3) の $H(2,1)$ など] は値がゼロである. ここに不純物効果で値が入ることを想定する. 今回は簡単に議論を行うため, 同じ量子数を持ちスピンが異なる項に定数 1 を入れ

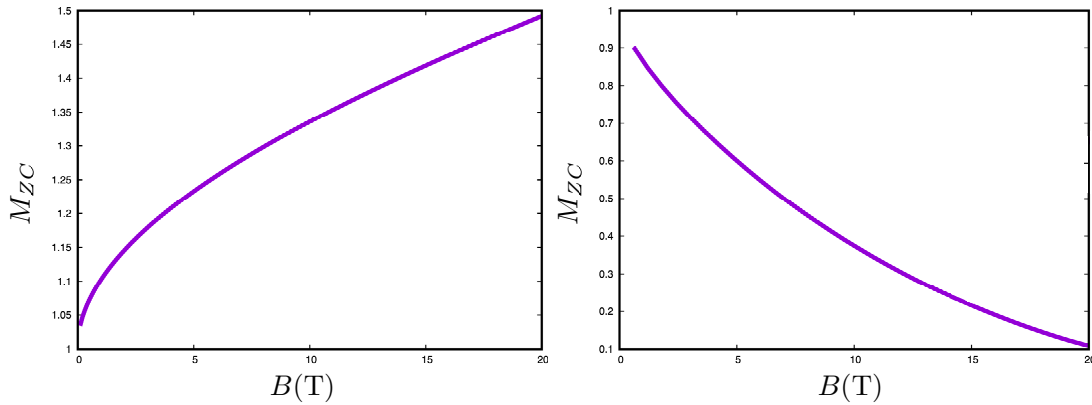


図 6.2.11 (a) L_1 点におけるスピン分裂変数 $M_{ZC}^{L_1}$. (b) L_3 点におけるスピン分裂変数 $M_{ZC}^{L_3}$.

表 6.2.1 π -matrix 法による g' の計算結果

点	Trigonal	Bisectrix	Binary
L_1	-6.70	6.47	13.2
L_3	-6.70	16.18	- 2.26
T	28.9	-8.71	-8.71

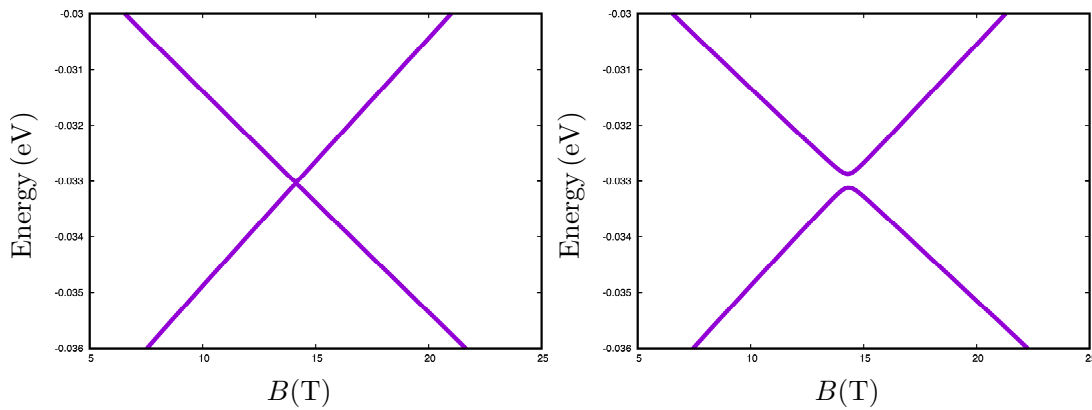


図 6.2.12 Binary 方向に磁場をかけた L_1 点の最低ランダウ準位. (a) 純粋に多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型を使用した結果 (b) 不純物効果を想定した多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型を使用した結果

た. この場合図 6.2.12(右) に示すようにバンド反発を起こすことがわかった. Baraff や Vecchi らは摂動を用いて磁場中の電子状態の計算を行っている [67,68]. 摂動を用いることで, 元々はゼロであった同じ量子数をもちスピンの異なる項に値が入っている. 一方で, π -matrix 法は非摂動的な理論であるため, 元々ゼロであった同じ量子数をもちスピンの異なる項はゼロのままである. この違いによりバンド反発の有無が異なっていたと考えられる.

今節では π -matrix 法を用いて Bi の磁場中電子状態の計算を行った. また, その増減

と増減幅は最低ランダウ準位の傾きから分かることも明らかになった。π-matrix 法により決定された最低ランダウ準位は先行研究で現象論的に決定された g' の値と定性的に一致している。また、先行研究における摂動を用いた理論や実験では、最低ランダウ準位のバンド反発が示唆されていた。これに対して、π-matrix 法の結果は最低ランダウ準位のバンド反発がなかった。これらの結果と簡単な議論から、バンド反発の有無は摂動や不純物効果により現れたものであることを提案した。

第 7 章

Cd₃As₂ におけるスピン分裂変数の 非摂動理論

2006 年にトポロジカル絶縁体の提案がされて以降、精力的にトポロジカル物質の研究が行われてきた。トポロジーによる分類学的側面は成熟しつつあり、具体的な物質での研究が進むことが期待される。磁場をかけることにより電子スピンの応答を観測することは、トポロジカル物質の物性を知る上で有用な方法の一つである。ディラック半金属物質はワイル半金属やトポロジカル超伝導体への相転移が可能な物質であり、トポロジカル相転移の研究対象として注目を集めている。トポロジカル半金属物質（特にディラック半金属やワイル半金属等）の代表物質が Cd₃As₂ である。結晶の対称軸上にトポロジカル半金属物質の特徴である円錐状のコーンが存在するため安定であることから、Cd₃As₂ はトポロジカル半金属物質の標準的物質として多くの研究がなされている [20, 21, 46, 95]. Cd₃As₂ は 1930 年代に最初の研究が行われ [96], 1960 年代から 70 年代で爆発的に研究がされた物質である [97]. 高い易動度を持つ物質として知られており、その値は室温で $10^4 \text{cm}^2 / (\text{Vs})$ を超える [98]. 今日では低温で移動度が $10^6 \text{cm}^2 / (\text{Vs})$ を超えることが報告されている [99]. また、最近の研究では、エネルギーが線形の分散を持つことが示唆されており注目を集めている。Cd₃As₂ の電子状態を理解するため、様々な模型が用いられてきた。最初の段階では、単純な模型として Kane タイプの模型が使用された [100, 101]. これらの模型では、バンドの順番や高エネルギー帯における伝導帯バンドの存在について意見の不一致が存在した。近年では第一原理計算を使用した電子状態解析により、対称性により守られたディラックコーンの存在が示唆されている [102]. この円錐形バンドは、ディラック方程式に従う質量のない電子で表現され、スピンにより二重に縮退する。このような性質を持つ物質は近年ではディラック半金属として注目を集めている。また、これらの物質で空間反転対称性を破ることにより、縮退した円錐形バンドが分裂する。この場合の円錐形バンドは、ディラックコーンではなくワイルコーンと呼ばれる。現在までのところ、Cd₃As₂ における空間反転対称性の破れについては議論が続いている [103, 104]. Wang らの研究 [102] によると、図 7.1.2 に示すように z 軸上に二つの円錐形バンドを持ち、 C_4 の回転対称性を持つ。二つの円錐形バンドは Γ 点を中心とした二次関数的な二つ

のバンドの交点となっている。また Cd_3As_2 は最初に述べた高い易動度を持つことに加え、強い線形磁気抵抗や異常ネルンスト効果や量子ホール効果、カイラル異常の発生や表面状態など、多岐にわたって注目を集めている物質である。今章では、 π -matrix 法を用いて Cd_3As_2 の磁場中電子状態を明らかにした結果を報告する。

7.1 結晶構造

Cd_3As_2 は単位胞に 160 個の原子を持つ。空間群は中心対称性を持たない $I4_1/cd$ が提案されていたが、近年では中心対称性を持つ $I4_1/acd$ が支持されている。結晶構造は室温で正方晶である。その格子定数は a 軸と b 軸方向に 1.26nm, c 軸方向に 2.54nm である。この格子定数は $2a = 2b \simeq c$ の関係があることから、ほとんど立方晶のような形をしている。そのため単純な方法として、二つの Cd が欠落した立方体を重ねることで大きな単位胞が用いられる (図 7.1.1)。Cd の欠落の順序により、 $2 \times 2 \times 4$ の格子を重ねる必要がある。この単位胞により、第一原理計算等の計算が行われる。 Cd_2As_3 は室温を超えた状態で構造を変位させることがわかっている。同じ正方晶であっても、220 度で $P4_2/nbc$ の対称性を持つものに対して、470 度では $P4_2/nmc$ の対称性を持つ [105,106]。また、600 度以上では立方晶となることも報告されている [103]。これらを踏まえ、Crassee らは Cd_3As_2 の結晶を作成する際には 425 度以上での結晶成長が行われているため、この温度の違いによる結晶構造の変化から Cd_3As_2 の電子状態の議論が生まれている可能性を指摘している [95]。

7.2 模型

前節で述べたように Cd_3As_2 の電子状態は非常に複雑である。そのため、その電子状態への理論的なアプローチも議論があった。最初の簡単な有効模型は $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論の枠組みで GaAs 等からの類推として作成された [107]。この模型では、カチオンとして Cd の s 軌道、アニオンとして As の p 軌道がフェルミ面近傍の電子状態を構成していた。初期の模型では、閃亜鉛構造を想定した従来型のケーン模型が使用された [100,108,109]。ただ、これらのバンドを決定するパラメータには一致が見られなかった。特に Γ 点におけるバンドギャップの大きさ等には議論があった。このケーン模型では、偶発的に円錐形のバンドが存在する。この円錐形バンドは対称性により保護されておらず、ディラック模型とは明らかに異なる模型で記述されることから、3D ディラックコーンとは明らかに別物である。そのため、従来型のケーン模型では Cd_3As_2 の 3D ディラックコーンを再現することはできない。その後 Bodnar により、従来型のケーン模型が考慮していなかった正方晶の効果を含んだ有効模型を開発した [101]。この模型では、正方晶軸上で対称性により縮退する点が二つ存在し、3D ディラックコーンとの関連が考えられる。この Kane/Bodnar 模型は 2 バンド模型であり、扱うバンド数が制限されている。また、パラメータの数が少なく単純であるが、同時に単純さゆえに電子状態を詳細に再現することは難しかった。そ

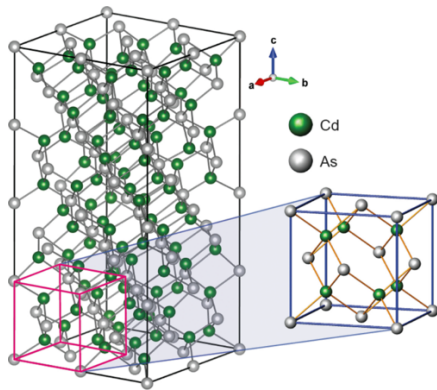


図 7.1.1 Cd_3As_2 の結晶構造 [95]. この単位胞には 96 個のカドミウム原子と 64 個のヒ素原子が含まれる.

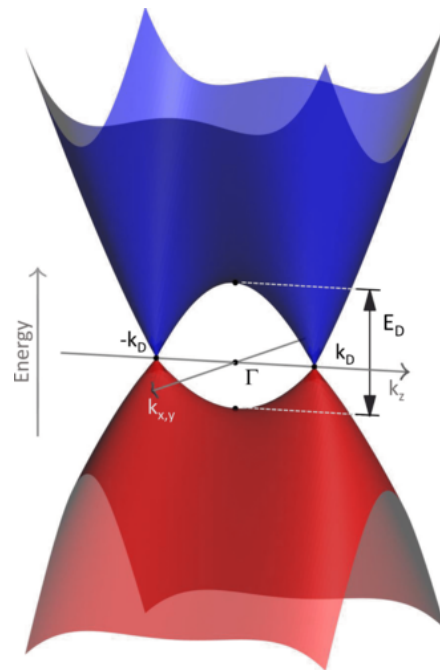


図 7.1.2 Cd_3As_2 の電子状態の概念図 [95]. k_z 軸上の $k = \pm k_d$ で二つの円錐形のバンドが存在する. これらの円錐形バンドのエネルギースケールは Γ 点におけるギャップ E_D により決定づけられる. この Γ 点の頂点はリフシツ点と呼ばれる.

のためこのような有効模型では, 他の理論的アプローチを用いて調整する必要がある. 例えば, 第一原理計算によるアプローチが多くなされている. 第一原理計算では, Cd_3As_2 が半金属であること, 二つの 3D ディラックコーンを持ち, そのディラックコーンは比較的低いエネルギー帯で現れることが述べられている. 以上のように, Cd_3As_2 の複雑な電子状態を解明するために多くの模型が作られてきた. 以下では, 第一原理計算と $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 模型を使用して作られた Z.Wang らによる模型 [102] と, それに現象論的な項を加えた Jeon 模型 [20] を紹介する. また, 非常に簡易的な模型である C.M.Wang 模型 [22] も合わせて紹介する.

7.2.1 Z.Wang モデル

Wang らにより, 第一原理計算による電子状態を計算したのち, 4 バンド模型を構築された [102]. 4 バンド模型には修正されたケーン模型と呼ばれていた模型 (8×8 行列) が使

表 7.2.1 4バンド Wang 模型のフィッティングパラメーター [102]

E_s (eV)	E_p (eV)	δ (eV)	d (eV)	Δ_{SOC} (eV)
-0.610367	-0.069191	0.072439	0.027	0.16
P (eV Å)	A' (eV Å ²)	L (eV Å ²)	M (eV Å ²)	N (eV Å ²)
6.302242	8.013873	-5.675600	-7.957689	-10.757965

用された. そのハミルトニアンはスピン軌道結合がない場合, 次のように書ける [102].

$$H_4(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} E_1 & ik_x P & ik_y P & ik_z P + d \\ -k_x P & E_2 & Nk_x k_y & Nk_x k_y \\ -ik_y P & Nk_x k_y & E_3 & Nk_y k_z \\ -ik_y P + d & Nk_x k_z & Nk_y k_z & E_4 - \delta \end{bmatrix} \quad (7.2.1)$$

ここで, $E_1 = A'k^2 + E_s$, $E_2 = Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) + E_p$, $E_3 = Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) + E_p$, $E_4 = Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) + E_p$ である. δ は Bodner [101] により導入された結晶場分裂変数であり, これにより異方的な正方晶の対称性を導入している. d は空間の反転対称性を破るパラメータであり, この模型は $I4_1cd$ の対称性を持つ (structure2). 一方, d をゼロにすることで, この模型は $P4_2/nmc$ となる (structure1). 式 (7.2.1) にスピン軌道結合を加えることで, Wang 模型は 8×8 の行列になる.

$$H_8(\mathbf{k}) = \mathbf{I} \otimes H_4(\mathbf{k}) + H_{\text{soc}}$$

$$H_{\text{soc}} = \frac{\Delta_{\text{SOC}}}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (7.2.2)$$

このハミルトニアンを計算した結果のバンド図は図 7.2.1 となる. 第一原理計算の結果から Cd の 5s 軌道と As の 4p 軌道がフェルミ面近傍を占めていることがわかる. またこの結果から表 7.2.1 に示すようなパラメータが決定されている.

基底として $|S_{\frac{1}{2}}, \frac{1}{2}\rangle$, $|P_{\frac{3}{2}}, \frac{3}{2}\rangle$, $|S_{\frac{1}{2}}, -\frac{1}{2}\rangle$, $|P_{\frac{3}{2}}, -\frac{3}{2}\rangle$ と取ることで, 3D ディラック粒子を表現する 2 バンドの最小模型 $H_{\Gamma}(\mathbf{k})$ を作成することができる [102].

$$H_{\Gamma}(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}) + \begin{bmatrix} M(\mathbf{k}) & Ak_+ & Dk_- & B^*(\mathbf{k}) \\ Ak_- & -M(\mathbf{k}) & B^*(\mathbf{k}) & 0 \\ Dk_+ & B(\mathbf{k}) & M(\mathbf{k}) & -Ak_- \\ B(\mathbf{k}) & 0 & -Ak_+ & -M(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \quad (7.2.3)$$

ここで, $\epsilon_0(\mathbf{k}) = C_0 + C_1 k_z^2 + C_2(k_x^2 + k_y^2)$ であり, $M(\mathbf{k}) = M_0 - M_1 k_z^2 - M_2(k_x^2 + k_y^2)$ である. また, バンド反転を再現するため $M_0, M_1, M_2 < 0$ を満たす必要がある. 正方晶

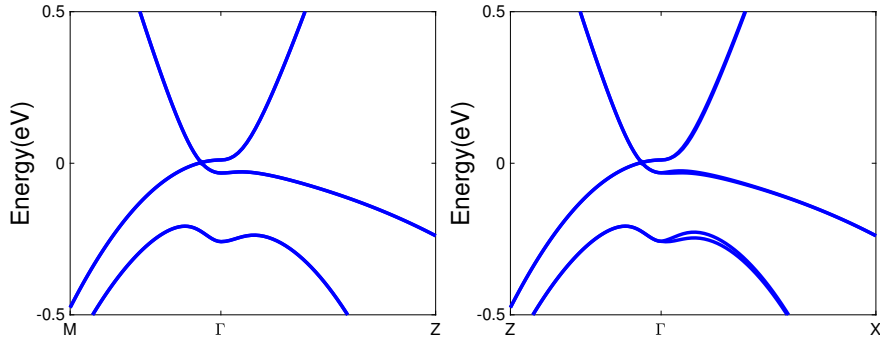


図 7.2.1 (a)structure1,(b)structure2 の計算結果. パラメータ d を入れた structure2 では, (011) 方向 (Γ -Z 間および Γ -X 間) の縮退が解けている. ただし (001) 方向の縮退は解けない.

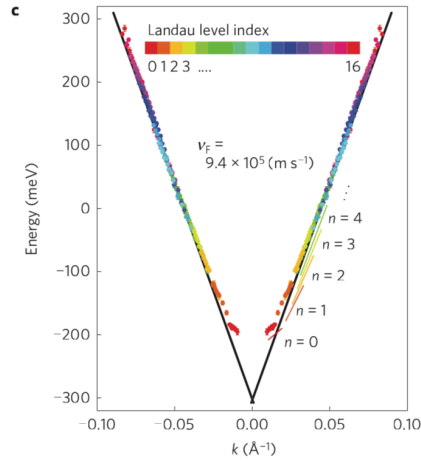


図 7.2.2 Lifshitz-Onsager の量子化条件から解析した (112) 方向の有効バンド分散 [20]. 16 個のランダウ準位がプロットされている. 黒い線はフェルミ準位での速度の外挿である.

の対称性のもとで, $(\alpha k_z + \beta D) k_+^2$ は高次式であり, $\mathcal{O}(k^2)$ までを考えた場合, 無視することができる. D は空間反転対称の破れを起こし, structure1 ではゼロとなる. この場合エネルギーは,

$$E(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}) \pm \sqrt{M(\mathbf{k})^2 + A^2 k_+ k_-} \quad (7.2.4)$$

となり, $\mathbf{k}^c = (0, 0, \pm\sqrt{M_0/M_1})$ で縮退する.

7.2.2 Jeon 模型

Jeon 模型は式 (7.2.3) と同様の形のハミルトニアン H_4 から出発する. Jeon らはゼーマン項を考えている.

$$H_{\text{jeon}} = H_4 + H_{\text{Zeeman}} \quad (7.2.5)$$

表 7.2.2 jeon 模型のフィッティングパラメーター [20]

C_0 (eV)	C_1 (eV Å ²)	C_2 (eV Å ²)	A (eV Å)	g_s
-0.219	-30	-16	2.75	18.6
M_0 (eV)	M_1 (eV ² Å ²)	M_2 (eV Å ²)	M_3 (eV)	g_p
-0,060	96	18	0.050	2

ここで,

$$H_{Zeeman} = \frac{\mu_B}{2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) \otimes \begin{pmatrix} g_s & 0 \\ 0 & g_p \end{pmatrix}$$

である. g_s, g_p は s 軌道と p 軌道それぞれの有効 g 因子である. 図 7.2.2 のような半古典的なランダウ量子化の解析から, (112) 方向では -100mV から 300mV まで伝導帯バンドが線形の分散を持つ [20]. これを満たすために, H_4 の $\epsilon_0(\mathbf{k})$ および $M(\mathbf{k})$ の書き換えを行う.

$$\epsilon_{jeon}(\mathbf{k}) = C_0 + C_1 k_z^2 + C_2 (k_x^2 + k_y^2) \quad (7.2.6)$$

$$M_{jeon}(\mathbf{k}) = M_0 + \sqrt{M_3^2 + M_1 k_z^2} + M_2 (k_x^2 + k_y^2) \quad (7.2.7)$$

$|k_z| \ll M_3/\sqrt{M_1}$ の場合を考えると,

$$M_{jeon}(\mathbf{k}) \simeq M'_0 + M'_1 k_z^2 + M_2 (k_x^2 + k_y^2) \quad (7.2.8)$$

で書くことができ, これは元々の 2 バンド Wang 模型の場合と同様の形である (符号が異なるが, これは表 7.2.2 にあるようにパラメータの符号の違いによるものである.). ここで, $M'_0 = M_0 + |M_3|$ であり, $M'_1 = 1/2 M_1/|M_3|$ である. また, $|k_z| \gg M_3/\sqrt{M_1}$ の場合を考えると,

$$M_{jeon}(\mathbf{k}) \simeq M_0 + \sqrt{M_1} |k_z| + M_2 (k_x^2 + k_y^2) \quad (7.2.9)$$

となり, k_z 方向に線形の分散を持つことがわかる. Wang 模型の場合と同様の議論で D および $B(\mathbf{k})$ の項を無視できるため, 最終的に Jeon 模型の形は以下のようになる.

$$H_{jeon}(\mathbf{k}) = \epsilon_{jeon}(\mathbf{k}) + \begin{bmatrix} M_{jeon}(\mathbf{k}) & Ak_+ & 0 & 0 \\ Ak_- & -M_{jeon}(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_{jeon}(\mathbf{k}) & -Ak_- \\ 0 & 0 & -Ak_+ & -M_{jeon}(\mathbf{k}) \end{bmatrix} + H_{Zeeman} \quad (7.2.10)$$

また, パラメータは表 7.2.2 のようになる. ここからは, 磁場中効果を導入する. 式 (7.2.10) において $\mathbf{k} \rightarrow \pi/\hbar$ の変換を行えば良い. 自然数 $n \gg 1$ のとき, 基底関数

$\psi = (\phi_n, \phi_{n-1}, \phi_n, \phi_{n+1})$ ととる. すると固有値 E_n は以下のような永年方程式を解くことで計算できる.

$$\begin{vmatrix} (\epsilon_n + M_n - E) & \frac{\sqrt{2ni}A}{l_B} & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{2ni}A}{l_B} & (\epsilon_{n-1} - M_{n-1} - E) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\epsilon_n + M_n - E) & \frac{\sqrt{2(n+1)i}A}{l_B} \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{(n+1)i}A}{l_B} & (\epsilon_{n+1} - M_{n+1} - E) \end{vmatrix} = 0 \quad (7.2.11)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \epsilon_n &= C_0 + C_1 k_z^2 + \frac{C_2}{l_B^2} (2n + 1) \\ M_n &= M_0 + \sqrt{M_3^2 + M_1 k_z^2} + \frac{M_2}{l_B^2} (2n + 1) \end{aligned}$$

である. また, l_B は磁気長と呼ばれ, $l_B = \sqrt{\hbar/(eB)}$ である. また, $n = 0$ のときは特別に基底関数 $\psi = (\phi_0, \phi_1)$ をとる. この場合は以下の永年方程式を解くことになる.

$$\begin{vmatrix} (\epsilon_0 + M_0 - E) & \frac{\sqrt{2i}A}{l_B} \\ -\frac{\sqrt{2i}A}{l_B} & (\epsilon_1 - M_1 - E) \end{vmatrix} = 0 \quad (7.2.12)$$

式 (7.2.11) および式 (7.2.12) では簡単のためゼーマン項を無視した.

7.2.3 2 ノードモデル

Cd_3As_2 などの, ワイル半金属物質ならびにディラック半金属物質では, 簡易的な 2 ノード模型がよく使われる [19, 21, 22]. ハミルトニアンは次の形で書き表される [21, 22].

$$\begin{aligned} H_{2\text{node}} &= A(k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + M(k_w^2 - k^2) \sigma_z \\ &= \begin{bmatrix} M_k & Ak_- \\ A_{k+} & -M_k \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (7.2.13)$$

ここで, A, M, k_w はバンドのパラメータであり, $M_k = M(k_w^2 - k^2)$ とした. これを解くと以下のようなエネルギー固有値を得る.

$$E = \pm \sqrt{[M^2(k_w^2 - k^2) + A^2(k_x^2 + k_y^2)]} \quad (7.2.14)$$

上の表式はワイル半金属とよばれる状態である. 時間反転対称性を保っている場合, ディラック半金属とよばれる状態になる. この場合, 式 (7.2.14) は以下のように書き換わる [21].

$$H_{\text{Dirac}} = \begin{bmatrix} H_{2\text{node}} & 0 \\ 0 & H_{2\text{node}} \end{bmatrix} \quad (7.2.15)$$

次に磁場中の電子状態を考える．ランダウゲージ $(-yB, 0, 0)$ を採用し（磁場は z 方向），次のような変換を行う．

$$\mathbf{k} \rightarrow \left(k_x - \frac{eB}{\hbar} y, -i\partial_y, k_z \right)$$

このとき，

$$a \equiv - \left[\frac{(y - l_B^2 k_x)}{l_B} + l_B \partial_y \right]$$

$$a^\dagger \equiv - \left[\frac{(y - l_B^2 k_x)}{l_B} - l_B \partial_y \right]$$

と定義する． $\omega_{\text{Hai}} = 2M_1/l_b^2, \eta = \sqrt{2}A/l_B$ と定義すると，ハミルトニアンは次のように変換される．

$$H_{2\text{node}} = \begin{bmatrix} M_k & Ak_- \\ Ak_+ & -M_k \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} M_a & \eta a \\ \eta a^\dagger & -M_a \end{bmatrix}$$

基底として $|n-1\rangle, |n\rangle$ をとると，次の永年方程式を解くこととなる．

$$\det \begin{bmatrix} M_n + \omega_{\text{Hai}} - E & \eta\sqrt{n} \\ \eta\sqrt{n} & -M_n + \omega_{\text{Hai}} - E \end{bmatrix} = 0 \quad (7.2.16)$$

ここで， $M_n = M_0^2 - M_1 k_z^2 - n\omega_{\text{Hai}}$ である．よって，エネルギー固有値は，

$$E = \omega_{\text{Hai}}/2 \pm \sqrt{M_n^2 + n\eta^2} \quad (7.2.17)$$

となる．ただし， $n=0$ のときは特別に，

$$E = \omega_{\text{Hai}}/2 - M_0 + M_1 k_z^2 \quad (7.2.18)$$

となる．この2ノード模型では価電子帯と伝導帯の最低ランダウ準位が縮退したような形になる．磁場中エネルギーは図 7.2.3 のようになる．

7.3 多バンド模型における磁場中電子状態

前節で見たように，Cd₂As₃ の磁場中電子状態は2バンド等行列サイズが小さい模型で計算されてきた．これらの模型では，磁場中の電子状態が4次関数的であることが予想されている．一方で PbTe や Bi 等では，多バンドのハミルトニアンを解くことにより，大きく電子状態が変わることが分かっている [10, 14, 23]．今節では， π -matrix 法を用いることで多バンド模型である Wang 模型の磁場中電子状態の計算を行った結果を報告する．

図 7.3.1 に Wang 模型のゼロ磁場エネルギー分散を示す．Jeon 模型や2ノード模型等の簡易的な模型の場合は，価電子帯と伝導帯のは対称的な形をしていた．しかし，Wang 模型では非対称な形となっていることが分かる．リフシツツ点のエネルギー差は他の模

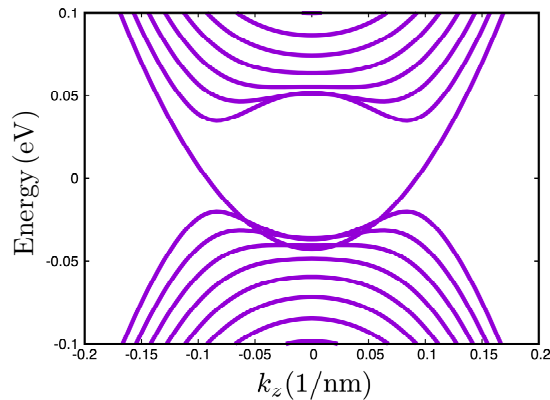


図 7.2.3 2 ノード模型の磁場中エネルギー準位. パラメータは $A = 0.5\text{eVnm}$, $M = 5\text{eVnm}^2$, $k_w = 0.1\text{nm}^{-1}$ とした.

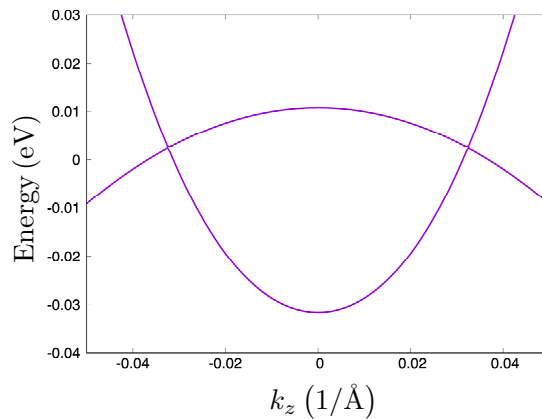


図 7.3.1 Wang 模型のゼロ磁場エネルギー準位の図.

型と同じく 40meV である. しかし価電子帯側のリフシツ点が -30meV であるのに対して, 伝導帯側のリフシツ点が 10meV と差が大きい. また, k_z 方向に関してはスピンの対して縮退している.

π -matrix 法により計算された 1T における磁場中エネルギー準位を図 7.3.2 に示す. 実線が π -matrix の基底として $0-40$ の 41 個のランダウ準位をとった場合, 点線が $0-120$ の 121 個のランダウ準位をとった場合の結果である. 明らかに二つの結果があてない部分がある. これは基底としてランダウ準位を有限にとった影響であり, ゴースト準位と呼ぶ. 基底数 41 個の場合にはリフシツ点の内側まで降りてきているが基底数 121 個の場合では伝導帯側は図 7.3.2 のエネルギースケールでは観測されないほど上に動いており, 価電子帯も頂点が -0.01eV 付近まで下がっている. PbTe の場合と同様に容易にゴースト準位を区別できる. また基底数 41 でも, ゴースト準位を除けば十分である. 模型の非対称性から価電子帯と伝導帯で磁場に対する応答がやや異なる. そこで, ここからは伝導帯と価電子帯に分けて議論を行う.

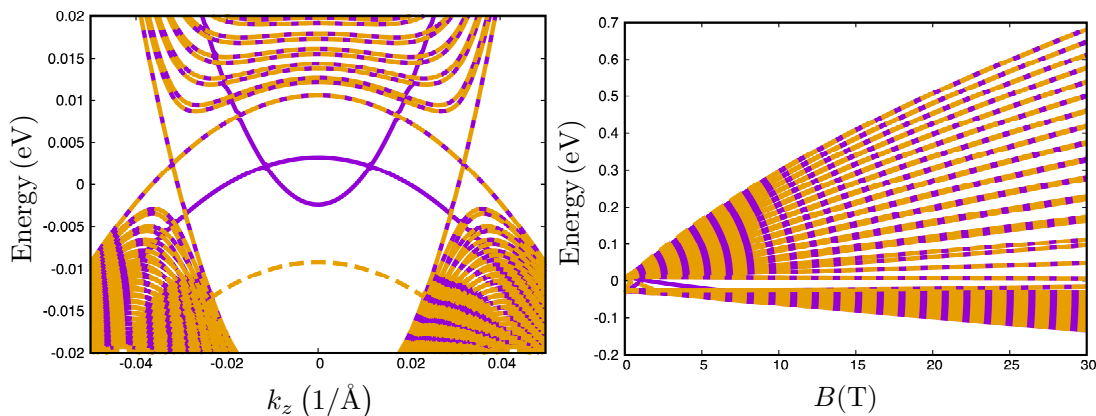


図 7.3.2 π -matrix 法により計算された Wang 模型の磁場中エネルギー分散の図。(左): k_z 依存性, (右): B 依存性. 紫の実線がランダウ準位 41, 黄色の点線がランダウ準位数 121 の計算結果.

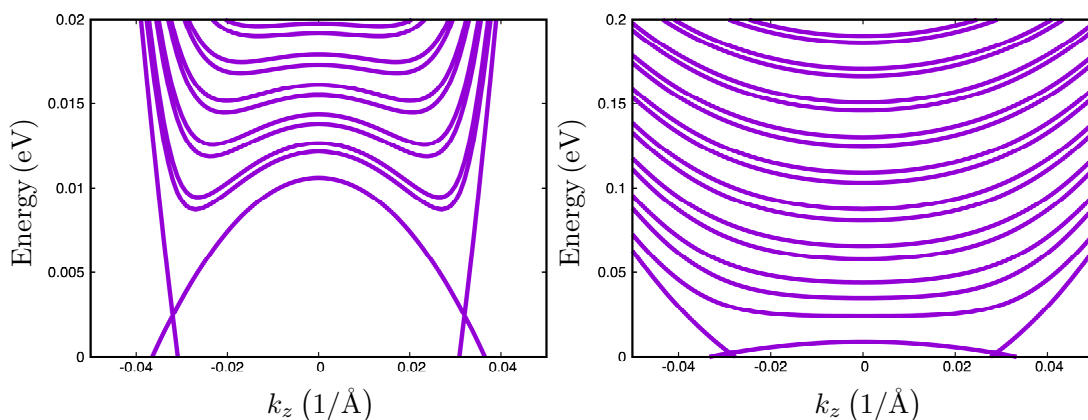


図 7.3.3 伝導帯の磁場中エネルギー準位の k_z 依存性. (左) $B = 1\text{T}$, (右) $B = 10\text{T}$ の計算結果. π -matrix の基底は 121 個取っている.

7.3.1 伝導帯について

図 7.3.3 に伝導帯の磁場中エネルギーの k_z 依存性を示す. $B = 1\text{T}$ の場合には, 価電子帯と伝導帯の交差する波数 ($k = \pm k_D$) 付近および Γ 点でピーク構造を持っており, 4 次関数的な性質が強く現れている. また, リフシツ点と価電子帯との交差点のエネルギー差の 2 倍程度上のエネルギー帯でも $k = \pm k_D$ に現れるピーク構造は残り続けている. 一方 $B = 10\text{T}$ の場合では, $k = \pm k_D$ にピーク構造はなく, Γ 点でのみピーク構造を持つ. $B = 10\text{T}$ の低準位ではやや平らな形をしており 4 次関数的な性質がわずかに残っているが, 上の準位ではより 2 次関数的な形をしている. これは, 最低ランダウ準位を除く全てのバンドがリフシツ点よりも上にきたことにより, Γ 点から発生するランダウ準位が支配的になったと考えられる. つまり, 磁場が大きくなるにつれて, トポロジカル半金属物

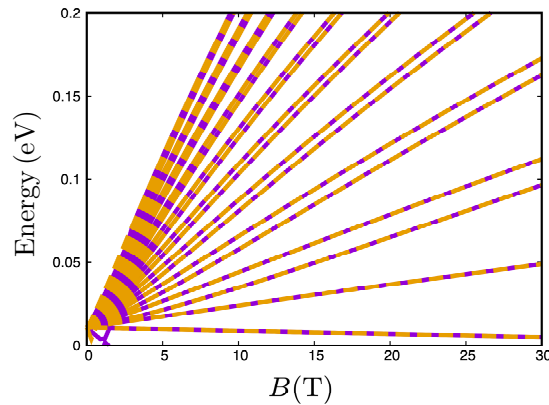


図 7.3.4 π -matrix 法により計算された Wang 模型の磁場電子状態の磁場依存性の図. 紫の実線がランダウ準位 41, 黄色の点線がランダウ準位数 121 の計算結果.

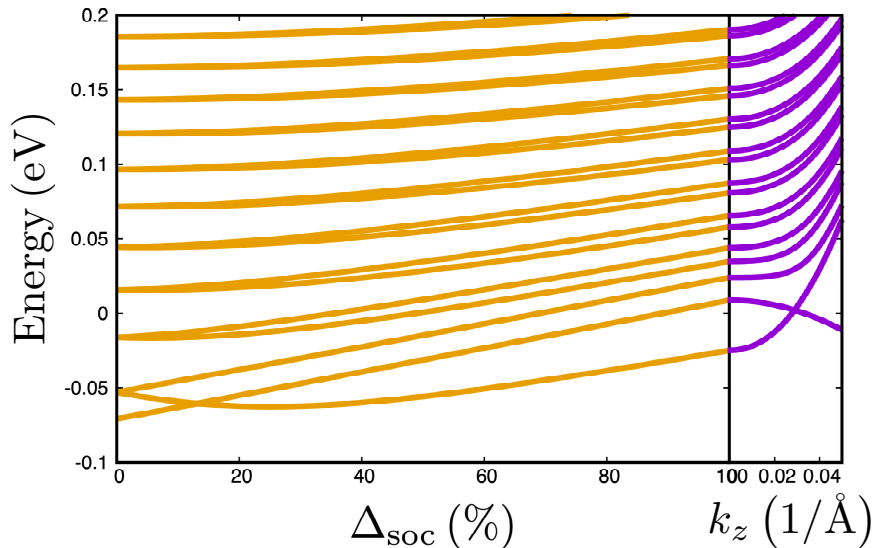


図 7.3.5 $B = 10\text{T}$ におけるスピン軌道結合の変化によるランダウ準位の変化. 黄色の実線がスピン軌道結合効果によるランダウ準位の変化を示す. 100% が Wang 模型として与えられたパラメータ Δ_{SOC} の値である (表 7.2.1 参照). 紫の実線は $B = 10\text{T}$ における k_z 依存性の図. 二つの図を重ねることでランダウ準位の指標を決定できる.

質の特徴である二つのコーンからの影響が弱まり, より自由電子的な振る舞いに変わっている. 図 7.3.4 に Γ 点における磁場依存性の図を示す. 最低ランダウ準位が磁場に対して減少する. 二つの準位がセットとなり動いているように見え, 非常に単純な構造を取っている. 図 7.3.4 のエネルギースケールでは電子状態が線形な磁場依存性をもつようにみえるが, 図 7.3.2(右) に示されるように, 実際には \sqrt{B} に近い形をしている. ランダウ準位の指標を決定することを考える. Wang 模型では, パラメータを変えることでスピン軌道結合効果の大小を変化させられる. スピン軌道結合がない場合でのランダウ準位を基準に指標を決定し, 式 (7.2.2) の Δ_{SOC} を連続的に変化させることで, スピン軌道結合がある

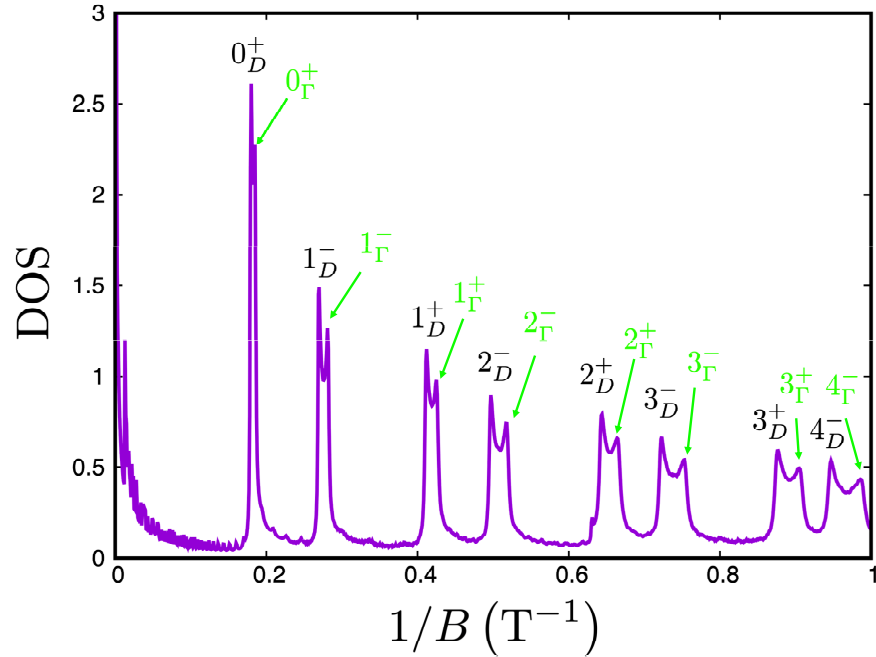


図 7.3.6 状態密度の計算結果. n_D^σ が $k = \pm k_D$ 由来のピーク, n_Γ^σ が Γ 点由来のピーク.

場合のランダウ準位の指標を一意に決定できる. 図 7.3.5 に Wang 模型の Δ_{SOC} を変えることで, ランダウ準位がどのように変化するかを示す. スピン軌道結合効果の変化により, ランダウ準位の反転が起こっていないことが分かる. これにより, ランダウ準位の指標を決定した.

量子振動の実験との比較のため, 状態密度の計算を行った. 図 7.3.6 に状態密度の計算結果を示す. フェルミエネルギーは $E_F = 0.018\text{eV}$ とし, 式 (2.2.4) で定義されるグリーン関数の無限小量 δ は $\delta = E_F/500$ に設定した. スピン分裂したピーク構造がセットとなり振動として現れているように見える. ピーク構造が現れた磁場の k_z 依存性を確認することで, ピーク構造の由来となるバンドを特定できる. 先ほどと同様にスピン軌道結合効果の変化からピーク構造の持つ指標を決定する. その結果 $E_F = 0.18$ では Γ 点に由来を持つピーク構造と $k = \pm k_D$ に由来を持つピーク構造があることが分かった. この結果を元に, fan diagram plot を作成する. 結果は, 図 7.3.7 に示すようになる. $k = k_D$ 由来のピークから作った fan diagram plot の x 切片を x_D^σ , $k = 0$ (Γ 点) 由来のピークから作った fan diagram plot の x 切片を x_Γ^σ とする. $M_{\text{fan}}^D = 0.60$, $M_{\text{fan}}^\Gamma = 0.57$ となった. また x 切片の平均は $x_{\text{ave}}^D = 0.50$, $x_{\text{ave}}^\Gamma = 0.48$ となり, x 切片の平均は 0.5 付近に収まっている. $E_F = 0.018\text{eV}$ の場合, 二つの fan diagram plot には大きく差がないことが分かる. 次に, M_{fan} のフェルミエネルギーによる変化を確認する. 図 7.3.8 にスピン分裂変数 M_{fan} のフェルミエネルギー依存性について示す. 前述の通り, Cd_3As_2 の状態密度のピークには, Γ 点に由来のものと, $E = \pm k_D$ 由来のもの二種類がある. ゼロ磁場の電子状態から, Γ 点の影響を強く受けた場合は上凸な分散をもち, $E = \pm k_D$

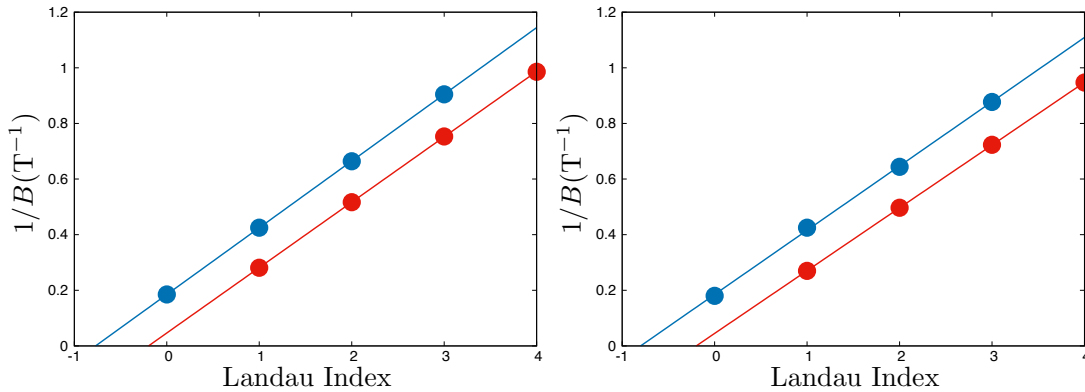


図 7.3.7 7.3.6 の結果から算出した fan diagram plot の結果. $E_F = 0.018\text{eV}$.
 (左) $k = k_D$ 由来のピークから作った fan diagram plot, (右) Γ 点由来のピークから作った fan diagram plot

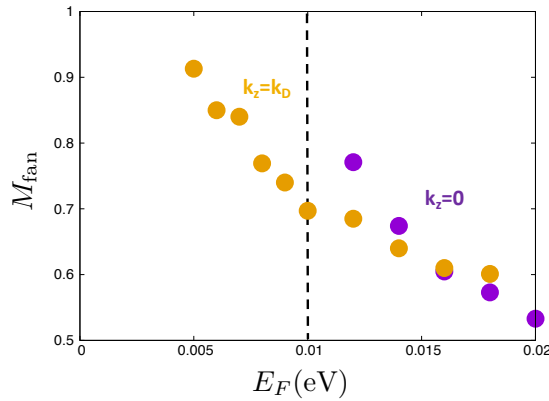


図 7.3.8 M_{fan} の E_F 依存性.

の影響を強く受けた場合は下凸な分散を持つ。これにより全体では4次関数的な分散を持つ。 $E_F = 0.01\text{eV}$ でフェルミエネルギーがリフシツ点にかかる。ここを境にして、 $E_F < 0.01\text{eV}$ では Γ 点由来のピークが現れない。一方で、 $E_F > 0.01\text{eV}$ では $k = \pm k_D$ 由来のピークが残り続ける。 E_F が増加するに伴い、状態密度の $k = \pm k_D$ 由来のピークの出現が低磁場側にずれていき、 $E_F = 0.02\text{eV}$ では $k = \pm k_D$ 由来のピークは確認できなかった。また、リフシツ点を超えてすぐの範囲では、 M_{fan}^D と M_{fan}^Γ の差が大きいですが、徐々に差が小さくなっていくことが分かる。リフシツ点周辺では、 $k = \pm k_D$ の影響を強く受けるため、 $k = \pm k_D$ における下凸が深く現れ、同じ指標をもつバンドでも $k = \pm k_D$ における下凸な極値と Γ 点での上凸な極値のエネルギー差が大きくなる。そのためフェルミエネルギーと一致するタイミングが異なり、状態密度で二つのピークの出現するタイミングが異なる。リフシツ点から離れると、 $k = \pm k_D$ における下凸が浅くなっていくため、 $k = \pm k_D$ と Γ 点でのエネルギー差が小さくなり、 $k = \pm k_D$ と Γ 点におけるピークが現れるタイミングが近くなる。最終的には、 $k = \pm k_D$ と Γ 点でのエネルギー差がなくなりフラットなバンドを形成したのち、さらに離れると $k = \pm k_D$ にある円

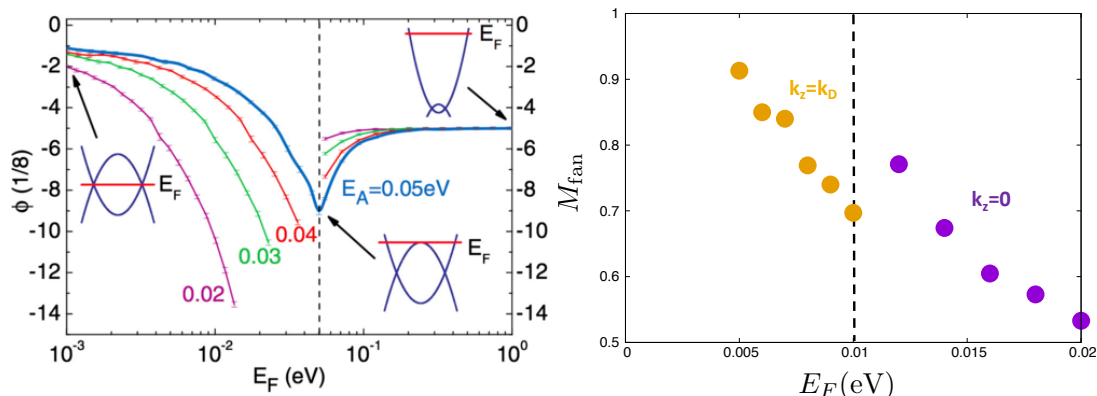


図 7.3.9 (左) 2 ノード模型におけるベリー位相のフェルミエネルギー依存性 [22].
 (右) リフシツ点で M_{fan}^D から M_{fan}^Γ に意図的に切り替えた図.

錐形バンドの効果を受けなくなり、二次関数的なバンドとなると考えられる。以上のことから、二つのスピン分裂変数の差がなくなり、最終的に M_{fan}^Γ のみが残ると考えられる。 M_{fan} の値もフェルミエネルギーが価電子帯と伝導帯の交点に近づくにつれ、1 に近づいている。ディラック電子の場合 $M_{\text{fan}} = 1$ なので、フェルミエネルギーを交点に近づけることでディラック電子的になっていることが分かる。一方で、フェルミエネルギーを価電子帯と伝導帯の交点から遠ざけていくことで、 M_{fan} は減少していくことが分かる。自由電子の場合 $M_{\text{fan}} = 0$ となることから、フェルミエネルギーを交点から遠ざけていくと自由電子的になることが分かった。2 ノード模型では図 7.3.9(左) のようにリフシツ点で、ベリー位相 Φ に飛びが現れることが報告されている。ベリー位相とスピン分裂変数には $\Phi = \pi M_{\text{fan}}$ の関係がある。そのため、同様の結果が得られることが予想された。しかし、今回の計算結果ではそもそもスピン分裂変数の起源が異なり、リフシツ点により急激に変化するわけではなく、リフシツ点以降で別々の起源を持つピークが重なっていくことが分かった。2 ノード模型と同様な飛びはリフシツ点までは M_{fan}^D 、リフシツ点以降は M_{fan}^Γ とすることで表現可能である [図 7.3.9(右)]。

7.3.2 価電子帯について

図 7.3.10 に価電子帯の磁場中エネルギー準位の k_z 依存性を示す。 Γ 点で -0.01eV 付近にピークを持つ上凸のバンドは基底を有限に取ったため現れたゴースト準位である。 $B = 1\text{T}$ では、 $k = \pm k_D$ に上凸な二つのピークと Γ にした凸のピークを一つもつ 4 次関数的な振る舞いをしている。 $B = 10\text{T}$ でも低準位では $k = \pm k_D$ に上凸な二つのピークを持つが、高準位に向かうにつれフラットなバンドとなっていく。また特徴的な現象として、ランダウ準位が複雑に交差している様子が見られる。これは、2 ノード模型では見られない特異的な電子状態である。図 7.3.11 に Γ 点における磁場依存性の図を示す。こちらにも同様に、低準位ではランダウ準位の激しい入れ替わりが起こっている。また、伝導帯と比べ磁場に対する応答が小さい。最低ランダウ準位は磁場に対して線形に上昇して

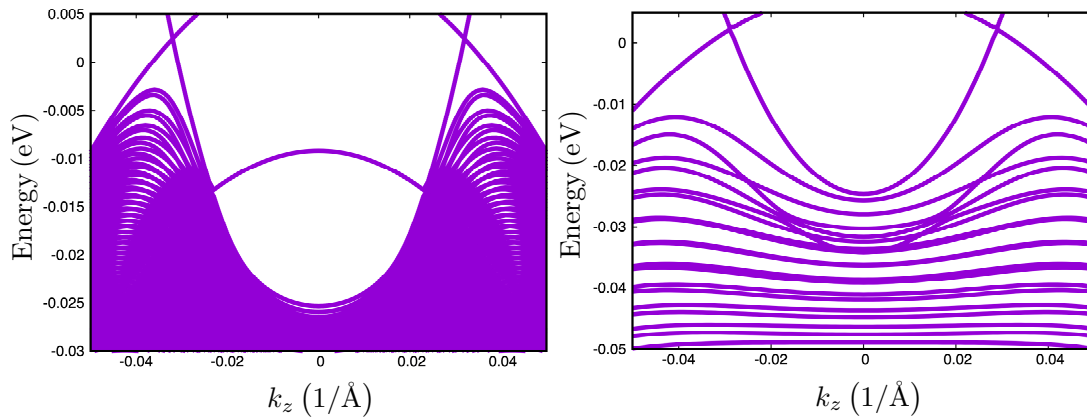


図 7.3.10 価電子帯の磁場中エネルギー準位の k_z 依存性. (左) $B = 1\text{T}$, (右) $B = 10\text{T}$ の計算結果. π -matrix の基底は 121 個取っている.

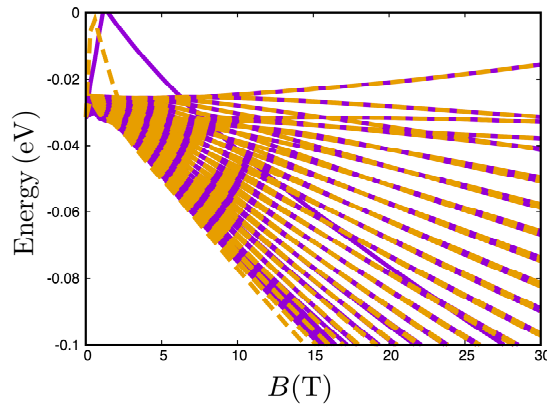


図 7.3.11 π -matrix 法により計算された Wang 模型の価電子帯磁場電子状態の磁場依存性の図. 紫の実線がランダウ準位 41, 黄色の点線がランダウ準位数 121 の計算結果.

いる.

ランダウ準位の指標を決定することを考える. 図 7.3.12 にスピン軌道結合の大きさを変えることで, どのようにランダウ準位が変化するかを示す. これによりランダウ準位を一意に決定できる. 以上のようにランダウ準位を決定した結果, 状態密度は図 7.3.13 に示すような結果となる. 図 7.3.13 をみれば分かるように, 価電子帯のランダウ準位は非常に激しく入れ替わっており, ランダウ準位の指標を決定するには注意が必要である.

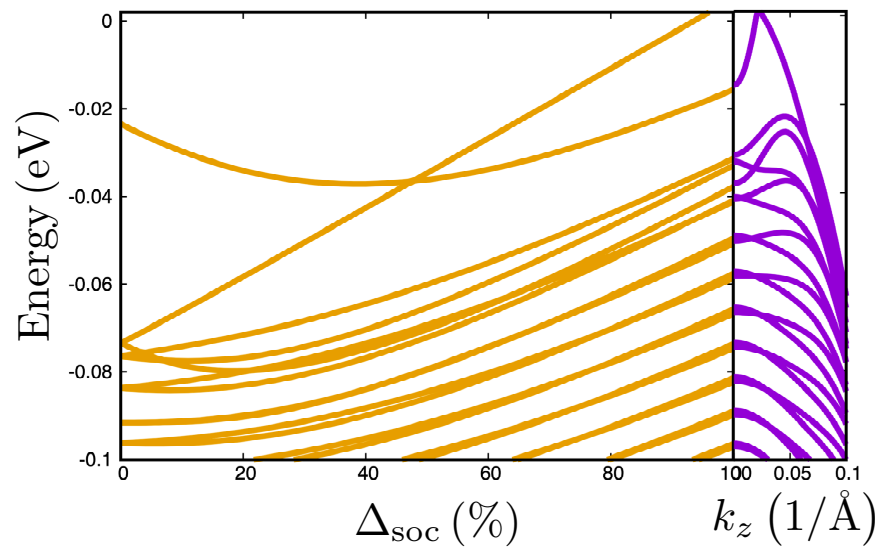


図 7.3.12 $B = 30\text{T}$ におけるスピン軌道結合の変化によるランダウ準位の変化. 黄色の実線がスピン軌道結合効果によるランダウ準位の変化を示す. 紫の実線は $B = 30\text{T}$ における k_z 依存性の図. 二つの図を重ねることでランダウ準位の指標を決定することができる.

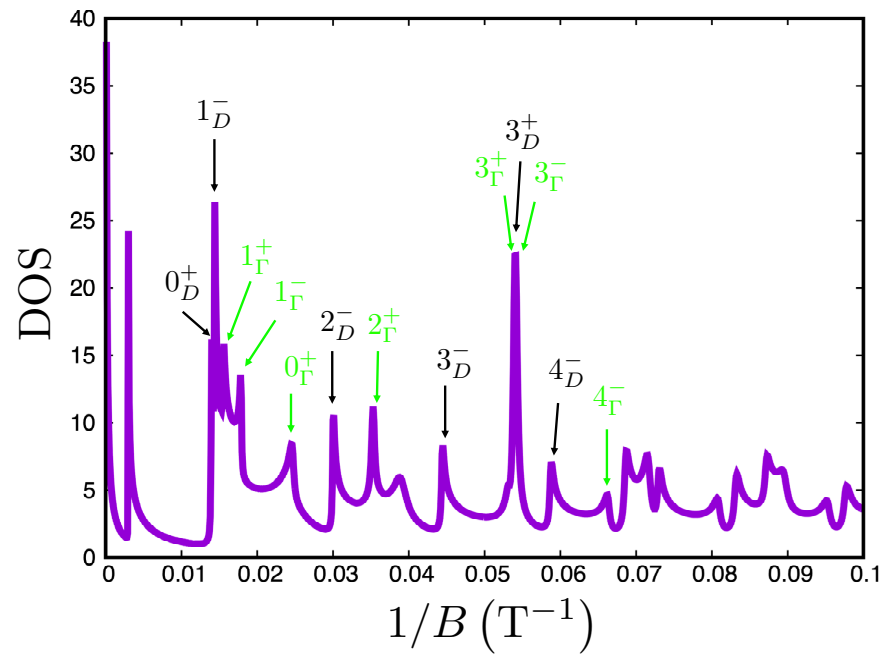


図 7.3.13 状態密度の計算結果. n_D^σ が $k = \pm k_D$ 由来のピーク, n_Γ^σ が Γ 点由来のピーク.

第 8 章

まとめ

本論文では、磁場中の電子状態について扱った。量子論の枠組みにおいて磁場中電子状態を計算するには困難が伴った。非可換な演算子 π の存在により単純な数値対角化が許されず、現在までの研究では非常に簡易的な模型や、物質に応じた個別な手法が用いられており、一般的に磁場中電子状態を計算する手法が存在しなかった。そこで、我々は行列力学の手法に習い π を行列で表現することで一般性を保ったまま磁場中電子状態の計算を可能にした。この手法を用いることで、分野の異なるディラック電子系物質ならびにトポロジカル半金属物質の磁場中電子状態の計算を行った。

ディラック電子物質では、いままで定数であると信じられていた磁場中エネルギー準位が実は磁場に大きく依存することを明らかにした。また、最低ランダウ準位の傾きに注目することで、今まで現象論的に定められていた拡張ディラック模型を初めて、微視的に決定することができた。この拡張ディラック模型を使用することで、 M_{ZC} が減少するメカニズムを解明した。またその結果から予想される M_{ZC} の磁場に対する増加も、PbTe の Pb を Sn に置換した模型を使用することでその存在を明らかにした。今まで同一であると信じられていた二つのスピン分裂変数の評価方法が実は異なることも明らかにした。また微視的に最低ランダウ準位を計算することにより、バンド反発の有無を確認した。これにより、バンド反発の起源が不純物効果や摂動によるものであることを示唆した。

トポロジカル半金属物質では、多バンド効果を含んだ磁場中エネルギー準位を計算することにより、今までの簡易的な模型では得られなかった、複雑な磁場中電子状態を明らかにした。スピン軌道結合効果の大きさを変えることにより、ランダウ準位の決定ができることを示した。状態密度の計算による量子振動解析により、実験におけるランダウ準位の見え方を再現し、ランダウ準位の指標の決定には注意が必要であることを示した。スピン分裂変数のフェルミエネルギー依存性に関しても、先行研究の結果とは異なる性質があることを示した。

以上のように、独自の手法である π -matrix 法により、既存の理解を覆すような結果を得た。 π -matrix 法の最大の特徴はその高い一般性にある。今後もこの手法により多くの領域で磁場中電子状態の解明が期待される。

謝辞

まず、指導教員である伏屋雄紀准教授に厚く御礼申し上げます。理論研究の進め方や考え方を一から教えていただきました。6年間にわたり丁寧な指導をしていただきました。 π -matrix法の開発段階では、お忙しい中パリから議論をしていただきました。物理だけでなく、申請書や学会等の要旨、本論文など、多くの文章を添削していただきました。本論文を書き上げられたのは、伏屋先生のご指導のおかげです。心より、感謝申し上げます。

副指導教員をお受けくださいました大淵泰司准教授に感謝申し上げます。博士前期課程からの5年間ご指導いただきました。特に、修士論文を執筆の際には私の拙い文章を丁寧に添削していただきました。感謝申し上げます。また、お忙しい中審査委員を引き受けてくださいました、中村淳教授、佐々木成朗教授、松林和幸准教授にも感謝申し上げます。

実験データを提供いただきました東京大学物性研究所徳永将史准教授、岡山大学秋葉和人助教授にも感謝申し上げます。また、第一原理計算手法についてご助言いただきました立命館大学池田浩章教授に感謝申し上げます。

伏屋研究室の皆様にも感謝申し上げます。田中寛之氏、土屋寛明氏、大和田光明氏、早坂太志氏の4人の先輩方に感謝申し上げます。博士後期課程の学生として何をすべきかの道を示してくださいました。特に大和田光明氏、早坂太志氏のお二人には、研究や出張、書類作成等いろいろなところでアドバイスをいただきました。この場を借りて、感謝申し上げます。渡部太平氏、辻村昌希氏、森谷圭佑氏にも感謝申し上げます。輪講や研究内容の議論にお付き合いいただきました。4人のおかげで研究のペースや、モチベーションを高めることが出来ました。御礼申し上げます。河村省吾氏、山田暉馨氏、浅香雄哉氏、粟島裕大氏にも感謝申し上げます。講義ノート執筆の際に議論した文章の書き方やTexの使い方は、本論文を書く上で非常に役に立ちました。粟島裕大氏に関しては、出張時や計算機管理の面でもお世話になりました。御礼申し上げます。卒業した方や、現在在籍している伏屋研究室の皆様にも感謝申し上げます。

電気通信大学体育会サッカー部の卒業生および現役生の皆さまにも感謝申し上げます。研究での悩みや進学の相談等もさせていただきました。また、サッカー部のおかげで気分転換や息抜きが出来ました。この場をかりて、感謝申し上げます。

最後に、博士後期課程までの進学を応援し支えてくださいました家族に、心より感謝申し上げます。

参考文献

- [1] D. Shoenberg. Cambridge Monographs on Physics. Cambridge University Press, (1984).
- [2] G. P. Mikitik, Y. V. Sharlai. *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 2147, (1999).
- [3] P. Gosselin, H. Boumrar, H. Mohrbach. *EPL (Europhysics Letters)*, **84**, 50002, (2008).
- [4] T. Hanaguri *et al.* *Phys. Rev. B*, **82**, 081305, (2010).
- [5] K. Akiba *et al.* *Journal of the Physical Society of Japan*, **84**, 054709, (2015).
- [6] J. M. Luttinger, W. Kohn. *Phys. Rev.*, **97**, 869, (1955).
- [7] H. Fukuyama, R. Kubo. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **28**, 570, (1970).
- [8] Y. Fuseya, M. Ogata, H. Fukuyama. *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 066601, (2009).
- [9] M. Owada, Y. Awashima, Y. Fuseya. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **30**, 445601, (2018).
- [10] Y. Fuseya *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **115**, 216401, (2015).
- [11] M. H. Cohen, E. I. Blount. *Phil. Mag.*, **5**, 115, (1960).
- [12] P. A. Wolff. *J. Phys. Chem. Solids*, **25**, 1057, (1964).
- [13] Z. Zhu *et al.* *Phys. Rev. B*, **84**, 115137, (2011).
- [14] H. Hayasaka, Y. Fuseya. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **28**, 31LT01, (2016).
- [15] H. Kohler, E. Wuchener. *Phys. Stat. Sol.*, **67**, 665, (1975).
- [16] B. Fauqué *et al.* *Phys. Rev. B*, **87**, 035133, (2013).
- [17] M. Orlita *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **114**, 186401, (2015).
- [18] K. Akiba *et al.* *Phys. Rev. B*, **98**, 115144, (2018).
- [19] R. Okugawa, S. Murakami. *Phys. Rev. B*, **89**, 235315, (2014).
- [20] S. Jeon *et al.* *Nature materials*, **13**, 851, (2014).
- [21] H.-Z. Lu, S.-B. Zhang, S.-Q. Shen. *Phys. Rev. B*, **92**, 045203, (2015).
- [22] C. M. Wang, H.-Z. Lu, S.-Q. Shen. *Phys. Rev. Lett.*, **117**, 077201, (2016).
- [23] Y. Izaki, Y. Fuseya. *Phys. Rev. Lett.*, **123**, 156403, (2019).
- [24] C. Kittel, C.-y. Fong. Vol. 5. Wiley New York, (1963).
- [25] G. Grosso, G. Parravicini. *Solid State Physics. 2000*. Academic Press.

- [26] 安藤陽一. トポロジカル絶縁体入門. 講談社, (2014).
- [27] L. M. Roth. *Phys. Rev.*, **145**, 434, (1966).
- [28] P. A. M. Dirac. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, **117**, 610, (1928).
- [29] P. Blaha *et al.* *An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties*, (2001).
- [30] G. E. Smith, G. A. Baraff, J. M. Rowell. *Phys. Rev.*, **135**, A1118, (1964).
- [31] V. S. Édel'man. *Adv. Phys.*, **25**, 555, (1976).
- [32] K. Behnia, M.-A. Méasson, Y. Kopelevich. *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 166602, (2007).
- [33] Z. Zhu *et al.* *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **109**, 14813, (2012).
- [34] C. L. Kane, E. J. Mele. *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 146802, (2005).
- [35] L. Fu, C. L. Kane. *Phys. Rev. B*, **76**, 045302, (2007).
- [36] J. E. Moore, L. Balents. *Phys. Rev. B*, **75**, 121306, (2007).
- [37] M. V. Berry. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, **392**, 45, (1984).
- [38] R. Karplus, J. M. Luttinger. *Phys. Rev.*, **95**, 1154, (1954).
- [39] D. J. Thouless *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 405, (1982).
- [40] D. Xiao, M.-C. Chang, Q. Niu. *Rev. Mod. Phys.*, **82**, 1959, (2010).
- [41] Y. Ando. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **82**, 102001, (2013).
- [42] H. Murakawa *et al.* *Science*, **342**, 1490, (2013).
- [43] T. Liang *et al.* *Science Advances*, **3**, (2017).
- [44] 齊藤英治, 村上修一. スピン流とトポロジカル絶縁体: 量子物性とスピントロニクス
の発展. 共立出版, (2014).
- [45] I. M. Lifshitz, A. M. Kosevich. *Sov. Phys. JETP*, **2**, 636, (1956).
- [46] N. P. Armitage, E. J. Mele, A. Vishwanath. *Rev. Mod. Phys.*, **90**, 015001,
(2018).
- [47] H. Weyl. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **15**, 323, (1929).
- [48] C. Herring. *Phys. Rev.*, **52**, 365, (1937).
- [49] S. L. Adler. *Phys. Rev.*, **177**, 2426–2438, (1969).
- [50] J. S. Bell, R. Jackiw. *Il Nuovo Cimento A (1965-1970)*, **60**, 47, (1969).
- [51] S. Murakami. *New J. Phys.*, **9**, 356, (2007).
- [52] X. Wan *et al.* *Phys. Rev. B*, **83**, 205101, (2011).
- [53] Q. D. Gibson *et al.* *Phys. Rev. B*, **91**, 205128, (2015).
- [54] Y. Zhang *et al.* *Nature*, **438**, 201, (2005).
- [55] K. S. Novoselov *et al.* *Nature*, **438**, 197, (2005).
- [56] L. P. He *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **113**, 246402, (2014).
- [57] L. M. Roth, B. Lax, S. Zwerdling. *Phys. Rev.*, **114**, 90, (1959).
- [58] M. Cardona. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **24**, 1543, (1963).
- [59] C. R. Pidgeon, R. N. Brown. *Phys. Rev.*, **146**, 575, (1966).

-
- [60] D. L. Mitchell, R. F. Wallis. *Phys. Rev.*, **151**, 581, (1966).
- [61] J. M. Luttinger. *Phys. Rev.*, **102**, 1030, (1956).
- [62] R. F. Wallis, H. J. Bowlden. *Phys. Rev.*, **118**, 456, (1960).
- [63] Y. Fuseya, M. Ogata, H. Fukuyama. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **84**, 012001, (2015).
- [64] L. FAL'KOVSKIT. *SOVIET PHYSICS JETP*, **17**, (1963).
- [65] F. Gantmakher. *Matrix theory [Teoriya matrits]*. Gostekhizdat Moscow, (1953).
- [66] M. S. Dresselhaus. *J. Phys. Chem. Solids*, **32**, 3, (1971).
- [67] M. P. Vecchi, J. R. Pereira, M. S. Dresselhaus. *Phys. Rev. B*, **14**, 298, (1976).
- [68] G. A. Baraff. *Phys. Rev.*, **137**, A842, (1965).
- [69] M. Maltz, M. S. Dresselhaus. *Phys. Rev. B*, **2**, 2877, (1970).
- [70] Z. Zhu *et al.* *Nature Communications*, **8**, 15297, (2017).
- [71] R. Winkler. Springer-Verlag, (2003).
- [72] L. C. L. Y. Voon, M. Willatzen. Springer-Verlag, (2009).
- [73] G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus. *Phys. Rev.*, **140**, A401, (1965).
- [74] A. Akrap *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **117**, 136401, (2016).
- [75] K. Nakao. *Journal of the Physical Society of Japan*, **40**, 761, (1976).
- [76] Y. Liu, R. E. Allen. *Phys. Rev. B*, **52**, 1566, (1995).
- [77] K. Momma, F. Izumi. *Journal of Applied Crystallography*, **44**, 1272, (2011).
- [78] C. S. Lent *et al.* *Superlattices Microstruct.*, **2**, 491, (1986).
- [79] L. Fu. *Phys. Rev. Lett.*, **106**, 106802, (2011).
- [80] T. H. Hsieh *et al.* *Nat Commun*, **3**, 982, (2012).
- [81] Y. Pei *et al.* *Nature*, **473**, 66, (2011).
- [82] Z. Dughaish. *Physica B: Condensed Matter*, **322**, 205, (2002).
- [83] J. P. Heremans *et al.* *Science*, **321**, 554, (2008).
- [84] M. Lach-hab *et al.* *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **61**, 1639, (2000).
- [85] J. O. Dimmock, I. Melngailis, A. J. Strauss. *Phys. Rev. Lett.*, **16**, 1193, (1966).
- [86] Z. Zhu *et al.* *J. Phys.: Condens. Matter*, **30**, 313001, (2018).
- [87] J. O. Dimmock. p. 310. Pergamon, Oxford, (1971).
- [88] P. Kapitza. *Proc. Roy. Soc. A*, **119**, 358, (1928).
- [89] L. Shubnikov, W. J. de Haas. *Comm. Phys. Lab. Leiden*, **207d**, 35, (1930).
- [90] W. J. de Haas, P. M. van Alphen. *Comm. Phys. Lab. Leiden*, **212a**, 3, (1930).
- [91] J. K. Galt *et al.* *Phys. Rev.*, **100**, 748, (1955).
- [92] K. Behnia, L. Balicas, Y. Kopelevich. *Science*, **317**, 1729, (2007).
- [93] Y. Yafet. *Solid State Phys.*, **14**, 1 – 98, (1963).
- [94] G. Krizman *et al.* *Phys. Rev. B*, **98**, 161202, (2018).
- [95] I. Crassee *et al.* *Phys. Rev. Materials*, **2**, 120302, (2018).
- [96] M. V. Stackelberg, R. Paulu. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, **28**, 427, (1935).

- [97] W. Zdanowicz, L. Zdanowicz. *Annual Review of Materials Science*, **5**, 301, (1975).
- [98] A. J. Rosenberg, T. C. Harman. *Journal of Applied Physics*, **30**, 1621, (1959).
- [99] T. Liang *et al.* *Nature materials*, **14**, 280, (2015).
- [100] L. G. Caron, J. P. Jay-Gerin, M. J. Aubin. *Phys. Rev. B*, **15**, 3879, (1977).
- [101] J. Bodnar. *in the Proceedings of the 3rd International Conference on the Physics of Narrow Gap Semiconductors (Warszawa 1977)*, p. 311, (see also arXiv:1709.05845).
- [102] Z. Wang *et al.* *Phys. Rev. B*, **88**, 125427, (2013).
- [103] M. N. Ali *et al.* *Nature*, **514**, 205, (2014).
- [104] W. Desrat *et al.* *Phys. Rev. B*, **97**, 245203, (2018).
- [105] A. Pietraszko, K. Lukaszewicz. *physica status solidi (a)*, **18**, 723, (1973).
- [106] E. Arushanov. *Progress in Crystal Growth and Characterization*, **3**, 211, (1980).
- [107] Y. Peter, M. Cardona. Springer Science & Business Media, (2010).
- [108] D. Armitage, H. Goldsmid. *Physics Letters A*, **28**, 149, (1968).
- [109] J. P. Jay-Gerin, A. A. Lakhani. *Journal of Low Temperature Physics*, **28**, 15, (1977).

関連論文の印刷公表の方法及び時期

(1) 全著者名：猪崎優喜，伏屋雄紀

論文題目：「Nonperturbative Matrix Mechanics Approach to Spin-Split Landau Levels and the g Factor in Spin-Orbit Coupled Solids」

2019年10月 Physical Review Letters, 123 巻（本文との関連：第5章，第6章6.1節）