

磁性トポロジカル絶縁体表面における
スピントロニクス現象の微視的理論

今井悠介

2021年2月19日

概要

トポロジカル物質は、近年発見された秩序相とは異なる物質相であり、そのバルクのトポロジカルな性質によって生じる表面状態は興味深い物理現象を引き起こす。時間反転対称性によって保護された三次元のトポロジカル絶縁体はビスマス化合物などで実験的な観測も行われており、その表面に存在する2次元ディラック電子は高効率にスピン流を生成することからスピントロニクス舞台として注目されている。この表面電子は通常、線形分散をもつ2次元ディラック電子モデルで記述され、面直磁化と結合した場合には異常ホール伝導度が量子化するなど興味深い現象が報告されているが、一方でこのモデルは、電気伝導とスピン応答が等しく振る舞う、強磁性磁化の効果に対してゲージ不変性が課される（例えば、一様な面内磁化による異方性は生じない、磁化の空間微分を含むトルクとして限られた形のみが許される）、など特異な性質を持つことが知られている。実際の物質では、フェルミ面に六回対称な歪みを引き起こす波数の三次の項や、粒子・正孔対称性の破れを引き起こす波数の二次の項が存在することが指摘されているため、これらの効果によって、より多彩な物理現象が生じることが期待される。そこで申請者は、波数の高次項の効果を考慮した2次元ディラックモデルに基づいて、電気伝導、および磁化へ与える影響であるスピントルク（電流誘起スピン分極）について調べた。波数の三次の項の効果に関しては、面内磁化による異常量子ホール効果、電気伝導度とスピントルクの面内異方性など面内磁化の効果が主に調べられており、面直磁化の効果に関しては、波数の三次の項の効果を摂動的に取り入れ、磁化の空間微分を伴うトルクとして新しいものが生じることが報告されている。申請者は、波数の三次の項を非摂動的に取り扱い、表面電子の面直磁化との結合を考慮して、スピン応答と電気伝導を線形応答理論によって微視的に調べた。まず、線形分散モデルで成り立っていたスピン応答と電気伝導の等価性が波数の三次の項によって成り立たなくなること、さらに高ドープ領域では、速度に対する波数の高次の寄与によって電気伝導度が大幅に増大すること、絶縁体領域において量子ホール伝導度と一致していたスピントルクが量子化値からずれる（異常ホール伝導と等価でなくなる）ことなどを明らかにした。さらに、空間変化する磁化に作用するスピントルクは非常に多くの種類のものが生じるが、申請者は、対称性の観点に加えてそれらの代数的構造に着目して整理することにより、各トルクがスピン波の分散関係や電流による磁壁移動などの現象にどのような物理的效果をもたらすかを明らかにした。また、波数の三次の項の効果を非摂動的に取り入れたことによって、高ドープ領域において磁壁駆動の非断熱性スピントルクが大幅に増大することが明らかになった。さらに、回転対称性が三回対称性に低下したことによって、磁化構造にねじれを与える反対称交換相互作用（ジャロシンスキー・守谷相互作用）が電流によって誘起される効果が対称性から許されることを見出し、微視的な計算を行うことによって、その効果が、波数の三次の項の係数の一次を最低次として現れることを明らかにした。次に申請者は、波数の二次の項を考慮して、一様磁化と結合したディラック電子モデルを調べた。このモデルは、空間反転対称性を破るスピン軌道相互作用の効果を取り入れた伝導電子のモデルとしてより広く調べられているラシュバモデルと類似している（ラシュバモデルでは一般に2枚のフェルミ面が生じるが、内側のフェルミ面のみを考慮することでディラックモデルとなる）ため、これら2つのモデルに対して電気伝導度とスピントルクの解析を行なった。ラシュバモデルはこれまで、ディラックモデルの伝導帯に対応する領域について主に調べられており、自己エネルギーの磁化依存性の消失、梯子型バーテックス補正の効果による電気伝導度とスピントルクの磁化依存性の消失など興味深い性質が指摘されている。申請者はラシュバモデルとディラックモデルとの比較を行うため、ディラックモデルの価電子帯とギャップに対応する領域も合わせて調べた。波数の二次の項によってディラック電子の粒子・正孔対称性は破れるため、伝導帯と価電子帯で物理量は異なった性質を示すようになるが、特に、価電子帯では伝導帯よりも物理量に大きな面内異方性が現れることを見出した。また、電気伝導の異方性については化学ポテンシャルの関数として定符号であるが、スピントルクの異方性についてはディラック点で符号変化するという対照的な特徴を明らかにした。また、ディラックモデルでは化学ポテンシャルの関数として物理量に不連続性は生じないが、ラシュバモデルの場合には様々な不連続性が生じることを明らかにした。この不連続性の多くはフェルミ面の枚数の変化に由来するものであるが、磁化が面内の場合の面直スピン分極のディラック点における不連続性については、ディラック点でのラシュバモデルの性質の変化に由来するものである。このような不連続性は、本研究においてディラックモデルの価電子帯に対応す

る領域までラシュバモデルを調べたことによって見出された結果である。

目次

第 1 章	導入	7
1.1	トポロジカル絶縁体について	7
1.2	磁性トポロジカル絶縁体について	10
1.3	本論文の目的	13
第 2 章	ヘキサゴナル・ワーピング項の効果	15
2.1	モデル	15
2.2	電気伝導度とスピントルクの定式化	19
2.3	対称性とビューポイント	22
2.4	電気伝導度とスピン軌道トルク、ギルバート・ダンピング	25
2.5	空間変化する磁化に作用するスピントルク	27
2.6	マグノンの分散	31
2.7	磁壁駆動	33
2.8	電流誘起ジャロシンスキー・守谷相互作用	35
第 3 章	粒子正孔対称性の破れの効果	37
3.1	モデル	37
3.2	電気伝導度とスピン軌道トルクの定式化	45
3.3	ϕ_M 依存性	50
3.4	対称性	51
3.5	m^* 依存性	53
3.6	$\tilde{\mu}$ 依存性	54
第 4 章	結論	61
付録 A	フェルミ面の枚数の分類について	63
付録 B	ヘキサゴナル・ワーピング項がある場合の Fermi sea term の定式化	65
付録 C	空間微分を含むスピントルクの式変形	67
付録 D	ディラック点付近の摂動計算	73
D.1	フェルミ波数	73
D.2	ダンピング	74
D.3	ディラック系の面内 SOT の異方性	76
D.4	ラシュバ系の面直 SOT の不連続性	77

付録 E	ラシュバ系における摂動計算の数学的構造	79
	謝辞	83
	参考文献	85

第 1 章

導入

1.1 トポロジカル絶縁体について

物質の内部にある無数の原子は、電気伝導、熱伝導、磁性など多彩なマクロな物理現象を生み出す。このような物理現象がそれぞれの物質でどのような特徴を持つかを特徴づける物質の相の分類は、まず自発的対称性の破れの観点から考えられた [1-6]。固体の場合には連続的な並進対称性、強磁性体の場合には連続的な回転対称性、そして超伝導体はゲージ対称性が自発的に破れた物質として考えることが出来る。また、それぞれの物質は秩序パラメータとして、物質中の粒子の密度分布、磁化、巨視的波動関数を持つ。このような秩序パラメータの関数であるランダウ・ギンズブルグの自由エネルギーの最小値に対応する秩序パラメータが有限になる場合が秩序相である。

トポロジカル物質はこれらの分類に当てはまらない新たな物質相であり、本論文で扱う磁性トポロジカル絶縁体表面もその一つである。この節ではまず、磁性が無い場合のトポロジカル絶縁体の発見の経緯とその性質についての説明を行う。トポロジカル物質は、秩序パラメータを持たずに、トポロジカル指数によって通常の絶縁体・半導体・超伝導体と区別される。トポロジカル物質はトポロジカル指数が有限である物質であり、トポロジカル指数がゼロである物質とは、バルクのギャップを閉じないようなハミルトニアンの変形（断熱変化）では互いに移り合うことが出来ず、それらの境界にはギャップレス状態が生じる。真空はどのようなトポロジカル指数もゼロであると考えられるので、真空中に置かれたトポロジカル物質は中身は絶縁体であるが、その表面にはギャップレス状態が現れる [7]。トポロジカル物質として最初に発見されたものは量子ホール系であり、半導体シリコン表面において強磁場中のホール伝導度（電場に対して横方向に流れる電流の電場に対する係数）が、 e^2/h の整数倍に量子化する現象が観測された [8]。ここで、 e は電子の素電荷、 h はプランク定数であり、モデルに依存しない普遍的な定数である。この場合のトポロジカル指数は整数 Z である。その後、この量子ホール効果は、まず Laughlin の思考実験によって、二次元バンド絶縁体を丸めた円筒の穴に通した仮想的な磁束による電荷の移動によって理解され [9]、そして、TKNN 公式によって、その数学的な側面が明らかになった [10, 11]。バンド指数 n と波数 \mathbf{k} の波動関数 $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ に対して公式は以下で与えられる。

$$\sigma_{xy}^n = \frac{e^2}{h} N = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \int d^2k (\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_{n\mathbf{k}})^z, \quad (1.1)$$

$$\mathbf{A}_{n\mathbf{k}} = \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle. \quad (1.2)$$

$\mathbf{A}_{n\mathbf{k}}$ はベリー位相と呼ばれ、波数空間においてベクトルポテンシャルのような働きをし、その曲率の積分によってホール伝導度は量子化されている。量子ホール系は磁場によって時間反転対称性が破れていたが、その後、二次元の時間反転対称性がある系において、そのエッジで逆向きのヘリシティを持つ電子が逆向きに流れるような量子スピンホール系が理論的に提案され [12, 13]、実験的な検証が行われた [14]。この系におけるトポロジカル指数は時間反転対称性由来する Z_2 指数 ν であり、系の電気分極を 0, 1 の 2 つの数で特徴づけるものである。このようにトポロジカル物質は、その物質の持つ対称性に由来する様々な指数 (Z や Z_2) によって特徴付けられている。

その後、この系の 3 次元への拡張が行われた [15-17]。それがトポロジカル絶縁体であり、本論文が扱う対象である

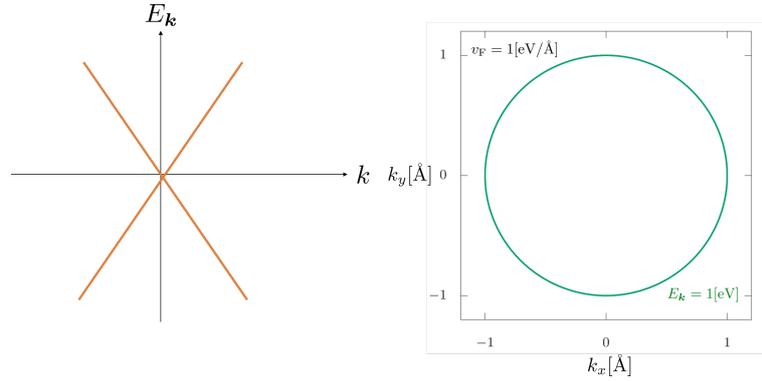


図 1.1: トポロジカル絶縁体表面の二次元ディラック電子の分散とフェルミ面（エネルギーの等高面）。 $E_{\mathbf{k}}$ は波数 \mathbf{k} におけるディラック電子のエネルギー。

磁性トポロジカル絶縁体の磁性がない場合である。3次元のトポロジカル絶縁体のトポロジカル指数は4つの Z_2 不変量である。この4つの Z_2 不変量は一つの Z_2 不変量 ν_0 と、残りの三つの Z_2 不変量 ν_1, ν_2, ν_3 に分けることが出来、 $\nu_0 = 1$ の場合は「強い」トポロジカル絶縁体と呼ばれる。 $\nu_0 = 0$ で ν_1, ν_2, ν_3 の内少なくとも一つが1になるものが「弱い」トポロジカル絶縁体で、これは二次元のトポロジカル絶縁体の積層系と考えられる。立方晶の場合を考えると ν_0 は8個全ての時間反転不変運動量における Z_2 指数の積である。また、 ν_1, ν_2, ν_3 は4個の時間反転不変運動量での Z_2 指数の積であり、二次元の場合と同様の指数となる [16]。強いトポロジカル絶縁体と弱いトポロジカル絶縁体は多くの異なる特徴を持ち、例えば、強いトポロジカル絶縁体の表面状態のフェルミ面は奇数個の時間反転運動量を覆い、摂動に対してロバストであるが、弱いトポロジカル絶縁体はそのような特徴を持たない [16]。強いトポロジカル絶縁体としては $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ [18, 19], Bi_2Se_3 [20–22], TlBiTe_2 [23, 24], PbBi_2Se_4 [25, 26], HgTe [27, 28] が、弱いトポロジカル絶縁体としては PbTe/SnTe 超格子 [29] や $\beta\text{-Bi}_4\text{I}_4$ [30] が実験的に観測されている。本論文で扱うのは強いトポロジカル絶縁体である。この物質の特徴は、バルクの電気磁気効果からも理解できる。トポロジカル絶縁体の低エネルギー過程を記述するトポロジカルな場の理論によると、四次元のチャーン・サイモンズ理論の空間一次元を丸めて次元縮約することで、以下のような電場 \mathbf{E} と磁場 \mathbf{B} に対するラグランジアンが得られる [17]。

$$\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi} \left(\epsilon E^2 - \frac{1}{\mu} B^2 \right) + \left(\frac{\alpha}{4\pi} \right) \theta \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}. \quad (1.3)$$

ここで、 ϵ は誘電率、 μ は透磁率、 α は微細構造定数である。第一項は通常の電磁場のラグランジアンであるが、第二項が有限 ($\theta = \pi$) になるのがトポロジカル絶縁体のバルクの特徴である。この有効作用によると電場による磁化の誘起、磁場による電気分極の誘起という交差応答が導かれるが、まだ実験的な検証はなされていない [35]。さらに、このようなバルクの特異的な性質に対応して、表面状態が現れることが知られている。波数の高次を無視して一次のみを残すと、表面電子のハミルトニアンは、以下のような二次元ディラック電子のハミルトニアンで与えられる。

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = -v_F (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma})^z. \quad (1.4)$$

ここで、 $\boldsymbol{\sigma}$ は電子スピンを表すパウリ行列、 \mathbf{k} は電子スピンの波数である。このモデルにおける分散関係は図 1.1 のような線形分散になり、フェルミ面は円形となる。

物質中の電子のトポロジーが相対論的な電子と結びつくことは基礎的な観点から興味深いことであるが、ディラック電子はスピンと波数（運動量）が強く結びついているため、スピントロニクスへの応用も期待されている。例えばディラック電子は、電流によるスピン分極（エーデルシュタイン効果）を高効率で生じさせることが期待されており [32–35]、スピンホール効果（電場に対して横方向にスピンの流れが流れる効果）とは異なるスピン流生成のメカニズムとして注目されている。一方で、このような線形分散のディラック電子の速度 \mathbf{v} は以下のようにスピンと等価であり、定

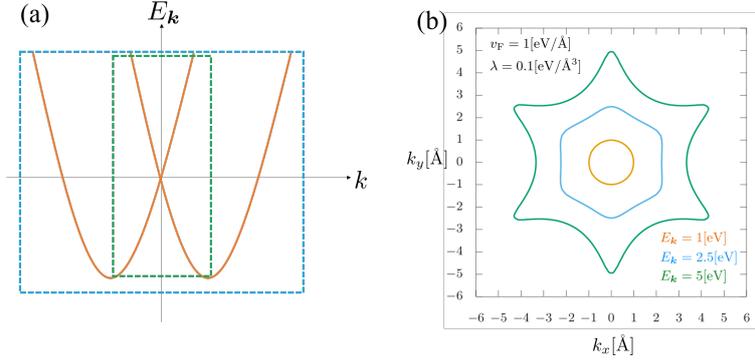


図 1.2: (a) 波数の二次を考慮した場合のバンド構造。緑の点線で囲われた部分がディラック系に対応し、青い点線で囲われた部分がラシュバ系に対応する。ディラック点の上下で非対称なバンド構造になっており、粒子正孔対称性の破れの効果が表れている。(b) 波数の三次を考慮した場合のフェルミ面。回転対称性が三回に落ちた影響でフェルミ面の形は六回回転対称な閉曲線となっており、比較的高いエネルギー領域ではそり（ヘキサゴナル・ワーピング）を伴うになる。

数倍と回転操作で互いに移り合う。

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \mathcal{H}_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} = v_F (\hat{z} \times \boldsymbol{\sigma}). \quad (1.5)$$

このことから、線形ディラック電子は、次節で示すように有限に残る物理量が制限され、また有限に残る物理量の間にも単純な関係が存在し、実際の物質で起こることが期待される多彩な物理現象を理解するには単純すぎるモデルである。実際、多くのトポロジカル絶縁体で波数の高次の項が存在し、バンド構造に影響を与えていることが知られている [36, 37]。したがって、トポロジカル絶縁体表面における種々の物理現象を解明するためには、波数の高次の項を考慮することが重要であると思われる。特に、本論文では、以下のような波数の二次と三次の項に注目する。

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = -v_F (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma})^z + \frac{k^2}{2m^*} + \lambda k_x (k_x^2 - 3k_y^2) \sigma^z. \quad (1.6)$$

以下、波数の近似の精度に依らずに、トポロジカル絶縁体表面の電子系をディラック系と呼ぶ。波数の二次の項はディラック系の粒子正孔対称性を破る。また、波数の三次の項はディラック系の連続的な回転対称性を破り、回転対称性を三回回転対称性に落とし、フェルミ面に六回対称な「そり」（ヘキサゴナル・ワーピング）を与える（図 1.2）。本論文では、「ヘキサゴナル・ワーピング項」は波数の三次の項による効果を指すものとする。波数の二次の項を加えたモデルは、バンド構造のディラック点付近を扱うことでディラック系の有効モデルになるが、バンド構造全体を扱うとラシュバ系と呼ばれるモデルとなる。ラシュバ系はトポロジカル絶縁体以前から理論的に考えられてきており、現在でも伝導電子に働くスピン軌道相互作用の効果のデバイスへの応用を考えるうえで重要な系の一つである [38–40]。

トポロジカル絶縁体の理論的な提案と実験的な観測以降もトポロジカル物質の研究は盛んに行われており、トポロジカル物質におけるスピントロニクス現象の解明とそのデバイス応用の提案は今後の重要な課題である。例えば、トポロジカル相はその物質の持つ対称性によって特徴づけることが出来、トポロジカル絶縁体・超伝導体は時間反転対称性と粒子正孔対称性とカイラル対称性によって 10 種類に分類され（量子ホール系、量子スピンホール系、トポロジカル絶縁体もその中に含まれる）、任意の空間次元においてトポロジカル指数が導かれている [41–43]。また、最近では結晶対称性も考慮した上での分類も行われている [44]。さらに、高次元トポロジカル絶縁体と呼ばれるバルクの空間次元より二次元以上低い次元の表面状態が現れるような物質も考えられている [45]。

1.2 磁性トポロジカル絶縁体について

本論文で扱う磁性トポロジカル絶縁体は、前節で紹介したトポロジカル絶縁体（時間反転対称性に由来するトポロジカル相）に強磁性（回転対称性の破れに由来する秩序相）が組み合わさった物質である。磁化が特定の方向の場合にはその表面に新たなトポロジカル相が生み出され、異常ホール伝導度が量子化される異常量子ホール系となる。この現象は理論的に早くから指摘されており [16, 47]、トポロジカル絶縁体に磁性不純物をドーピングした物質において実験的な観測もされている [46]。さらに、このような、伝導電子に空間反転対称性が破れたスピン軌道相互作用 $\sim (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma})^z$ が働く系では、電場によって伝導電子のスピン分極が生じるが、このスピン分極が磁化に及ぼすトルクはスピン軌道トルク (Spin Orbit Torque (SOT)) [48–79] と呼ばれ、盛んに研究されている。また、通常はスピン軌道相互作用の効果を考慮せずに議論されてきたスピン移行トルク（磁化の空間微分を含み、角運動量保存則により磁壁を移動させるトルク、Spin-Transfer Torque, STT）[80, 81] がトポロジカル絶縁体表面でどのように生じるかも興味深い問題である。実際、トポロジカル絶縁体表面のスカーマيون（その方向全体が球を覆うように空間変化する磁化の集まり）についても議論されており [82–87]、その駆動を考えるためにも磁化の空間変化を考慮してスピントルクを理論的に調べることは重要であると思われる。

これらの物理現象は、波数の一次の範囲（線形分散モデル）で文献 [88] で統一的に議論されている。

まず、磁化の歳差運動の減衰を表すギルバート・ダンピングとスピン軌道トルク、電気伝導などが等価な現象である（それぞれの現象を特徴付ける量が係数を除いて互いに等しく、化学ポテンシャル依存性は全く等しくなる）ことが導かれている。このことを見るために、まず、以下のように表される磁化の時間変化に由来する伝導電子のスピン分極を考える。

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \alpha_{xx} \dot{\mathbf{u}} + \alpha_{xy} (n_z \hat{z} \times \dot{\mathbf{u}}). \quad (1.7)$$

ただし、ここでは、磁化の方向を表す単位ベクトル \mathbf{n} が z 方向から微小量 \mathbf{u} だけずれた状況を考えて、 $\mathbf{n} = n_z \hat{z} + \mathbf{u}$ 、 $|\mathbf{u}| \ll 1$ 、 $\mathbf{u} = (u_x, u_y, 0)$ 、 $n_z = \pm 1$ とした。ここで、伝導電子のスピン分極に由来する磁化 \mathbf{M} に対するスピントルク \mathbf{t} が、磁化を用いて

$$s_0 \mathbf{t} = \mathbf{M} \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \quad (1.8)$$

と表されることから、 α_{xx} は、ギルバート・ダンピングと呼ばれる磁化の歳差運動の減衰に比例する量であり、 α_{xy} はスピンの大きさ S の変化を表すものであることが導かれる。ここで、磁化 \mathbf{M} は、 s 電子（伝導電子）と d 電子（局在電子）の間の s - d 相互作用の係数 J_{sd} と局在スピン \mathbf{S} の積によって表されるものである。また、 $s_0 = S/a^2$ であり、 a は格子定数である。

さらに、電場によってスピン分極が生じる効果（磁化がない場合にはエーデルシュタイン効果と呼ばれる）は以下のように表される。

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \kappa_{xx} \mathbf{E} + \kappa_{xy} (n_z \hat{z} \times \mathbf{E}). \quad (1.9)$$

このスピン分極からもスピントルクが生じるが、これが前述したスピン軌道トルクである。

また、電場によって電流が生じる現象は電気伝導であるが、この効果は以下のように表される。

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \sigma_{xx} \mathbf{E} + \sigma_{xy} (n_z \hat{z} \times \mathbf{E}). \quad (1.10)$$

右辺の第 1 項は電場方向に流れる電流、第 2 項は電場と垂直方向に流れる電流を表すものであり、後者の現象は異常ホール効果と呼ばれる（磁場によって電流が曲がる効果が正常ホール効果である）。

文献 [88] では、スピンと速度の等価性からこれらの現象の間の等価性が導かれており、以下のような表式が示されている。

$$(ev_F)^2 \alpha_{xx} = ev_F \kappa_{xy} = \sigma_{xx}, \quad (1.11)$$

$$(ev_F)^2 \alpha_{xy} = ev_F \kappa_{xx} = \sigma_{xy}. \quad (1.12)$$

このような関係は線形分散モデルで成立する特殊な関係であり、例えば、化学ポテンシャルの大きさをどのように変化させても電気伝導度とスピン軌道トルクの定量的な関係を変えることはできないことを表している。

また、磁化の面内成分があったとしても、それが静的で一様であれば物理量に影響を与えない（例えば、電流やトルクの一様面内磁化による異方性が現れない）ことも線形分散モデルの特徴である。この性質は以下のような二つの解釈によって理解できる。まず、線形ディラック電子と一様面内磁化との結合を考えると、磁化の効果はディラック点のシフトとなる（図 1.3）。しかし、物理量の計算では全波数の和をとるため、波数の平行移動は結果を変えない。

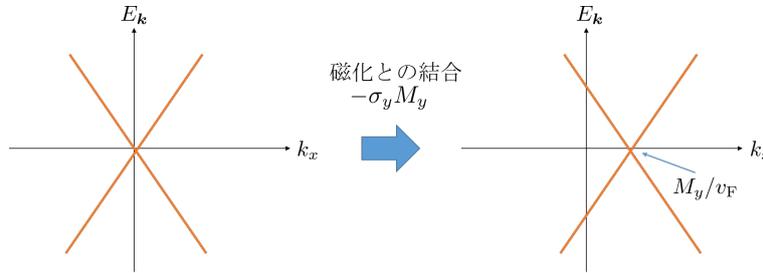


図 1.3: 一様面内磁化によるディラック点のシフト。

もう一つの解釈はゲージ不変性によるものである。スピンと速度の等価性により、スピンと結合する磁化は、電流と結合するベクトルポテンシャルと等価である。磁場の形でなくベクトルポテンシャルそのものが物理量の係数に直接現れればゲージ不変性を破ることを考慮すると、もしも一様静的な磁化が物理量に影響を与えるとすると、これは磁化とベクトルポテンシャルの等価性から直ちにゲージ不変性の破れとなる。したがって、一様静的な面内磁化が物理量に影響を与えることはなく、一様静的な面内磁化に由来する異方性は生じない。

このゲージ不変性の議論は、磁化の空間微分を含むスピントルクの表式にも影響を与える。磁化の空間微分は磁場と対応する形でしか残らず、以下のようにまとまる（図 1.4）。

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \text{sgn}(M_z) e p \{ -\mathbf{A} \mathbf{E} + B(\hat{z} \times \mathbf{E}) \} p H, \quad (1.13)$$

$$\langle \mathbf{t} \rangle = (a^2 e / S) \{ -\mathbf{A} \mathbf{E} + B(\hat{z} \times \mathbf{E}) \} \text{div} \mathbf{u}. \quad (1.14)$$

ここで $H = (\nabla \times \mathbf{A})^z$ 、 $p = ev_F / M$ とした。この結果によると、磁化の空間微分を含むスピントルクは、縦磁気抵抗と正常ホール係数と等価な形のスピントルクの形にまとまり、スピン軌道相互作用が働いていない通常の強磁性体で生じていたスピン移行トルク $-(\mathbf{v}_s^0 \cdot \nabla) \mathbf{n}$ や β トルク $(\beta \mathbf{n} \times (\mathbf{v}_s^0 \cdot \nabla) \mathbf{n})$ は生じないように見える。これらのトルクは磁壁の駆動を引き起こすものとして考えられてきたトルクである。

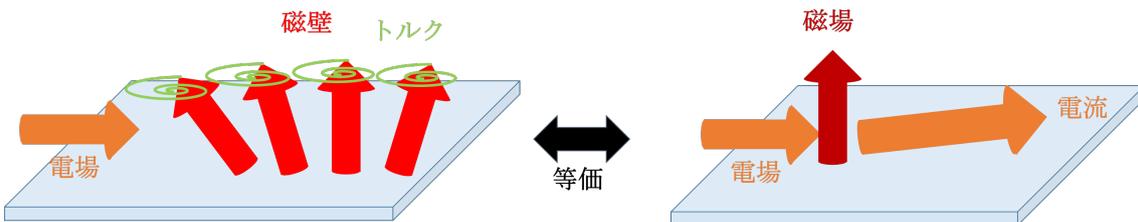


図 1.4: 線形分散モデルにおける、空間変化する磁化に与える電流によるスピントルクと磁場中での電気伝導の等価性。

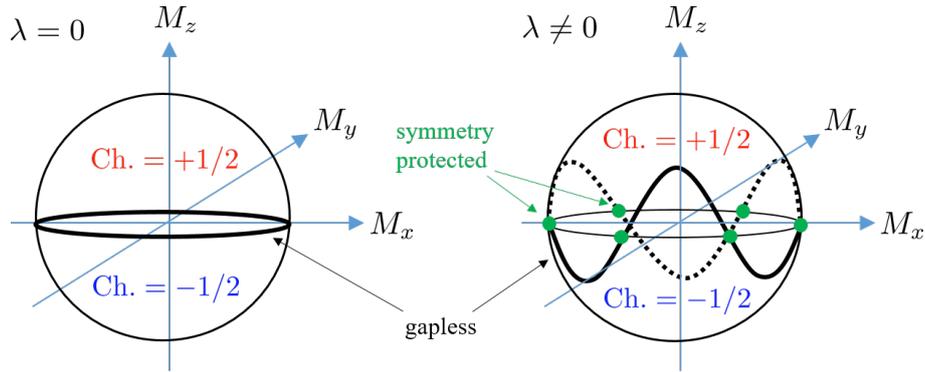


図 1.5: ヘキサゴナル・ワーピング項がある場合のギャップレス（ディラック点が生じる）条件。緑の六個の点は対称性で保護されたギャップレス点であり、モデル・パラメータの値によって変化しない。

その後、波数の高次の項がスピントロニクス現象に与える影響について調べられている。中心的に調べられているのは波数の三次の項の効果である。電気伝導度とエーデルシュタイン係数の非等価性 [89, 90]、スピン軌道トルクの異方性 [91] など線形分散モデルでは現れなかった効果が理論的に指摘されている。また、最も大きな特徴は、面内磁化によってもギャップが開き、磁化の面内角度によって異常ホール伝導度の量子化の符号が振動するようにふるまうことである [92, 93]。これは図 1.5 によって理解することが出来る。磁化の向きを表す球面においてギャップが閉じる線は、線形分散モデルの場合には赤道になるが、波数の三次の項がある場合には赤道付近で振動するような閉曲線になるため、磁化を面内で回転させると、チャーン数が正の領域と負の領域を行き来する。これらの先行研究の結果は非磁性の場合もしくは磁化の面内成分による電気伝導とスピン軌道トルクに対する効果を主に扱ったものであるが、磁化の面直成分がこれらの現象にどのような影響を与えるかは調べられていない。

また、空間変化する磁化に与える電流によるスピントルクについても最近調べられており [95]、波数の三次の項の摂動的な効果によってスピン移行トルクが現れたような結果となっている。しかし、スピン移行トルクをそれ以外のトルクとどのように区別するかは対称性の観点から再考する必要があるため、本論文ではそのような対称性の議論を行う。このような議論は、トルクによって引き起こされる物理現象（磁壁駆動、マグノンのドップラーシフト、スカーミオン駆動など）を理解するために重要であり、スピン軌道相互作用が無い場合の結果とは大きく異なる性質が導かれる。また、波数の三次の項が大きい場合にトルクの特徴がどのように変わるかを調べることも興味深い課題である。

一方で波数の二次の項についてはあまり調べられておらず、最近そのようなモデルにおいて磁化の面内成分がディラック点付近で tilted Dirac cone（傾いた線形ディラック分散）を生じさせることに着目して異方性磁気抵抗効果（Anisotropic Magnetoresistance, AMR）について理論的に調べられたが [94]、AMR と横伝導度の対称成分（Planer Hall Effect, PHE）が磁化の面内角度に関して異なる振幅を示す結果が得られており、本論文での対称性に基づく議論とは矛盾する結果となっている。また、本論文ではスピン軌道トルクについても調べ、磁化の面直成分の効果も考慮することで、粒子正孔対称性が破れた磁性トポロジカル絶縁体表面におけるスピントロニクス現象について統一的理解を目指す。

また、波数の二次を取り入れたディラック系と類似した系であるラシュバ系での異常ホール効果 [96, 97]、異方性磁気抵抗効果 [98, 99]、スピン軌道トルク [98, 100] については微視的理論によって調べられている。特に重要なことは、化学ポテンシャルが十分大きい場合（ディラック的な特徴が現れる場合には、そのパーティクルのバンド（伝導帯）に位置する場合）には、梯子型のパーテックス補正を考慮すると電気伝導度とスピン軌道トルクから磁化依存性が完全に消えることである（ただし、異常ホール効果に関しては不純物線が交差するようなファイマン図形の効果も考えることで有限に残ることも示されている [97]）。これらの研究は異常ホール効果を除いては限定的なパラメータ領域で研究されているものであり、ディラック系のホールのバンド（価電子帯）もしくはギャップ中に対応する領域に化学ポテン

シャルが位置する場合のラシュバ系の電気伝導とスピン軌道トルクは調べられていない。モデル・パラメータを用いたこれらの分類についての詳細な議論は本文で行う。

1.3 本論文の目的

本論文では、磁性トポロジカル絶縁体において波数の高次の効果まで考慮した表面電子がスピントロニクス現象にどのような影響を与えるかを微視的理論に基づいて調べる。

まず、フェルミ面を六回対称にひずませる波数の三次の項を考慮した系について、一様面直磁化との結合がある場合の電気伝導度、スピン軌道トルク、および磁化の空間変化がある場合のスピントルクについて微視的に調べる。特に、磁化の空間微分を含むスピントルクについては対称性に加えて、本論文でビューポイントと定義する新しい概念（代数的関係）を用いて先行研究の結果を解釈し直し、先行研究で摂動的に考えられてきた波数の三次の項を非摂動的に扱って計算を行う。そして、回転対称性が三回に落ちたことによってどのような新しい物理量が現れるかを対称性の観点から明らかにし、その物理量を計算する。

また、粒子正孔対称性を破る波数の二次の項を考慮した系における電気伝導度とスピン軌道トルクの磁化面内方向依存性について調べ、特に線形分散モデルでは現れなかった物理量の異方性が現れるかを調べる。また、類似系であるラシュバ系についても、これまで考えられてこなかったパラメータ領域（ディラック系におけるギャップ中、あるいは、価電子帯に対応する領域に化学ポテンシャルが位置する場合）も含めて計算を行い、ディラック系との比較を行う。

第 2 章

ヘキサゴナル・ワーピング項の効果

この章では、ディラック系の連続回転対称性を破り、三重回転対称性に低下させる項であるヘキサゴナル・ワーピング項の効果を取り入れて、電気伝導、スピン軌道トルク、磁化の空間微分を含むスピントルクの計算を行う。

2.1 モデル

2.1.1 ハミルトニアン

まず、ハミルトニアンとしては以下のようなものを考える。

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} [v_{\text{F}}(k_y \sigma^x - k_x \sigma^y) + \lambda k_x (k_x^2 - 3k_y^2) \sigma^z - \mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\sigma}] c_{\mathbf{k}} + V_{\text{imp}}. \quad (2.1)$$

$c_{\mathbf{k}}$ ($c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$) は、電子の消滅 (生成) 演算子である。大括弧内の第一項と第二項はトポロジカル絶縁体表面の伝導電子を記述する項であり、線形ディラック分散を記述する項 (形式的には、ラシュバ型スピン軌道相互作用と同じ形) とヘキサゴナル・ワーピングを生じさせる項、第三項は磁化 \mathbf{M} と伝導電子スピン $\boldsymbol{\sigma}$ の結合、最後の項は伝導電子に対する不純物散乱を表す項である。この章全体を通して、磁化 \mathbf{M} は以下のような形を考える。

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = [M + \delta M(\mathbf{r})] \mathbf{n}(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \pm \hat{z} + \delta \mathbf{n}(\mathbf{r}) = (\sin \theta_M \cos \phi_M, \sin \theta_M \sin \phi_M, \cos \theta_M). \quad (2.3)$$

ここで、 M は空間変化しない定数であり、 \mathbf{n} は磁化の方向を表す単位ベクトルである。さらに、 $\delta \mathbf{n}(\mathbf{r}) = (n_x, n_y, 0)$ とする。また、空間変化は緩やかであるとして、 $|\delta M(\mathbf{r})| \ll |M(\mathbf{r})|$, $|\delta \mathbf{n}(\mathbf{r})| \ll 1$ の条件のもとで計算を行う。

また、波数について以下のような極座標表示も用いる。

$$\mathbf{k} = k(\cos \phi_{\mathbf{k}}, \sin \phi_{\mathbf{k}}). \quad (2.4)$$

このモデルにおいてディラック分散のギャップが消える条件 (ギャップレス条件) は、

$$M_z = -\frac{\lambda}{v_{\text{F}}^3} M_y (M_y^2 - 3M_x^2), \quad (2.5)$$

となり、図 1.5 のように図示される。右辺はヘキサゴナル・ワーピング項の係数に依存しており、磁化の方向を表す球面の赤道付近を振動する閉曲線となる。また、 $\lambda = 0$ でギャップレス条件は $M_z = 0$ (球面の赤道部分) に帰着する。 $\lambda \neq 0$ であっても $\sin 3\phi_M = 0$ となる場合は $M_z = 0$ がギャップレス条件となる。この磁化の角度 ($\phi_M = n\pi/3$, $\theta_M = 0$) の場合は他のモデル・パラメータに依らずにギャップレスとなり、このギャップレス状態は対称性に保護されている。

以下では磁化の方向を面直の場合に限り、常にギャップが開いている場合を考える。この場合のフェルミ面の枚数 N_{FS} は、 $\mu' \equiv \mu/\sqrt{v_{\text{F}}^3/\lambda}$ と $M'_z \equiv M_z/\sqrt{v_{\text{F}}^3/\lambda}$ を用いて特徴づけることができる (図 2.1)。図に示したように、この

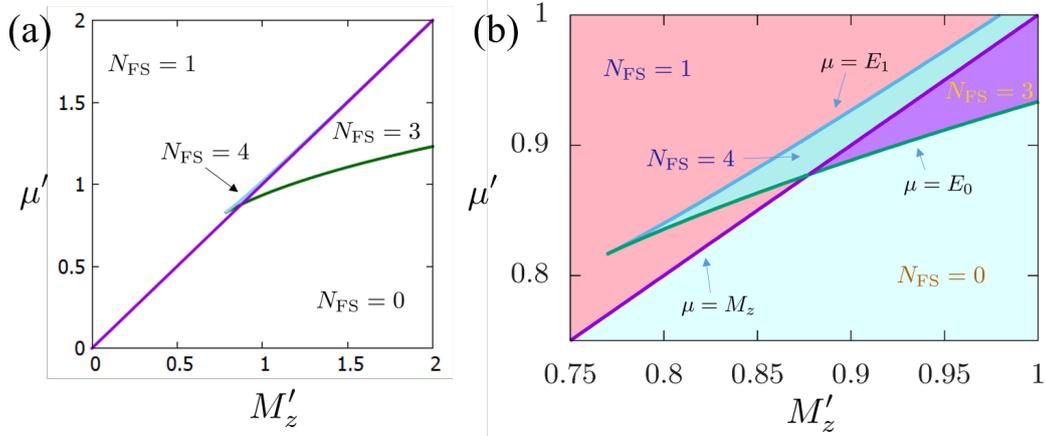


図 2.1: μ' - M'_z 平面におけるフェルミ面の枚数を表す図 (a) $0 < \mu' < 2$, $0 < M'_z < 2$, (b) $0.75 < \mu' < 1$, $0.75 < M'_z < 1$.

モデルではフェルミ面の枚数は0枚、1枚、3枚、4枚 ($N_{\text{FS}} = 0, 1, 3, 4$) の場合があり、フェルミ面の枚数はモデル・パラメータによって変わる (付録 A を参照)。 $N_{\text{FS}} = 3, 4$ となるのはヘキサゴナル・ワーピング項が非常に大きい場合なので、本論文では $N_{\text{FS}} = 1$ (金属領域)、 $N_{\text{FS}} = 0$ (絶縁体領域) の場合を扱う。PbBi₂Te₄ はヘキサゴナル・ワーピング項の効果が大きく現れる物質であるが、モデル・パラメータは $v_{\text{F}} = 0.5[\text{eV}\text{\AA}]$, $\lambda = 55[\text{eV}\text{\AA}^3]$ と見積もられており [37]、 M を $0.01[\text{eV}]$ 程度とすると、 M'_z は 0.2 程度である。

また、典型的なフェルミ面は図 2.2 のようになる。面直磁化によって時間反転対称性が破れているため、フェルミ面は六回対称 (ヘキサゴナル) ではなく、三回対称 (トリゴナル) になっている。(a) がフェルミ面が1枚、(b) がフェルミ面が3枚、(c) がフェルミ面が4枚の場合であり、これらの結果に用いたパラメータの値はフェルミ面の枚数に関する相図の結果 (図 2.1) と整合している。

さらに、速度は以下のようになり、ヘキサゴナル・ワーピング項に由来する v'_i によってスピンと速度の等価性は破

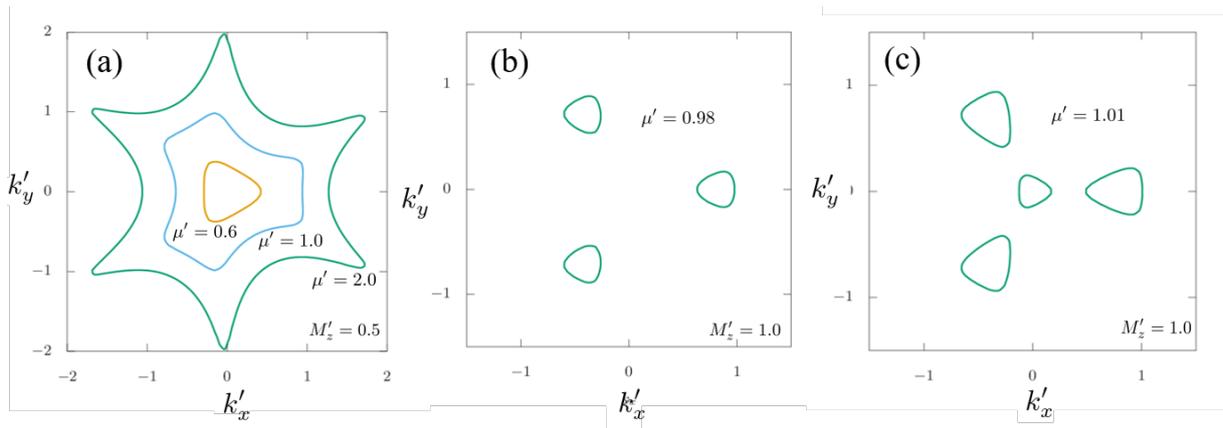


図 2.2: ヘキサゴナル・ワーピング項があり面直磁化と結合したディラック電子のフェルミ面。(a) $\mu' = 0.6, 1.0, 2.0$, $M'_z = 0.5$, (b) $\mu' = 0.98$, $M'_z = 1.0$, (c) $\mu' = 1.01$, $M'_z = 1.0$. フェルミ面の枚数はそれぞれ1、3、4である。また、 $k'_i \equiv v_{\text{F}} k_i / (\sqrt{v_{\text{F}}^3 / \lambda})$ とした。

れることが分かる。

$$v_i = v_i^\alpha \sigma^\alpha, \quad (2.6)$$

$$v_i^\alpha \equiv v_F \varepsilon_{\alpha i} + \delta_{\alpha z} v_i', \quad (2.7)$$

$$(v_x', v_y') = 3\lambda k^2 (\cos 2\phi_{\mathbf{k}}, -\sin 2\phi_{\mathbf{k}}). \quad (2.8)$$

2.1.2 グリーン関数

電子のグリーン関数は以下のように与えられる。

$$G_{\mathbf{k}}^R = (g_0^R + g_x \sigma^x + g_y \sigma^y + g_z^R \sigma^z) (D_{\mathbf{k}}^R)^{-1}. \quad (2.9)$$

ここで

$$g_0^R = \mu + i\Gamma_0, \quad (2.10)$$

$$g_x = v_F k \sin \phi_{\mathbf{k}}, \quad (2.11)$$

$$g_y = -v_F k \cos \phi_{\mathbf{k}}, \quad (2.12)$$

$$g_z^R = \lambda k^3 \cos 3\phi_{\mathbf{k}} - M_z + i\Gamma_z, \quad (2.13)$$

$D_{\mathbf{k}}^R = (g_0^R)^2 - g_x^2 - g_y^2 - (g_z^R)^2$ とした。平均化された不純物の効果は、ボルン近似の範囲で以下のようにまとまる。

$$\Gamma_0 = \frac{n_i u_0^2}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\phi \operatorname{Im} \frac{k\mu}{(\mu - i0)^2 - E_{\mathbf{k}}^2}, \quad (2.14)$$

$$\Gamma_z = -\frac{n_i u_0^2}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\phi \operatorname{Im} \frac{k(\lambda k^3 \cos 3\phi_{\mathbf{k}} - M_z)}{(\mu - i0)^2 - E_{\mathbf{k}}^2}. \quad (2.15)$$

ここで、自己エネルギーの実部は化学ポテンシャル μ および磁化 M に繰り込んだ。この論文では、不純物ポテンシャルの大きさは弱いものとして、 $\gamma_0 = \frac{n_i u_0^2}{4(hv_F)^2}$ の最低次の寄与のみを考慮する。また、本論文では、プロットを行う際に、系を特徴づける二つの無次元量 $\tilde{\lambda} = \lambda M_z^2 / v_F^2$, $\tilde{\mu} = \mu / M_z$ を用いる。 $\tilde{\Gamma}_0 \equiv \Gamma_0 / |M_z|$ と $\tilde{\Gamma}_z = \Gamma_z / M_z$ の $\tilde{\mu}$ 依存性を図 2.3 に示す。黒い点線が $\tilde{\lambda} = 0$, 赤い線が $\tilde{\lambda} = 0.01$, 緑の線が $\tilde{\lambda} = 0.05$, 青い線が $\tilde{\lambda} = 0.1$ の場合である。 $\tilde{\mu}$ が大きい場合には、ヘキサゴナル・ワーピング項の効果が大きくなり、状態密度が抑えられることからダンピングの大きさが抑えられている。また、 $g_0^2 > g_z^2$ に注意すると Γ_0 の大きさは常に Γ_z より大きくなり、グリーン関数の分母の虚部 $2g_0\Gamma_0 + 2g_z\Gamma_z$ の符号は、化学ポテンシャルの符号で決まることが分かる。また、 $\mu \rightarrow |M_z| + 0$ の極限で、

$$\tilde{\Gamma}_0, \tilde{\Gamma}_z \rightarrow \gamma_0, \quad (2.16)$$

となり、線形分散モデルの値に一致する。

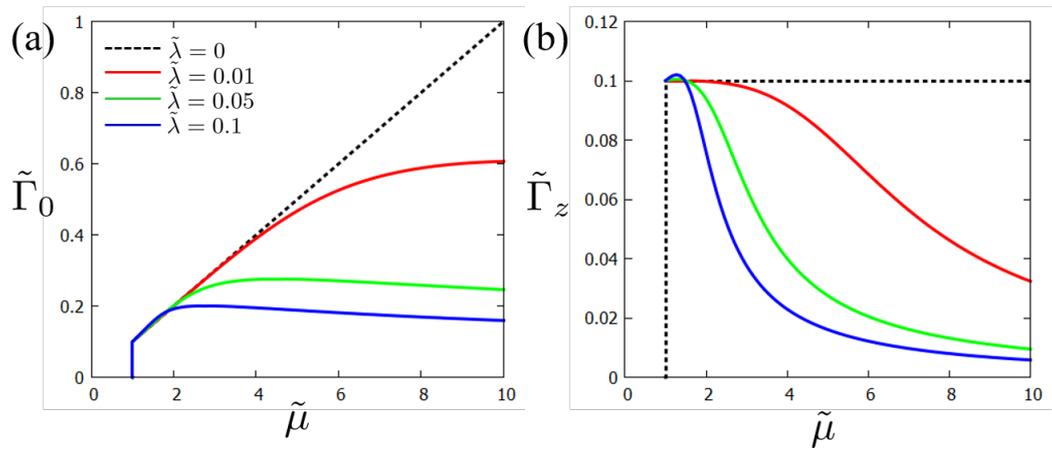


図 2.3: (a) $\tilde{\Gamma}_0$, (b) $\tilde{\Gamma}_z$ の $\tilde{\mu}$ 依存性。 $\tilde{\lambda}$ の値は 0 (黒い点線)、0.01 (赤)、0.05 (緑)、0.1 (青)。

2.2 電気伝導度とスピントルクの定式化

強磁性磁化に対するスピントルクは以下のように、電子のスピン密度を計算することによって得られる。

$$s_0 \mathbf{t} = \mathbf{M} \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \simeq M n_z \hat{z} \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle. \quad (2.17)$$

ここで、ギルバート・ダンピング α とスピンのくりこみ δS は以下のように、磁化の時間微分により生じる項として定義される。

$$\mathbf{t} = -\alpha(\mathbf{n} \times \dot{\mathbf{n}}) - \frac{\delta S}{S} \dot{\mathbf{n}}. \quad (2.18)$$

それぞれの項が磁化の歳差運動の減衰（ギルバート・ダンピング）、スピンのくりこみを表すことは、トルクが磁化の時間微分を与えることから導かれる。ここで、時間依存する磁化 \mathbf{n} に対するスピン応答を次のような表式で考える。

$$\langle \sigma^\alpha \rangle = \frac{M_z^2}{2\pi\hbar v_F^2} (A_1 \delta_{\alpha\beta} + B_1 \varepsilon_{\alpha\beta}) \dot{n}^\beta. \quad (2.19)$$

このとき、式 (2.17) を考慮することによって、 A_1 と B_1 は、 α と δS と以下のように関係することが分かる。

$$\alpha = \frac{M_z^2 a^2}{S(2\pi v_F)^2} A_1, \quad (2.20)$$

$$\frac{\delta S}{S} = \frac{M_z^2 a^2}{S(2\pi)^2} (\text{sgn} M) B_1. \quad (2.21)$$

また、電流誘起スピン分極（スピン軌道トルク）は以下の式で計算できる。

$$\langle \sigma^\alpha \rangle = \frac{e^2}{2\pi\hbar v_F} (A_2 \varepsilon_{\alpha j} + n_z B_2 \delta_{\alpha j}) E_j. \quad (2.22)$$

A_2 は非磁性の場合にはエーデルシュタイン効果の大きさを表す量である。磁化の面直成分が有限の場合には、第二項（電場方向のスピン分極）も対称性から許される。また、この現象に対する相反現象は、磁化の時間微分によって誘起される電流である。さらに、電気伝導度テンソル σ_{ij} ($j_i = \sigma_{ij} E_j$) は以下の式で計算できる。

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} (A_3 \delta_{ij} + B_3 \varepsilon_{ij}). \quad (2.23)$$

A_3 は縦伝導度の大きさ、 B_3 は異常ホール伝導度の大きさを表している。これらの効果は、本質的には、電場もしくは磁化の時間微分によって誘起される電流もしくはスピン分極であるので、以下のように統一的に表すことが出来る。

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \left\{ \frac{M}{v_F^2} (-A_1 \dot{\mathbf{n}} + B_1 (n_z \hat{z} \times \dot{\mathbf{n}})) + \frac{e}{v_F} (A_2 (\hat{z} \times \mathbf{E}) + B_2 n_z \mathbf{E}) \right\}, \quad (2.24)$$

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \left\{ \frac{eM}{v_F} (A_2 (\hat{z} \times \dot{\mathbf{n}}) + B_2 n_z \dot{\mathbf{n}}) + e^2 (A_3 \mathbf{E} - B_3 (n_z \hat{z} \times \mathbf{E})) \right\}. \quad (2.25)$$

ここに現れる係数は、線形応答理論によって計算することができる。これらのグリーン関数を用いた表式は、以下の量を定義することによって簡潔にまとめることが出来る。

$$\langle \hat{P} : \hat{Q} \rangle^{\text{surf}} = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \text{tr}[\hat{P} G^R \hat{Q} G^A] - \text{Re}[\hat{P} G^R \hat{Q} G^R] \right\}, \quad (2.26)$$

$$\langle \hat{P} : \hat{Q} \rangle^{\text{sea}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\epsilon \left\{ \text{tr}[(\partial_\epsilon G^R \hat{P} G^R \hat{Q})] - \text{tr}[(\partial_\epsilon G^A \hat{P} G^A \hat{Q})] - (\hat{P} \leftrightarrow \hat{Q}) \right\}. \quad (2.27)$$

一つ目の式は Fermi-surface term と呼ばれ、Fermi 面による寄与を表すものであり、二つ目の式は Fermi-sea term と呼ばれ、Fermi 海による寄与を表すものである。ただし、Fermi-sea term の一部分は振動数に関する部分積分に

よって Fermi-surface term になることもあるため、この分類はそのような任意性を含んでいる。このとき、各係数の Fermi-surface term は

$$v_F^2 \langle \sigma^\alpha : \sigma^\beta \rangle^{\text{surf}} = A_1 \delta_{\alpha\beta} + B_1^{\text{surf}} \epsilon_{\alpha\beta}, \quad (2.28)$$

$$v_F \langle \sigma^\alpha : v_j \rangle^{\text{surf}} = A_2 \epsilon_{\alpha j} - B_2^{\text{surf}} \delta_{\alpha j}, \quad (2.29)$$

$$v_F \langle v_i : \sigma^\beta \rangle^{\text{surf}} = -A_2 \epsilon_{i\beta} + B_2^{\text{surf}} \delta_{i\beta}, \quad (2.30)$$

$$v_F \langle v_i : v_j \rangle^{\text{surf}} = A_3 \delta_{ij} + B_3^{\text{surf}} \delta_{ij}, \quad (2.31)$$

となり、Fermi-sea term は

$$v_F^2 \langle \sigma^\alpha : \sigma^\beta \rangle^{\text{sea}} = B_1^{\text{sea}} \epsilon_{\alpha\beta}, \quad (2.32)$$

$$v_F \langle \sigma^\alpha : v_j \rangle^{\text{sea}} = -B_2^{\text{sea}} \delta_{\alpha j}, \quad (2.33)$$

$$v_F \langle v_i : \sigma^\beta \rangle^{\text{sea}} = B_2^{\text{sea}} \delta_{i\beta}, \quad (2.34)$$

$$v_F \langle v_i : v_j \rangle^{\text{sea}} = B_3^{\text{sea}} \delta_{ij}, \quad (2.35)$$

となる。また、

$$\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{v}}^0 + \hat{\mathbf{v}}', \quad (2.36)$$

$$\hat{v}_i^0 = v_F \epsilon_{\alpha i} \sigma^\alpha, \quad (2.37)$$

$$\hat{v}_i' = v_i' \sigma^z, \quad (2.38)$$

として

$$v_F \langle \sigma^\alpha : \hat{v}_i' \rangle^{\text{surf}} = \bar{A} \epsilon_{i\alpha} + \bar{B}^{\text{surf}} \delta_{i\alpha}, \quad (2.39)$$

$$v_F \langle \sigma^\alpha : \hat{v}_i' \rangle^{\text{sea}} = -\bar{B}^{\text{sea}} \delta_{i\alpha}, \quad (2.40)$$

$$v_F \langle \hat{v}_i' : \hat{v}_i' \rangle^{\text{surf}} = \bar{\bar{A}} \delta_{ij}, \quad (2.41)$$

と、 \bar{A} , $\bar{\bar{A}}$, \bar{B}^{surf} , B^{sea} を定義すると、 A_2 , A_3 , B_2 , B_3 は

$$A_2 = A_1 + \bar{A}, \quad (2.42)$$

$$A_3 = A_1 + 2\bar{A} + \bar{\bar{A}}, \quad (2.43)$$

$$B_2 = B_1 + \bar{A}, \quad (2.44)$$

$$B_3 = B_1 + 2\bar{B}, \quad (2.45)$$

と表せる。

また、面内成分が空間的に変化する磁化と電場の組み合わせに対するスピン分極の応答についても、磁化の面内成分とその微分の一次までを考慮して計算する。この応答は一般に以下のように表されるスピン移行トルク（第1項）と β -トルク（第2項）を含む。

$$\mathbf{t}_{\text{STT}} = -(1 + \beta \mathbf{n} \times) (\mathbf{v}_s \cdot \nabla) \mathbf{n}. \quad (2.46)$$

ここで、 \mathbf{v}_s は電場によって誘起されたスピン流である。スピン軌道相互作用が弱い系においてはこれらが磁壁やスカーマイオンといった磁化構造を動的に変化（駆動）させるために重要なトルクであると考えられている。一方で、スピン軌道相互作用が強い極限である線形分散モデルの場合には、以下のようなスピン軌道トルクに対する微分補正の形のトルクが現れることが示されている。

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}} = (c + c' \hat{\mathbf{z}} \times) (\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{E}) (\nabla \cdot \mathbf{u}). \quad (2.47)$$

このような形にまとまるのは、電流とスピン、および、それらと結合するゲージ場と面内磁化の等価性から、トルクに対してゲージ不変性の効果が現れるためである。次の節では、これらのトルクが互いにどのような関係にあるのかを対称性の観点から議論する。

このような磁化の空間微分を含むトルクはグリーン関数を用いて以下のように表すことができる。

$$\langle \hat{\sigma}_\perp^\alpha \rangle = \frac{1}{\pi} e M K_{ij}^{\alpha\beta} E_i \nabla_j n^\beta, \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} K_{ij}^{\alpha\beta} &= \frac{1}{2\pi i} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \{ \text{tr}[\sigma^\alpha (G^R v_j G^R \sigma^\beta G^R) v_i G^A] - [\sigma^\alpha G^R v_i (G^A \sigma^\beta G^A) v_j G^A] \}, \\ &= \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr}[\sigma^\alpha (G^R v_j G^R \sigma^\beta G^R) v_i G^A]. \end{aligned} \quad (2.49)$$

スピンのトレースをとると、以下の表式を得る：

$$K_{ij}^{\alpha\beta} = \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \frac{L_{ij}^{\alpha\beta}}{(DR)^3 D^A}, \quad (2.50)$$

$$L_{ij}^{\alpha\beta} = \sum_{n=1}^8 L_n (\Delta_n)_{ij}^{\alpha\beta}. \quad (2.51)$$

Δ_n はトルクの形を決める関数であり、次節で対称性の観点から議論する。係数 L_n の表式の一例は式 (2.115)～式 (2.128) で与えられる。

2.3 対称性とビューポイント

前節で紹介したスピン移行トルクやスピン軌道トルクに対する微分補正といった、磁化の空間微分を含むトルクの表式は、以下のようなビューポイントと呼ばれる概念を導入することによって統一的に理解することが出来る。まず、(面内の)連続回転対称性のある系で許されるトルクを class 1 とし、三重回転対称な系で許されるトルクを class 2 とする。また、磁化の単位ベクトルの面内成分 (n_x, n_y) 、面内磁化に対する空間微分 ∇ 、電場による力 $\mathbf{F} = e\mathbf{E}$ の3つのベクトルを組み合わせた形で1つのベクトル(トルク)を作ることを考えると、電場の方向がトルクの方を決める場合(SOT viewpoint)、面内磁化の方向がトルクの方を決める場合(STT viewpoint)、空間微分の方向がトルクの方を決める場合(GRT viewpoint)が考えられる。SOT viewpoint は Spin Orbit Torque, STT viewpoint は Spin Transfer Torque, GRT viewpoint は GRadienT に由来する名称である。

まず、class 1 について考える。それぞれの viewpoint で許されるトルクの以下の6種類ずつのトルクである。

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^1 = (\nabla_x n_x + \nabla_y n_y)(F_x, F_y), \quad (2.52)$$

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^2 = n_z(\nabla_x n_x + \nabla_y n_y)(-F_y, F_x), \quad (2.53)$$

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^3 = (\nabla_y n_x - \nabla_x n_y)(-F_y, F_x), \quad (2.54)$$

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^4 = n_z(\nabla_y n_x - \nabla_x n_y)(F_x, F_y), \quad (2.55)$$

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^5 = (\nabla_x n_y + \nabla_y n_x)(F_y, F_x) + (\nabla_x n_x - \nabla_y n_y)(F_x, -F_y), \quad (2.56)$$

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^6 = n_z\{(\nabla_x n_y + \nabla_y n_x)(-F_x, F_y) + (\nabla_x n_x - \nabla_y n_y)(F_y, F_x)\}, \quad (2.57)$$

$$\mathbf{t}_{\text{STT}}^1 = (F_x \nabla_x + F_y \nabla_y)(n_x, n_y), \quad (2.58)$$

$$\mathbf{t}_{\text{STT}}^2 = n_z(F_x \nabla_x + F_y \nabla_y)(-n_y, n_x), \quad (2.59)$$

$$\mathbf{t}_{\text{STT}}^3 = (F_x \nabla_y - F_y \nabla_x)(n_y, -n_x), \quad (2.60)$$

$$\mathbf{t}_{\text{STT}}^4 = n_z(F_x \nabla_y - F_y \nabla_x)(n_x, n_y), \quad (2.61)$$

$$\mathbf{t}_{\text{STT}}^5 = (F_x \nabla_x - F_y \nabla_y)(n_x, -n_y) + (F_x \nabla_y + F_y \nabla_x)(n_y, n_x), \quad (2.62)$$

$$\mathbf{t}_{\text{STT}}^6 = n_z\{(F_x \nabla_x - F_y \nabla_y)(n_y, n_x) - (F_x \nabla_y + F_y \nabla_x)(n_x, -n_y)\}, \quad (2.63)$$

$$\mathbf{t}_{\text{GRT}}^1 = (\nabla_x, \nabla_y)(F_x n_x + F_y n_y), \quad (2.64)$$

$$\mathbf{t}_{\text{GRT}}^2 = n_z(-\nabla_y, \nabla_x)(F_x n_x + F_y n_y), \quad (2.65)$$

$$\mathbf{t}_{\text{GRT}}^3 = (-\nabla_y, \nabla_x)(F_y n_x - F_x n_y), \quad (2.66)$$

$$\mathbf{t}_{\text{GRT}}^4 = -n_z(\nabla_x, \nabla_y)(F_y n_x - F_x n_y), \quad (2.67)$$

$$\mathbf{t}_{\text{GRT}}^5 = (\nabla_y, \nabla_x)(F_x n_y + F_y n_x) + (\nabla_x, -\nabla_y)(F_x n_x - F_y n_y), \quad (2.68)$$

$$\mathbf{t}_{\text{GRT}}^6 = n_z\{(-\nabla_x, \nabla_y)(F_x n_y + F_y n_x) + (\nabla_y, \nabla_x)(F_x n_x - F_y n_y)\}. \quad (2.69)$$

SOT viewpoint はスピン軌道トルク(SOT)に対する補正の効果を表すようなトルクの分解の仕方である。この補正は磁化の空間変化に応じて決まるものであり、 $\nabla_x n_x + \nabla_y n_y$, $\nabla_x n_y - \nabla_y n_x$, $\nabla_x n_x - \nabla_y n_y$, $\nabla_x n_y + \nabla_y n_x$ の中でどの成分が残るかによって、どのトルクが有限に残るかが変わる。

STT viewpoint は良く知られたスピン移行トルク($\mathbf{t}_{\text{STT}}^1$)と β -トルク($\mathbf{t}_{\text{STT}}^1$)を含み、電場と空間微分の方向が互いに垂直である場合に有限に残るトルク($\mathbf{t}_{\text{SOT}}^3$, $\mathbf{t}_{\text{SOT}}^4$)なども含んでいるトルクの分解の仕方である。

また、GRT viewpoint は磁化の空間変化の方向がトルクの方を決めているようなトルクの分解の仕方である。

ここで、独立なトルクの成分は $2^3 = 8$ 種類なので、上記のトルクは全て独立なものではないことに注意が必要である。実際、上記のトルクの間には以下のような 12 個の関係式がある。

$$(\mathbf{t}_{\text{SOT}}^1 + \mathbf{t}_{\text{SOT}}^3) = (\mathbf{t}_{\text{STT}}^1 + \mathbf{t}_{\text{STT}}^3) = \mathbf{t}_{\text{GRT}}^5, \quad (2.70)$$

$$(\mathbf{t}_{\text{SOT}}^1 - \mathbf{t}_{\text{SOT}}^3) = \mathbf{t}_{\text{STT}}^5 = (\mathbf{t}_{\text{GRT}}^1 + \mathbf{t}_{\text{GRT}}^3), \quad (2.71)$$

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^5 = (\mathbf{t}_{\text{STT}}^1 - \mathbf{t}_{\text{STT}}^3) = (\mathbf{t}_{\text{GRT}}^1 - \mathbf{t}_{\text{GRT}}^3), \quad (2.72)$$

$$(\mathbf{t}_{\text{SOT}}^2 + \mathbf{t}_{\text{SOT}}^4) = (\mathbf{t}_{\text{STT}}^2 + \mathbf{t}_{\text{STT}}^4) = \mathbf{t}_{\text{GRT}}^6, \quad (2.73)$$

$$(\mathbf{t}_{\text{SOT}}^2 - \mathbf{t}_{\text{SOT}}^4) = \mathbf{t}_{\text{STT}}^6 = (\mathbf{t}_{\text{GRT}}^2 + \mathbf{t}_{\text{GRT}}^4), \quad (2.74)$$

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^6 = (\mathbf{t}_{\text{STT}}^2 - \mathbf{t}_{\text{STT}}^4) = (\mathbf{t}_{\text{GRT}}^2 - \mathbf{t}_{\text{GRT}}^4). \quad (2.75)$$

したがって、上記した 18 種類のトルクの内、独立なものは 6 種類となる。これらの関係式によって、SOT viewpoint におけるトルクの成分は、STT や GRT の viewpoint におけるトルクの成分に変化させることが可能となる。

また、class 2 はそれぞれの viewpoint で以下のようなトルクが存在する。

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^7 = (\nabla_x n_y + \nabla_y n_x)(F_y, F_x) - (\nabla_x n_x - \nabla_y n_y)(F_x, -F_y), \quad (2.76)$$

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^8 = n_z \{ (\nabla_x n_y + \nabla_y n_x)(-F_x, F_y) - (\nabla_x n_x - \nabla_y n_y)(F_y, F_x) \}, \quad (2.77)$$

$$\mathbf{t}_{\text{STT}}^7 = -(F_x \nabla_x - F_y \nabla_y)(n_x, -n_y) + (F_x \nabla_y + F_y \nabla_x)(n_y, n_x), \quad (2.78)$$

$$\mathbf{t}_{\text{STT}}^8 = n_z \{ -(F_x \nabla_x - F_y \nabla_y)(n_y, n_x) - (F_x \nabla_y + F_y \nabla_x)(n_x, -n_y) \}, \quad (2.79)$$

$$\mathbf{t}_{\text{GRT}}^7 = (\nabla_y, \nabla_x)(F_x n_y + F_y n_x) - (\nabla_x, -\nabla_y)(F_x n_x - F_y n_y), \quad (2.80)$$

$$\mathbf{t}_{\text{GRT}}^8 = n_z \{ (-\nabla_x, \nabla_y)(F_x n_y + F_y n_x) - (\nabla_y, \nabla_x)(F_x n_x - F_y n_y) \}. \quad (2.81)$$

これらの間にも、以下のような関係式が存在する。

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^7 = \mathbf{t}_{\text{STT}}^7 = \mathbf{t}_{\text{GRT}}^7, \quad (2.82)$$

$$\mathbf{t}_{\text{SOT}}^8 = \mathbf{t}_{\text{STT}}^8 = \mathbf{t}_{\text{GRT}}^8. \quad (2.83)$$

SOT viewpoint, STT viewpoint, GRT viewpoint でトルクを表した場合の係数を C_n, C'_n, C''_n とすると、トルク \mathbf{t} は

$$\mathbf{t} = \sum_{n=1}^8 C_n \mathbf{t}_{\text{SOT}}^n = \sum_{n=1}^8 C'_n \mathbf{t}_{\text{STT}}^n = \sum_{n=1}^8 C''_n \mathbf{t}_{\text{GRT}}^n, \quad (2.84)$$

と表すことができる。

それぞれの係数の間関係式は以下ようになる。まず、STT viewpoint と SOT viewpoint の間関係は

$$C'_1 = \frac{C_1 + C_3}{2} + C_5, \quad (2.85)$$

$$C'_2 = \frac{C_2 + C_4}{2} + C_6, \quad (2.86)$$

$$C'_3 = \frac{C_1 + C_3}{2} - C_5, \quad (2.87)$$

$$C'_4 = \frac{C_2 + C_4}{2} - C_6, \quad (2.88)$$

$$C'_5 = \frac{C_1 - C_3}{2}, \quad (2.89)$$

$$C'_6 = \frac{C_2 - C_4}{2}, \quad (2.90)$$

となり、GRT viewpoint と SOT viewpoint の間の関係は

$$C_1'' = \frac{C_1 - C_3}{2} + C_5, \quad (2.91)$$

$$C_2'' = \frac{C_2 - C_4}{2} + C_6, \quad (2.92)$$

$$C_3'' = \frac{C_1 - C_3}{2} - C_5, \quad (2.93)$$

$$C_4'' = \frac{C_2 - C_4}{2} - C_6, \quad (2.94)$$

$$C_5'' = \frac{C_1 + C_3}{2}, \quad (2.95)$$

$$C_6'' = \frac{C_2 + C_4}{2}, \quad (2.96)$$

となる。

先行研究 [88] では、 $\lambda = 0$ でトルクは以下のように表されていた。

$$\mathbf{t} = C_1 \mathbf{t}_{\text{SOT}}^1 + C_2 \mathbf{t}_{\text{SOT}}^2. \quad (2.97)$$

この表式にはスピン移行トルクが含まれていないように見えるが、SOT viewpoint から STT viewpoint に移ると、以下のように変形することもできる。

$$\mathbf{t} = \frac{C_1}{2} (\mathbf{t}_{\text{STT}}^1 + \mathbf{t}_{\text{STT}}^3 + \mathbf{t}_{\text{STT}}^5) + \frac{C_2}{2} (\mathbf{t}_{\text{STT}}^2 + \mathbf{t}_{\text{STT}}^4 + \mathbf{t}_{\text{STT}}^6). \quad (2.98)$$

この表式にはスピン移行トルク ($\mathbf{t}_{\text{STT}}^1$) が含まれている。この結果をどう解釈するべきか（スピン移行トルクは $\lambda = 0$ で有限なのか）は、後にマグノンの分散、磁壁の移動といったトルクの物理的な効果によって議論する。

2.4 電気伝導度とスピン軌道トルク、ギルバート・ダンピング

電気伝導度とスピン軌道トルク、ギルバート・ダンピングについて、スピン空間の tr をとると以下のようにまとめることができる。まず、Fermi-surface term は

$$A_1 = 2\pi v_F^2 \langle \mu^2 - (g'_z)^2 \rangle_1, \quad (2.99)$$

$$\bar{A} = 6\pi v_F \langle K_c g'_z \rangle_1, \quad (2.100)$$

$$\bar{\bar{A}} = \pi(3\lambda)^2 \langle k^4 [\mu^2 + (g'_z)^2 - (v_F k)^2] \rangle_1, \quad (2.101)$$

$$B_1^{\text{surf}} = 4\pi \langle \Gamma_0 g'_z + \mu \Gamma^z \rangle_1, \quad (2.102)$$

$$\bar{B}^{\text{surf}} = 6\pi \Gamma_0 \langle K_c \rangle_1, \quad (2.103)$$

となる。ただし、

$$g'_z = \text{Re} g_z^{\text{R}}, \quad (2.104)$$

$$K_c = 3\lambda k^3 \cos 3\phi_{\mathbf{k}}, \quad (2.105)$$

$$\langle \dots \rangle_n = \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\dots)}{(\text{Im} D^{\text{R}})^n} \delta(\text{Re} D^{\text{R}}) \text{sgn}(\text{Im} D^{\text{R}}), \quad (2.106)$$

とした。また、Fermi-sea term は絶縁体領域では

$$B_1^{\text{sea}} = \frac{1}{2} - 2\pi \sum_{\mathbf{k}} \frac{3\lambda k^3 \cos 3\phi_{\mathbf{k}}}{g^{3/2}}, \quad (2.107)$$

$$B_2^{\text{sea}} = \frac{1}{2} - \pi \sum_{\mathbf{k}} \frac{3\lambda k^3 \cos 3\phi_{\mathbf{k}}}{g^{3/2}}, \quad (2.108)$$

$$B_3^{\text{sea}} = \frac{1}{2}, \quad (2.109)$$

となり、金属領域では、

$$B_1^{\text{sea}} = B_3^{\text{sea}} + 2\bar{B}^{\text{sea}}, \quad (2.110)$$

$$B_2^{\text{sea}} = B_3^{\text{sea}} + \bar{B}^{\text{sea}}, \quad (2.111)$$

$$B_3^{\text{sea}} = \pi \sum_{\mathbf{k}} [\mu^2 \delta(\mu^2 - E_{\mathbf{k}}^2) - \theta(E_{\mathbf{k}}^2 - \mu^2)] \hat{\mathbf{g}} \cdot (\partial_x \hat{\mathbf{g}} \times \partial_y \hat{\mathbf{g}}) \quad (2.112)$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^\infty k dk \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} [\mu^2 \delta(\mu^2 - E_{\mathbf{k}}^2) - \theta(E_{\mathbf{k}}^2 - \mu^2)] \frac{(-M_z + \lambda k^3 \cos 3\phi_{\mathbf{k}}) - 3\lambda k^3 \cos 3\phi_{\mathbf{k}}}{g^3}, \quad (2.113)$$

となる。ただし、

$$\bar{B}^{\text{sea}} = \pi v_F^2 [\mu^2 \delta(\mu^2 - E_{\mathbf{k}}^2) - \theta(E_{\mathbf{k}}^2 - \mu^2)] \sum_{\mathbf{k}} \frac{3\lambda(k_x^3 - 3k_x k_y^2)}{2g^3}, \quad (2.114)$$

とした。角度積分を数値的に行うと図 2.4 のような $\tilde{\mu}$ 依存性が得られる。まず、 $\lambda = 0$ (ヘキサゴナル・ワーピング項が無い場合) では一致していた A_1, A_2, A_3 (および、 B_1, B_2, B_3) の間に違いが生じること (非等価性) が読み取れる。 A_3 は v_i' の二次の効果によって、 $\tilde{\mu}$ の増大とともに大幅に値が増加している。また、 B_1, B_2, B_3 に関しては v_i' の二次の効果は効かず (反対称成分であるため)、 $\tilde{\mu}$ の増加によって非等価性は弱まるが、一方で Fermi-sea term の寄与によって、絶縁体領域 ($0 < \tilde{\mu} < 1$) で大きな非等価性が現れている。青い線で表された異常ホール伝導度は絶縁体領域でも量子化する ($1/2$ になる) が、他の量 (B_1, B_2) に関しては $1/2$ からずれた値となり、その値は $\tilde{\lambda}$ によって変化する。

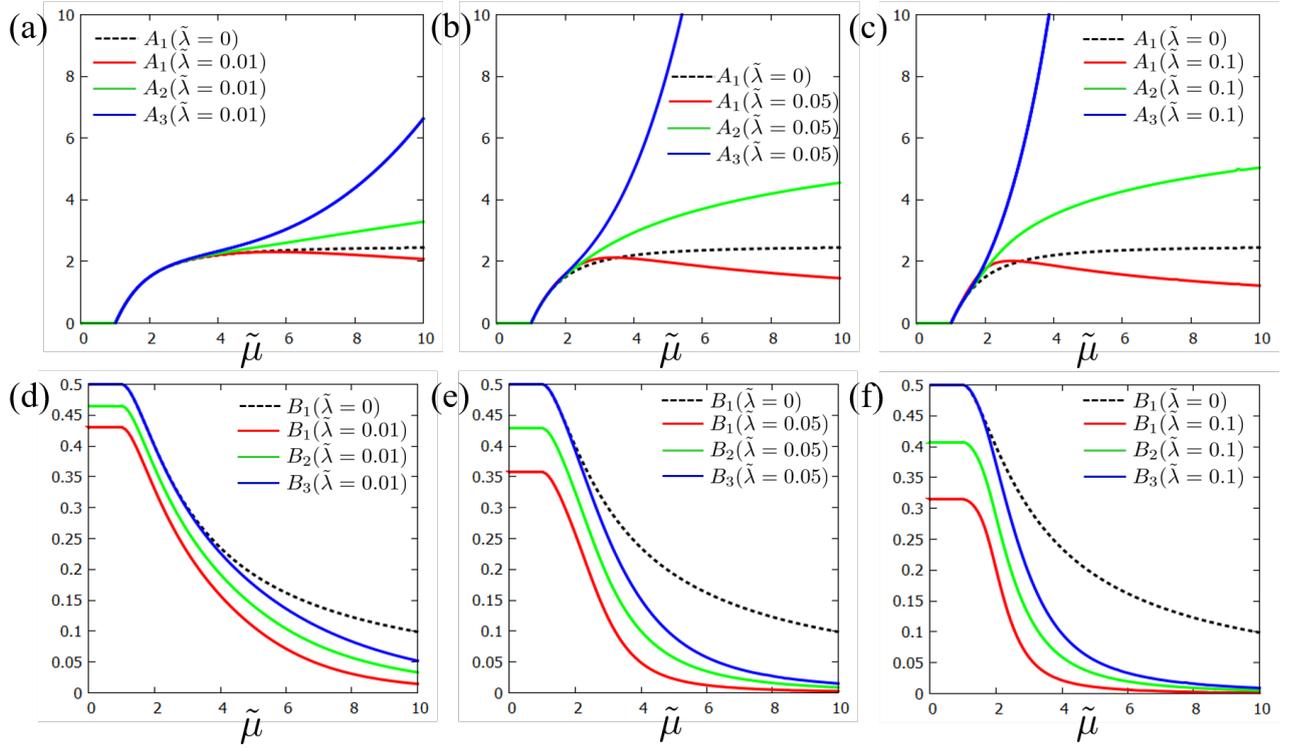


图 2.4: (a-c) A_1, A_2, A_3 vs $\tilde{\mu}$, (d-f) B_1, B_2, B_3 vs $\tilde{\mu}$, (a, d) $\tilde{\lambda} = 0.01$, (b, e) $\tilde{\lambda} = 0.05$, (c, f) $\tilde{\lambda} = 0.1$.

2.5 空間変化する磁化に作用するスピントルク

SOT viewpoint では、磁化の空間微分を含むスピントルクは以下のように与えられる。

$$\langle \hat{\sigma}_\perp^\alpha \rangle = \frac{1}{\pi} e M L_{ij}^{\alpha\beta} E_i \nabla_j \delta n^\beta, \quad (2.115)$$

$$C_{ij}^{\alpha\beta} = \sum_{n=1}^8 C_n \Delta_n. \quad (2.116)$$

Δ_n, C_n は以下で与えられる。計算の詳細は付録 C を参照。

$$\Delta_1 = -\epsilon_{i\alpha} \delta_{j\beta}, \quad (2.117)$$

$$C_1 = v_F^2 M^2 \left\{ 2\langle b \rangle_2 - \frac{1}{2} g_0'' \langle K_c \rangle_2 + g_0'' g_z'' \langle K_s^2 \rangle_3 \right\} + \frac{1}{2} (3\lambda M)^2 \langle k^4 b \rangle_2, \quad (2.118)$$

$$\Delta_2 = \delta_{i\alpha} \delta_{j\beta}, \quad (2.119)$$

$$C_2 = v_F^2 M^2 \left\{ \langle a \rangle_2 - \frac{1}{2} g_z' \langle K_c \rangle_2 + g_0'' g_0' \langle K_s^2 \rangle_3 \right\}, \quad (2.120)$$

$$\Delta_3 = \delta_{i\alpha} \epsilon_{j\beta}, \quad (2.121)$$

$$C_3 = \frac{1}{2} v_F^2 M^2 \left\{ g_0'' \langle K_c \rangle_2 + 4g_z'' \langle b K_c \rangle_3 + 2g_0'' g_z'' \langle K_c^2 \rangle_3 \right\} + \frac{1}{2} (3\lambda M)^2 \langle k^4 b \rangle_2, \quad (2.122)$$

$$\Delta_4 = \epsilon_{i\alpha} \epsilon_{j\beta}, \quad (2.123)$$

$$C_4 = \frac{1}{2} v_F^2 M^2 \left\{ \langle g_z' K_c \rangle_2 + 2g_z'' \langle a K_c \rangle_3 + 2g_0'' g_0' \langle K_c^2 \rangle_3 \right\}, \quad (2.124)$$

$$\Delta_5 = (\tau_z)_{i\alpha} (\tau_x)_{j\beta} - (\tau_x)_{i\alpha} (\tau_z)_{j\beta}, \quad (2.125)$$

$$C_5 = \frac{1}{2} v_F^2 M^2 \left\{ -\langle K_c \rangle_2 + (3\lambda)^2 g_z'' \langle k^6 \rangle_3 \right\} + \frac{1}{2} (3\lambda M)^2 \langle k^4 b \rangle_2, \quad (2.126)$$

$$\Delta_6 = (\tau_x)_{i\alpha} (\tau_x)_{j\beta} + (\tau_z)_{i\alpha} (\tau_z)_{j\beta}, \quad (2.127)$$

$$C_6 = \frac{1}{2} v_F^2 M^2 \left\{ -\langle g_z' K_c \rangle_2 + g_z'' \langle x^2 K_c \rangle_3 + (3\lambda)^2 g_0'' g_0' \langle k^6 \rangle_3 \right\}. \quad (2.128)$$

それぞれの viewpoint における数値計算の結果は、図 2.5, 2.7, 2.8 のようになる。また、SOT viewpoint での各係数の λ^2 の係数を見るために以下の量も合わせてプロットした (図 2.6)。

$$\tilde{C}_1 = \frac{(C_1 - C_1(\lambda = 0))}{\lambda^2}, \quad (2.129)$$

$$\tilde{C}_2 = \frac{(C_2 - C_2(\lambda = 0))}{\lambda^2}, \quad (2.130)$$

$$\tilde{C}_3 = \frac{C_3}{\lambda^2}, \quad (2.131)$$

$$\tilde{C}_4 = \frac{C_4}{\lambda^2}, \quad (2.132)$$

$$\tilde{C}_5 = \frac{C_5}{\lambda^2}, \quad (2.133)$$

$$\tilde{C}_6 = \frac{C_6}{\lambda^2}. \quad (2.134)$$

Viewpoint に依存せずに共通していることは、添え字の数字が奇数の場合はダンピングのマイナス 1 乗の寄与、偶数の場合はマイナス 2 乗の寄与であり、添え字が偶数のものの方が奇数のものよりも大きな寄与を与えていることである。まず、SOT viewpoint での各係数について見ていく。 $\tilde{\lambda}$ もしくは $\tilde{\mu}$ が小さい場合には、 C_1 と C_2 が大きい、 $\tilde{\lambda}$ もしくは $\tilde{\mu}$ が大きくなると C_5 と C_6 も同程度に効くようになる。また、 C_3 と C_4 はその中間領域において値が大きくなっ

ている。さらに、図 2.6 において $\tilde{\lambda}$ が小さい場合のプロット（茶色の線）は、各係数における $\tilde{\lambda}^2$ の係数の $\tilde{\mu}$ 依存性を近似的に表したものとなっている。 $\tilde{\lambda}$ を小さくしていった場合には非単調性が弱まるような結果となっており、 $\tilde{\lambda}$ が大きい場合には異なる $\tilde{\mu}$ 依存性を持つ関数が組み合わさっていることが分かる。

また、STT viewpoint では、 $\tilde{\lambda} = 0$ では、 $C'_1 = C'_3 = C'_5$, $C'_2 = C'_4 = C'_6$ であったが、 $\tilde{\lambda}$ が大きくなると、 C'_1 が C'_3 , C'_5 に比べて大きくなっており、 C'_2 と C'_6 は同程度で、 C'_4 は小さな寄与となっている。 C'_4 が小さくなることは、 v_i の二次の寄与が反対称性より効かないことに由来する。

GRT viewpoint でも $\tilde{\lambda} = 0$ では、 $C''_1 = C''_3 = C''_5$, $C''_2 = C''_4 = C''_6$ であり、 $\tilde{\lambda}$ が大きくなると、 C''_1 が C''_3 , C''_5 に比べて大きくなっており、 C''_2 と C''_6 は同程度で、 C''_4 は小さな寄与となっている。STT viewpoint と比べると、 C''_2 , C''_4 が大きな符号の変化を伴うなどの特徴がある。

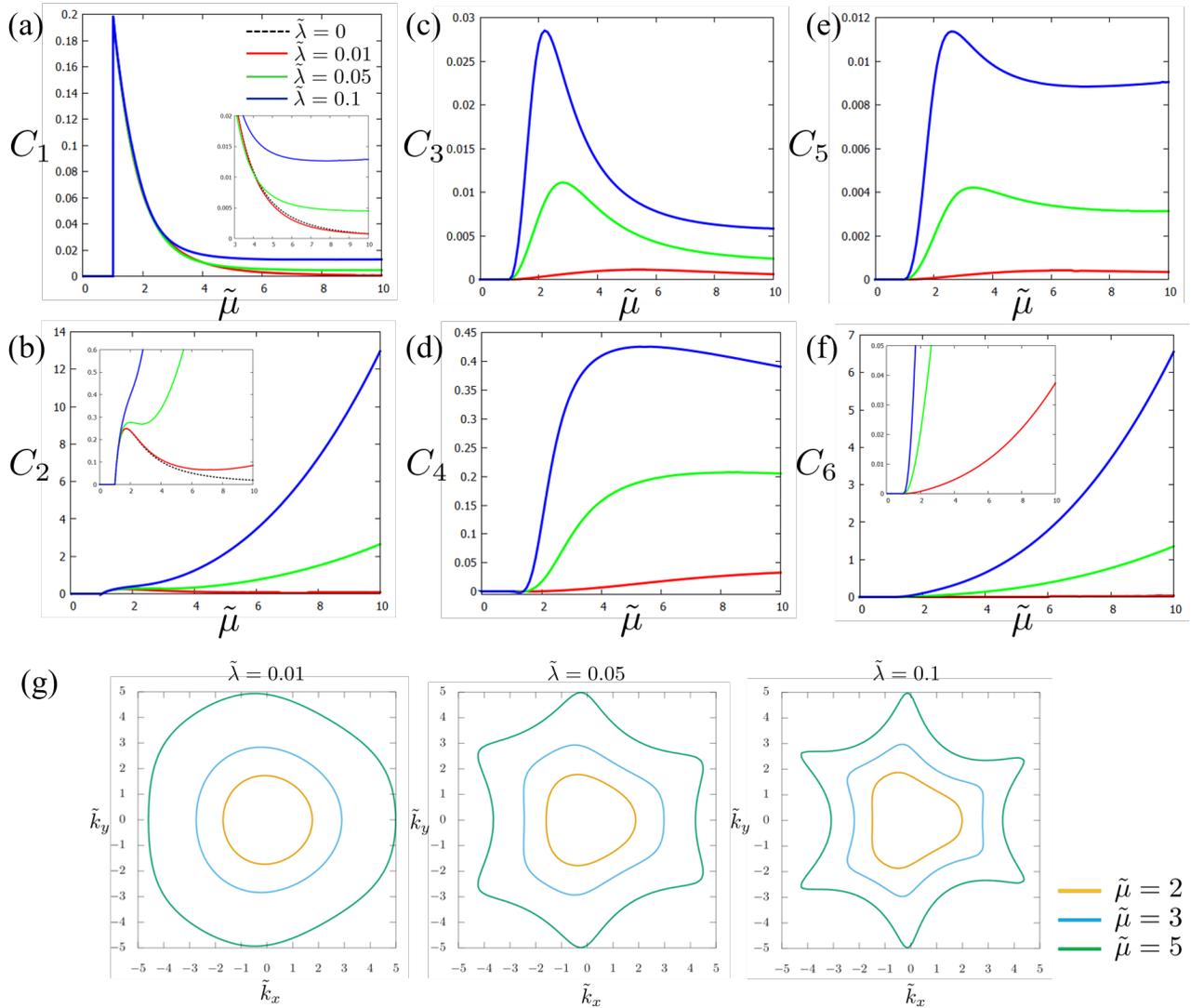


図 2.5: SOT viewpoint で表した場合のトルクの係数。(a) C_1 , (b) C_2 , (c) C_3 , (d) C_4 , (e) C_5 , (f) C_6 vs $\tilde{\mu}$, $\tilde{\lambda} = 0.01$ (赤), $\tilde{\lambda} = 0.05$ (緑), $\tilde{\lambda} = 0.1$ (青), (g) $\tilde{\mu} = 2, 3, 5$ の場合のフェルミ面の図, $\tilde{k} = v_F k / |M_z|$.

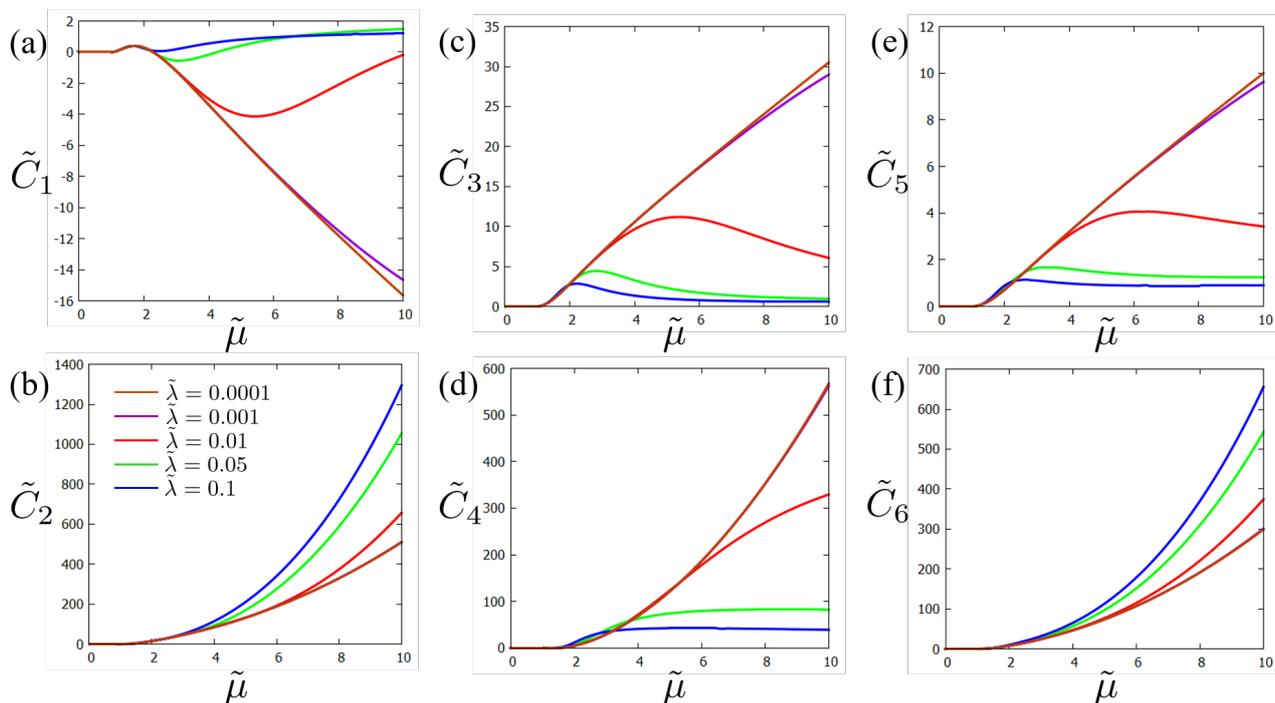


図 2.6: SOT viewpoint で表した場合のトルクの係数 (チルダがついたもの)。 (a) \tilde{C}_1 , (b) \tilde{C}_2 , (c) \tilde{C}_3 , (d) \tilde{C}_4 , (e) \tilde{C}_5 , (f) \tilde{C}_6 vs $\tilde{\mu}$, $\tilde{\lambda} = 0.01$ (赤), $\tilde{\lambda} = 0.05$ (緑), $\tilde{\lambda} = 0.1$ (青), $\tilde{\lambda} = 0.001$ (紫), $\tilde{\lambda} = 0.0001$ (茶)。

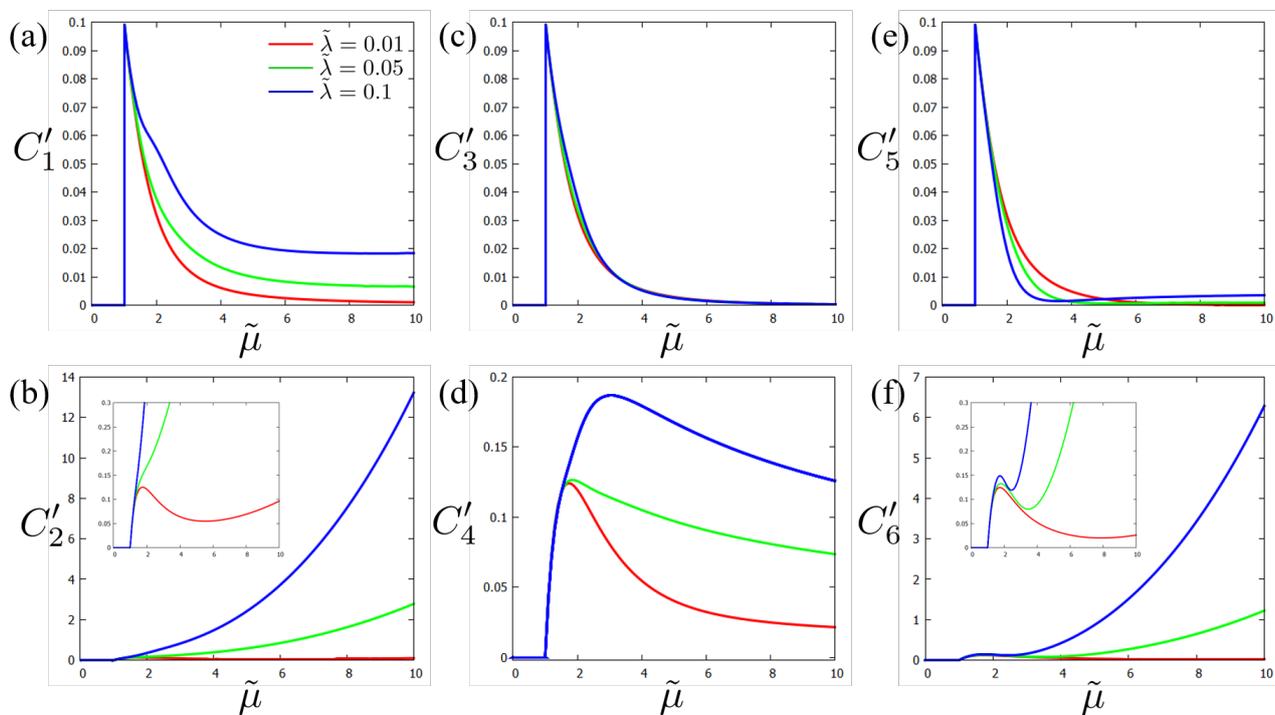


図 2.7: STT viewpoint で表した場合のトルクの係数。 (a) C'_1 , (b) C'_2 , (c) C'_3 , (d) C'_4 , (e) C'_5 , (f) C'_6 vs $\tilde{\mu}$, $\tilde{\lambda} = 0.01$ (赤), $\tilde{\lambda} = 0.05$ (緑), $\tilde{\lambda} = 0.1$ (青)。

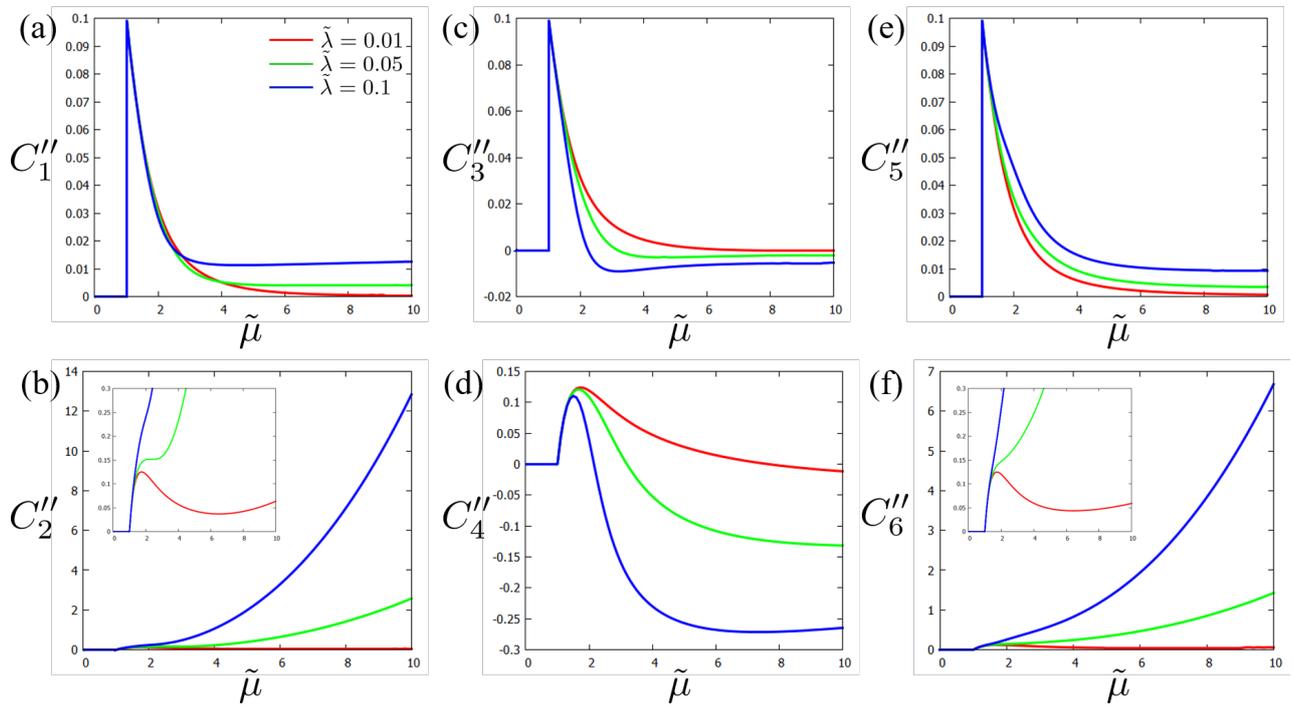


図 2.8: GRT viewpoint で表した場合のトルクの係数。(a) C''_1 , (b) C''_2 , (c) C''_3 , (d) C''_4 , (e) C''_5 , (f) C''_6 vs $\tilde{\mu}$, $\tilde{\lambda} = 0.01$ (赤)、 $\tilde{\lambda} = 0.05$ (緑)、 $\tilde{\lambda} = 0.1$ (青)。

2.6 マグノンの分散

前節での計算結果の物理的な効果について議論する。本節ではマグノンの分散、次節では磁壁駆動について扱う。まず、LLG (Landau–Lifshitz–Gilbert) 方程式は以下のように与えられる。

$$\dot{\mathbf{n}} = -(J\nabla^2\mathbf{n} + \Delta n_z \hat{z}) \times \mathbf{n} - \alpha \mathbf{n} \times \dot{\mathbf{n}} + s_0^{-1} \mathbf{t}. \quad (2.135)$$

ここで、 J は磁化の間の交換相互作用の大きさを表す定数、 $s_0 = S/a^2$ (S は局在スピンの大きさ、 a は格子定数)、 Δ は磁気異方性、 α はギルバート・ダンピングである。 $\phi = n_x + in_y$ に対する方程式に直して、STT viewpoint でトルクを表すと、以下ようになる。

$$i\dot{\phi} = (J\nabla^2 - \Delta)\phi + \alpha\dot{\phi} \quad (2.136)$$

$$\begin{aligned} & - \{C'_1(\mathbf{F} \cdot \nabla) + C'_3(\mathbf{F} \times \nabla)^z\}i\phi + \{C'_2(\mathbf{F} \cdot \nabla) + C'_4(\mathbf{F} \times \nabla)\}\phi \\ & - \{C'_5(\mathbf{F} \cdot \tau^z \nabla) - C'_6(\mathbf{F} \cdot \tau^x \nabla)\}i\phi^* + \{C'_5(\mathbf{F} \cdot \tau^x \nabla) + C'_6(\mathbf{F} \cdot \tau^z \nabla)\}\phi^*. \end{aligned} \quad (2.137)$$

$\phi = (ue^{-i\omega t} - v^*e^{i\omega^*t})e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ とすると、 u, v に対する方程式は以下のようにまとまる。

$$\begin{pmatrix} (1 + i\alpha\omega - W) & X - iY \\ X + iY & -(1 - i\alpha\omega + W^*) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.138)$$

ただし、以下のようにそれぞれの量を定義した。

$$W = \omega_{\mathbf{q}} + i\beta_{\mathbf{q}}, \quad (2.139)$$

$$\omega_{\mathbf{q}} = Jq^2 + \Delta + C'_1(\mathbf{F} \cdot \mathbf{q}) + C'_3(\mathbf{F} \times \mathbf{q})^z, \quad (2.140)$$

$$\beta_{\mathbf{q}} = C'_2(\mathbf{F} \cdot \mathbf{q}) + C'_4(\mathbf{F} \times \mathbf{q})^z, \quad (2.141)$$

$$X = -C'_5(\mathbf{F} \cdot \tau^z \nabla) + C'_6(\mathbf{F} \cdot \tau^x \nabla), \quad (2.142)$$

$$Y = C'_5(\mathbf{F} \cdot \tau^x \nabla) + C'_6(\mathbf{F} \cdot \tau^z \nabla). \quad (2.143)$$

したがって、電場によるマグノンの分散の変化は以下のようにまとまる。

$$\omega = \omega_{\mathbf{q}} - i\gamma_{\mathbf{q}}, \quad (2.144)$$

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \sqrt{[\alpha(\omega_{\mathbf{q}} + \sqrt{\beta_{\mathbf{q}}^2 + \delta_{\mathbf{q}}^2}) - \beta_{\mathbf{q}}]^2 + \delta_{\mathbf{q}}^2}, \quad (2.145)$$

$$\delta_{\mathbf{q}} = \sqrt{2[(C'_5)^2 + (C'_6)^2]|\mathbf{F}||\mathbf{q}|}. \quad (2.146)$$

STT viewpoint の見方がマグノンの分散に対しては便利である（それぞれの効果が理解しやすい）ことが分かる。特に、 C'_1 は電場方向のドップラーシフトを表すものであり、スピン移行トルクによる効果と考えられるが、ヘキサゴナル・ワーピング項が無い場合でも有限に残る。また、 C'_3 は電場と垂直方向のドップラーシフト、 C'_2 は電場方向のドップラーシフトによるダンピングの変化、 C'_4 は電場と直交する方向のドップラーシフトによるダンピングの変化を表している。また、 C'_5 と C'_6 は、電場とマグノンの波数の方向に依存しないダンピングの変化になっている。

ここで、 $\lambda = 0$ の場合と $\lambda \neq 0$ の場合でマグノンの分散の電場による変化がどのように異なるかを考える。 $\lambda = 0$ の場合は、ゲージ不変性の効果がトルクにも影響を与えるため、各係数は以下のような関係を持つ。

$$C'_1 = C'_3 = C'_5, \quad (2.147)$$

$$C'_2 = C'_4 = C'_6. \quad (2.148)$$

よって、マグノンの分散の変化は以下のように表すことができる。

$$\omega = \omega_{\mathbf{q}} + C'_1 q_E, \quad (2.149)$$

$$q_E = (q_x + q_y)E_x + (-q_x + q_y)E_y. \quad (2.150)$$

電場が x 方向の場合を考えると、 q_E が最大になるマグノンの波数の方向は $(1, 1)$ となり、電場に対して 45 度の方向となる。この性質はゲージ不変性による影響であり、系の点群的な対称性による帰結ではなく、異常ホール角やスピンホール角と結びつくものでもない。 $\lambda \neq 0$ の場合には、ゲージ不変性はトルクに影響を与えないので、モデル・パラメータの変化によってドップラーシフトの方向が変わる。 λ が大きい極限を考えると、 C'_3 が他の係数に比べて相対的に小さくなるので、ドップラーシフトは電場方向に生じるようになる。この結果は、波数の三次の項の係数を非摂動的に取り扱ったことによって得られた結果である。

2.7 磁壁駆動

この節では、前々節で計算したトルクによる一次元磁壁の移動について考える。磁壁を表す磁化を以下のように導入する。

$$\mathbf{n}_{\text{dw}}(x) = (\sin\theta\cos\phi_0, \sin\theta\sin\phi_0, \cos\theta), \quad (2.151)$$

$$\cos\theta(x) = \tanh\frac{x-X}{\lambda}. \quad (2.152)$$

ここで、 λ は磁壁の幅、 X は磁壁の位置、 ϕ_0 は磁壁の角度を表すパラメータである。このとき、磁壁の運動方程式は以下のように与えられる。

$$\dot{X} - \alpha\lambda\dot{\phi}_0 = v_s + v_K\sin 2\phi_0, \quad (2.153)$$

$$\lambda\dot{\phi}_0 + \alpha\dot{X} = v_f. \quad (2.154)$$

ここで、 α はギルバート・ダンピングであり、 $v_K = SK_{\perp}\lambda/2\hbar$ は困難軸磁気異方性 K_{\perp} に由来する項であり、 v_s と v_f はそれぞれ以下のように与えられる。

$$v_s = -\frac{M}{2s_0} \int dx (\mathbf{n}_{\text{dw}} \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle)^z, \quad (2.155)$$

$$v_f = -\frac{M}{2s_0} \lambda \int dx (\partial_x \mathbf{n}_{\text{dw}}) \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle. \quad (2.156)$$

STT viewpoint でスピン分極を考えると、以下のようにまとまる。

$$v_s = \frac{2M}{3s_0} \{C'_1 E_x + C'_5 (E_x \cos 2\phi_0 + E_y \sin 2\phi_0)\}, \quad (2.157)$$

$$v_f = \frac{2M}{3s_0} \{C'_2 E_x + C'_6 (E_x \cos 2\phi_0 + E_y \sin 2\phi_0)\}. \quad (2.158)$$

これらの表式から、 t_{STT}^1 が確かにスピン移行トルクとして働くことが分かる。また、 t_{STT}^2 は磁壁を駆動する力として働く。スピン軌道相互作用が弱い強磁性体と比べると、 t_{STT}^5 と t_{STT}^6 が新しい寄与である。これらは磁壁の角度に依存し、 $\sin 2\phi_0 \neq 0$ の場合には、磁壁と垂直方向の電場 E_y の影響も受ける。 t_{STT}^5 は磁気異方性の変化、すなわち、内因性ピンングに由来する電流閾値の変化を表しているが、 t_{STT}^6 は磁壁に対する駆動力として働く。

また、マグノンのドップラーシフトと比べると、 t_{STT}^3 と t_{STT}^4 が磁壁の駆動には影響を与えないこと、 t_{STT}^5 と t_{STT}^6 の役割が分離されていることが異なる特徴として現れている。さらに、磁壁駆動の非断熱性である β は C'_1 と C'_2 の比で定義でき、その $\tilde{\mu}$ 依存性は図 2.9 のようにプロットできる。波数の三次の項の係数を非摂動的に扱ったことによって、 $\tilde{\lambda}$, $\tilde{\mu}$ が大きい場合に非断熱性が大幅に増大することが分かった。

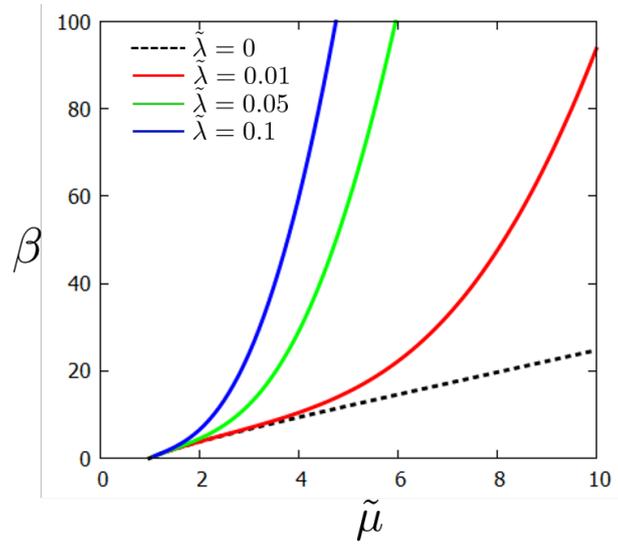


図 2.9: β vs $\tilde{\mu}$. $\tilde{\lambda} = 0.01$ (赤), $\tilde{\lambda} = 0.05$ (緑), $\tilde{\lambda} = 0.1$ (青)。

2.8 電流誘起ジャロシンスキー・守谷相互作用

これまで計算してきたトルクは連続回転対称性を有する系でも存在するトルクであったが、面直方向のスピン密度、磁化の面直成分の空間変化を考慮することで、三回回転対称な系に特有なトルクを導くことができる。

$$\langle \sigma_{\parallel} \rangle = \frac{e}{M^2} [D_1 ((\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_x \boldsymbol{\nabla}), (\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_z \boldsymbol{\nabla})) \delta M_z + D_2 ((\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_z \boldsymbol{\nabla}), -(\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_x \boldsymbol{\nabla})) \delta M_z], \quad (2.159)$$

$$\langle \sigma^z \rangle = \frac{e}{M} [D_1 \{ (\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_x \boldsymbol{\nabla}) n_x + (\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_z \boldsymbol{\nabla}) n_y \} D_2 \{ (\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_z \boldsymbol{\nabla}) n_x - (\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_x \boldsymbol{\nabla}) n_y \}]. \quad (2.160)$$

これらのスピン密度と磁化との内積をとると

$$F = eD_1 (-E_x \tau_z + E_y \tau_x)_{i\alpha} (\mathbf{M} \times \partial_i \mathbf{M})^\alpha + eD_2 (E_x \tau_x + E_y \tau_z) (\mathbf{M} \times \partial_i \mathbf{M})^\alpha, \quad (2.161)$$

という形にまとめ、ジャロシンスキー・守谷相互作用 (Dzyaloshinskii-Moriya Interaction, DMI) の係数に電場が含まれたものになる。よって、上記のトルクは電場によって誘起されるジャロシンスキー・守谷相互作用 (Current Induced DMI, CIDMI) を表すものである。 D_1 , D_2 を、 C_n と同様に線形応答理論によって計算すると以下のようにまとまる。

$$D_1 = -\frac{4M^2}{\pi} \text{Re} \sum_{\mathbf{k}} \frac{x \{ v_F^2 x^2 \cos 3\phi g_z'' + 3v_F x \lambda k^2 (g_0'' g_0^R + g_z'' g_z^R) + (3\lambda k^2)^2 \cos 3\phi g_0'' g_0^R g_z^R \}}{(D^R)^3 D^A}, \quad (2.162)$$

$$D_2 = -\frac{4M^2}{\pi} \text{Im} g_0'' \sum_{\mathbf{k}} \frac{x \{ v_F^2 x^2 \cos 3\phi + 6v_F x \lambda k^2 g_z^R + (3\lambda k^2)^2 \cos 3\phi (g_z^R)^2 \}}{(D^R)^3 D^A}. \quad (2.163)$$

さらに計算を行うと

$$D_1 = v_F M \{ v_F g_z'' \langle x^3 \cos 3\phi \rangle_3 + 3\lambda v_F^2 [g_0' g_0'' \langle k^4 \rangle_3 + g_z'' \langle g_z' k^4 \rangle_3] + (3\lambda)^2 g_0' g_0'' \langle g_z' k^5 \cos 3\phi \rangle_3 \}, \quad (2.164)$$

$$D_2 = -3\lambda v_F M^2 g_0'' \{ 2 \langle g_z' k^2 \rangle_2 + \frac{1}{2} \langle k^2 K_c \rangle_2 \}, \quad (2.165)$$

となる。これらの表式を λ で展開して最低次を残すと以下ようになる。

$$D_1 \simeq \frac{3}{64\pi} \frac{\tilde{\lambda}}{\gamma_0^2} \frac{(\mu^2 - M_z^2)^2}{(\mu^2 + M_z^2)^4} [2\mu^2 + \mu^2 M_z^2 + M_z^4] (\text{sgn}(\mu)), \quad (2.166)$$

$$D_2 \simeq \frac{3}{8\pi} \frac{\tilde{\lambda}}{\gamma_0} \frac{\mu M_z (\mu^2 - M_z^2)}{(\mu^2 + M_z^2)^2}. \quad (2.167)$$

λ を非摂動的に扱った場合の数値計算の結果と、摂動的に扱った場合の解析的な結果は図 2.10 のようになる。 \tilde{D}_1 と \tilde{D}_2 は、それぞれ、 D_1 , D_2 を $\tilde{\lambda}$ の一次で割った量である。 \tilde{D}_1 は \tilde{D}_2 に比べてダンピングに関して低次であるため、 \tilde{D}_1 の方が数値的に大きな値になっている。特に化学ポテンシャルが大きい場合には、 \tilde{D}_1 は増大しているが、 \tilde{D}_2 はゼロに向かっている。また、数値計算と解析的な結果が整合していることが分かる。

さらに、定量的に大きな \tilde{D}_1 の方のみを考慮し、電場を x 方向とすると、

$$(\mathbf{n} \times \partial_x \mathbf{n})^x - (\mathbf{n} \times \partial_y \mathbf{n})^y, \quad (2.168)$$

という種類の DMI が現れ、電場を y 方向とすると、

$$(\mathbf{n} \times \partial_x \mathbf{n})^y + (\mathbf{n} \times \partial_y \mathbf{n})^x, \quad (2.169)$$

という種類の DMI が現れる。この結果は、電流の方向を変えることによって、ネール磁壁（磁化構造の進行方向と同じ方向に磁化が倒れていくような磁壁）とブロッホ磁壁（磁化構造の進行方向に対して垂直方向に磁化が倒れていくような磁壁）のスイッチングが行えることを示している。

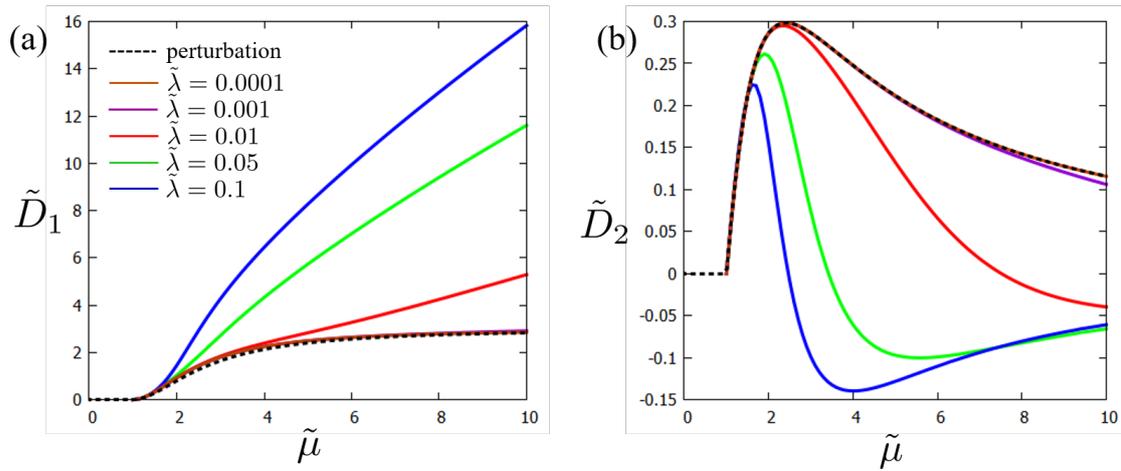


図 2.10: (a) $\tilde{D}_1 = D_1/\tilde{\lambda}$, (b) $\tilde{D}_2 = D_2/\tilde{\lambda}$ vs $\tilde{\mu}$. $\tilde{\lambda} = 0.01$ (赤), $\tilde{\lambda} = 0.05$ (緑), $\tilde{\lambda} = 0.1$ (青), $\tilde{\lambda} = 0.001$ (紫), $\tilde{\lambda} = 0.0001$ (茶), λ に関する摂動計算の結果 (黒い点線)。

磁性トポロジカル絶縁体表面では、ヘキサゴナル・ワーピング項が無い場合でも平衡状態においてジャロシンスキー・守谷相互作用が存在する [104]。この場合に誘起される磁壁のタイプはネールタイプである。両者の係数を比較すると、

$$\frac{\text{CIDMI}}{\text{Equilibrium DMI}} = \frac{8\hbar v_F}{M^2} eED_{1,2}, \quad (2.170)$$

となる。 v_F が $1[\text{eV}\text{\AA}]$ 程度であること [37] を考慮すると、 $E = 10^{-6}[\text{eV}/\text{\AA}]$ 程度の場合に、平衡状態における DMI と同程度の電流誘起 DMI が得られることが導かれる。

第3章

粒子正孔対称性の破れの効果

この章では、磁性トポロジカル絶縁体表面のスピントロニクス現象（電気伝導、スピン軌道トルク）に対する表面電子の粒子正孔対称性の破れの効果について解析し、また非常に類似した系であるラシュバ系についてそのパラメータ領域による分類を行なった上でディラック系との比較を行う。

3.1 モデル

この節では、磁性トポロジカル絶縁体表面における粒子正孔対称性の破れの効果を扱うためのモデルを定式化する。

3.1.1 ハミルトニアン

まず、ハミルトニアンとしては以下のものを考える。

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} [v_{\text{F}}(k_y \sigma^x - k_x \sigma^y) + \epsilon_{\mathbf{k}} I - \mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\sigma}] c_{\mathbf{k}} + V_{\text{imp}}. \quad (3.1)$$

$c_{\mathbf{k}}$ ($c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$) は、電子の消滅（生成）演算子である。大括弧内の第一項と第二項は磁性トポロジカル絶縁体表面の伝導電子を記述する項であり、線形ディラック分散を記述する項（ラシュバ型スピン軌道相互作用項）に単位行列に比例する項を加えたものであり、第三項は磁化と伝導電子の結合、最後の項は伝導電子に対する不純物散乱を表す項である。次節で行う電気伝導度とスピン軌道トルクの定式化は、 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ の形に依らずに行うことが出来る。ただし、最終的な結果は $\epsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2m^*$ 、 $m^* > 0$ として導く。 $\epsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2m^*$ とすると、ハミルトニアンとしてはラシュバ系と全く同じものであるが、バンド構造のどの部分を扱うか（波数の和をとる範囲）によってディラック系はラシュバ系と区別される。ここで、今後の議論で重要になる三つの無次元パラメータを導入する。

$$\tilde{\mu} = \frac{\mu}{m^* v_{\text{F}}^2}, \quad (3.2)$$

$$\tilde{M} = \frac{M}{m^* v_{\text{F}}^2}, \quad (3.3)$$

$$\tilde{k} = \frac{k}{m^* v_{\text{F}}}. \quad (3.4)$$

また、磁化の角度を表す量として、 θ_M , ϕ_M を以下のように導入する。

$$\mathbf{M} = M(\cos\phi_M \sin\theta_M, \sin\phi_M \sin\theta_M, \cos\theta_M). \quad (3.5)$$

このモデルにおけるエネルギー分散は、

$$\tilde{E}_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{E_{\mathbf{k}}}{m^* v_{\text{F}}^2} = \frac{\tilde{k}^2}{2} \pm \sqrt{(\tilde{k}_y - \tilde{M}_x)^2 + (\tilde{k}_x + \tilde{M}_y)^2 + \tilde{M}_z^2}, \quad (3.6)$$

となる。

典型的なパラメータの値を選んだ場合のバンド構造とフェルミ面について図 3.1, 3.2 に示す。内側のフェルミ面のみを考慮することでディラック系、二つのフェルミ面を考慮することでラシュバ系の計算を行うことができる。 $\theta_M = 0$ の場合 (図 3.1) は、ギャップが開く一方で、回転対称性は破れないため丸いフェルミ面になる。また粒子正孔対称性の破れにより、ギャップの上下でバンド構造は対称ではなくなり、 $\tilde{\mu} = +0.2$ か $\tilde{\mu} = -0.2$ で内側のフェルミ面の大きさは異なる。ギャップの大きさは $2\tilde{M}$ で与えられ、バンドの最小値は $-(1 + \tilde{M}^2)/2$, 対応する波数は $(1 - \tilde{M}^2)^{1/2}$ で与えられる。また、 $\tilde{M} < 1$ の場合はディラック系の有効モデルになるが、 $\tilde{M} > 1$ の場合はディラック的な特徴が消失する (図 3.1(c), 図 3.3)。また、 $\tilde{M} < 1$ の場合でも、 $\tilde{\mu}$ が負で大きい場合にはディラック系と見なせない領域が存在する (図 3.4)。

$\theta_M = \pi/2$, $\phi_M = 0$ の場合 (図 3.2 の実線部分) は磁化の面内成分に垂直な面が鏡映面となる。磁化に垂直な面に射影したバンド構造は波数の正負で非対称な形になり、ディラック点付近は、二つの直線の傾きが異なる tilted Dirac と呼ばれるモデルになる [94]。下のバンドの極小値は $-1/2 \pm \tilde{M}$ である。また、ディラック点は $\tilde{k} = \tilde{M}$ に現れる。 $\tilde{M} < 1$ の場合は通常のディラック系の有効モデルになるが、 $\tilde{M} > 1$, $\theta_M = \pi/2$ の場合はディラック点付近の二つの直線の傾きの符号が同じになる type II のディラック系 [102] になる (図 3.2(c))。

$\theta_M = \pi/4$, $\phi_M = 0$ の場合にはギャップが開き、また、回転対称性の破れの効果も現れる (図 3.2 の点線部分)。バンド構造の極小値やギャップの大きさはモデル・パラメータの複雑な関数で与えられる。

また、 $\theta_M = \pi/2$ の場合に現れた type I と type II については、磁化の面直成分を含む一般の磁化の方向に拡張して考えることが出来る。磁化を面内に射影したベクトルの大きさを M_{\parallel} とすると、type I と type II の条件は一般的に以下のように与えられる (図 3.5)。

$$\text{Type I: } |M_z|^{2/3} + |M_{\parallel}|^{2/3} < 1, \quad (3.7)$$

$$\text{Type II: } |M_z|^{2/3} + |M_{\parallel}|^{2/3} > 1. \quad (3.8)$$

ここで、ラシュバ系に対して本研究が扱うパラメータ領域と先行研究が扱ってきたパラメータ領域の違いを説明する。

$\theta_M = \pi/2$ かつ $\tilde{M} > 1$ の場合 (スピン軌道相互作用が小さいか、波数の二次の項が大きい、磁化が大きい場合) には、電気伝導度の異方性について文献 [99] で調べられている。また、文献 [100] では θ_M の値が複数選ばれており、type II ディラックとなる場合にスピン軌道トルクの異方性について調べられている。さらに、 $\theta_M = 0$ の場合の異常ホール効果に関しては、 $\tilde{M} > 1$ の場合も $\tilde{M} < 1$ の場合もともに調べられている [96, 97]。文献 [98] ではスピン軌道トルクと電気伝導について磁化の角度や方向に依存せずに調べられているが、ディラック系の伝導帯に対応する $\tilde{\mu}$ の領域のみが調べられており、その他の領域は扱われていない。

まず、本論文ではディラック系のラシュバ系との比較を行うのが目的であるので、 $|M_z|^{2/3} + |M_{\parallel}|^{2/3} < 1$ の場合を扱う (数値計算では $\tilde{M} = 0.2$ とする)。また、 $\tilde{\mu}$ に関しては、ディラック系全体に対応する領域を扱う。この条件は、特徴的な化学ポテンシャルの値によって以下のように表すことが出来る。 $\theta_M = 0$, $\pi/4$ の場合には、上のバンドの最小値を $\tilde{\mu}_{g1}$, 下のバンドの極小値を $\tilde{\mu}_{g2}$, 下のバンドの上の極小値を $\tilde{\mu}_{m1}$, $\tilde{\mu}_{m2}$ とすると (ただし、 $\theta_M = 0$ の場合は $\tilde{\mu}_{m1} = \tilde{\mu}_{m2} = \tilde{\mu}_m$)、先行研究では $\tilde{M} < 1$ の場合には $\tilde{\mu} > \tilde{\mu}_{g1}$ の場合のみ調べられていたが (ただし、異常ホール伝導度を除く)、本論文では、 $\tilde{\mu} > \tilde{\mu}_{m1}$ (ディラック系が成立する化学ポテンシャルの範囲) を扱う。また、 $\theta_M = \pi/2$ の場合はギャップがつぶれてディラック点となるが ($\tilde{\mu}_{g1} = \tilde{\mu}_{g2} = \tilde{\mu}_D$)、この場合には、先行研究では $\tilde{\mu} > \tilde{\mu}_D$ の範囲を扱っていたが、本論文では $\tilde{\mu} > \tilde{\mu}_{m1}$ を扱う (図 3.1(f), 3.2(f))。

また、このモデルにおいて速度は

$$v_{\mathbf{k}} = \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + \hat{z} \times \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.9)$$

与えられる。ディラック系の立場で考えると、第二項は “normal” velocity (“通常”速度)、第一項は粒子正孔対称性

を破る “anomalous” velocity (“異常”速度) である。第一項によってスピンと速度の等価性も破られているため、電気伝導と本質的に異なるスピン軌道トルクが生じることが期待される。

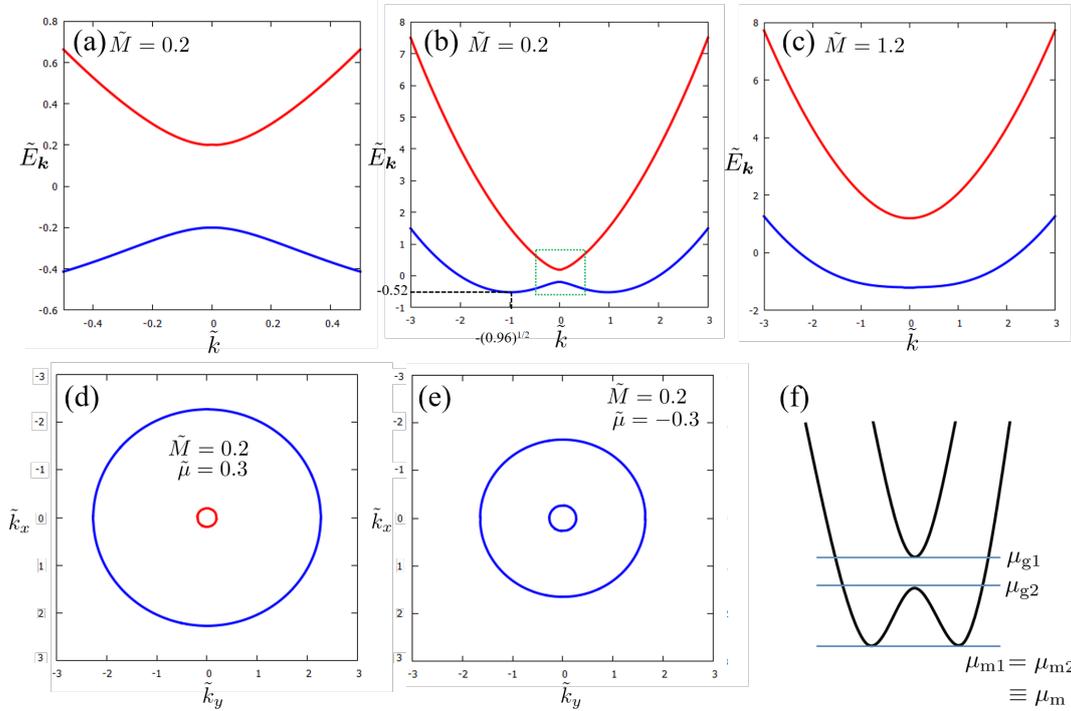


図 3.1: $\theta_M = 0$, $\tilde{M} = 0.2$ (a, b, d, e), $\tilde{M} = 1.2$ (c) の場合のバンド構造とフェルミ面 (a) デイラック系のバンド構造 (ギャップ付近)、(b) ラッシュバ系のバンド構造 (緑色の点線に囲まれた部分が (a) に対応する)、(c) $\tilde{M} = 1.2$ の場合のラッシュバ系のバンド構造 (デイラック的な構造が消失する)、(d) $\tilde{\mu} = 0.2$ の場合のフェルミ面、(e) $\tilde{\mu} = -0.2$ の場合のフェルミ面、(f) 特徴的な化学ポテンシャルの値。

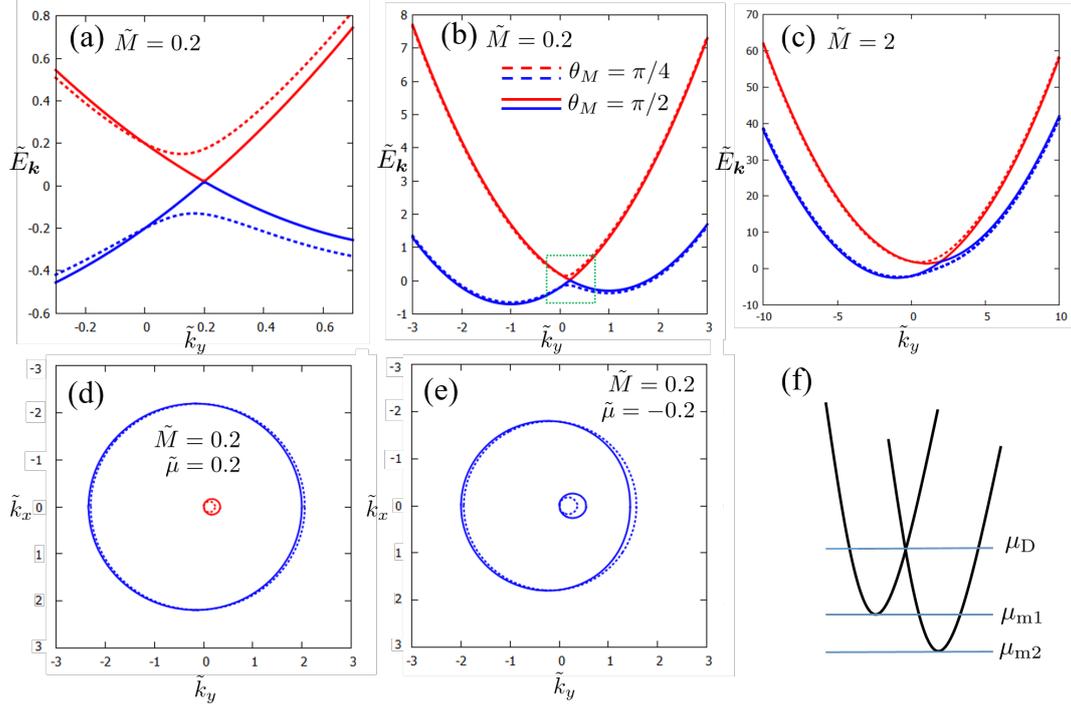


図 3.2: $\theta_M = \pi/2$, $\phi_M = 0$ (実線)、 $\theta_M = \pi/4$ かつ $\phi_M = 0$ (点線)、 $\tilde{M} = 0.2$ (a, b, d, e), $\tilde{M} = 2$ (c) の場合のバンド構造とフェルミ面。(a) ディラック系のバンド構造 (ギャップ付近)、(b) ラッシュバ系のバンド構造 (緑色の点線に囲まれた部分が (a) に対応する)、(c) $\tilde{M} = 2$ の場合のラッシュバ系のバンド構造 (type II ディラック的な構造が現れる)、(d) $\tilde{\mu} = 0.2$ の場合のフェルミ面、(e) $\tilde{\mu} = -0.2$ の場合のフェルミ面、(f) 特徴的な化学ポテンシャルの値。

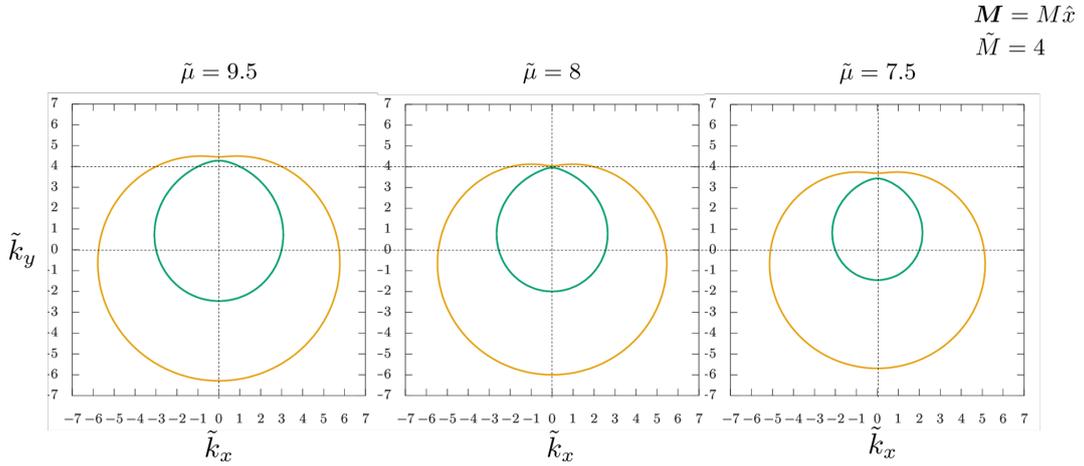


図 3.3: \tilde{M} が大きい場合のディラック点付近のフェルミ面 ($\mathbf{M} = M\hat{x}$, $\tilde{M} = 0.4$, $\tilde{\mu} = 9.5, 8.5, 7.5$)。

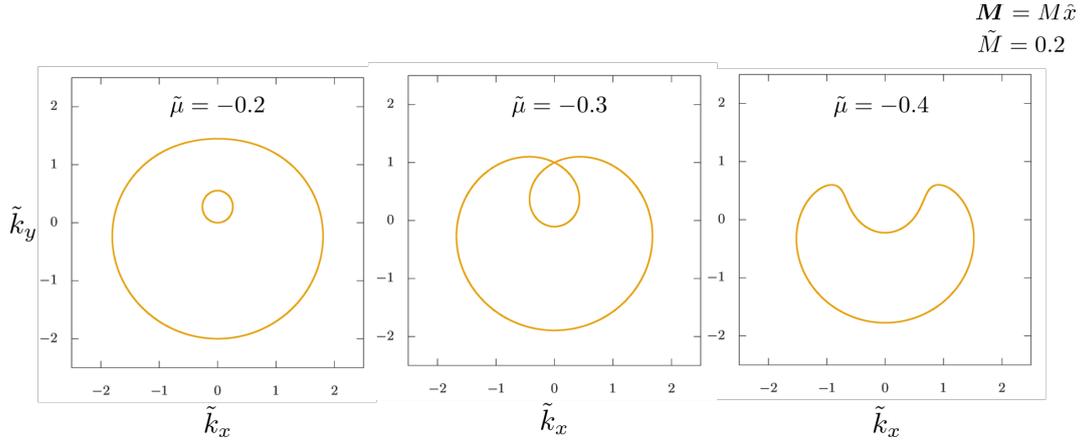


図 3.4: 化学ポテンシャルが負で大きい場合のフェルミ面 ($M = M\hat{x}$, $\tilde{M} = 0.2$, $\tilde{\mu} = -0.2, -0.3, -0.4$)。本研究ではディラック系と見なせる領域である $\tilde{\mu} > -0.3$ の領域を扱う。

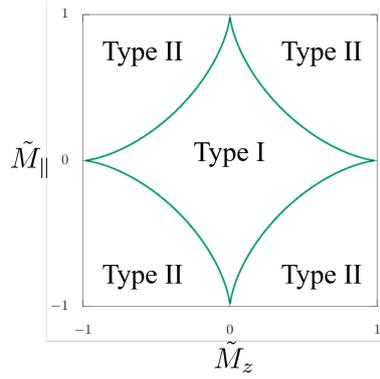


図 3.5: \tilde{M}_z - \tilde{M}_{\parallel} 平面における Type I と Type II の相図。

3.1.2 グリーン関数

グリーン関数は以下のように与えられる。

$$G_{\mathbf{k}}^{\text{R}} = (g_0^{\text{R}} + \mathbf{g}^{\text{R}} \cdot \boldsymbol{\sigma})(D^{\text{R}})^{-1}. \quad (3.10)$$

ここで

$$g_0^{\text{R}} = \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} + i\Gamma_0, \quad (3.11)$$

$$\mathbf{g}^{\text{R}} = \begin{pmatrix} g_x^{\text{R}} \\ g_y^{\text{R}} \\ g_z^{\text{R}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{\text{F}}k_y - M_x + i\Gamma_x \\ -v_{\text{F}}k_x - M_y + i\Gamma_y \\ -M_z + i\Gamma_z \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

とした。また、 $D^{\text{R}} = (g_0^{\text{R}})^2 - (\mathbf{g}^{\text{R}})^2$ とした。不純物の効果をボルン近似で評価すると以下ようになる。

$$\Sigma^{\text{R}}(\mu) = n_{\text{i}}u_{\text{i}}^2 \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\mu) \equiv \Sigma^0 + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.13)$$

ここで、 $\Gamma_{\mu} = -\text{Im}\Sigma_{\mu}$ がダンピングパラメータとなる。ダンピングは内側のフェルミ面による寄与と外側のフェルミ面による寄与に分けることが出来、それぞれ、 Γ_{μ}^{-} , Γ_{μ}^{+} とする。ディラック系では

$$\Gamma_{\mu} = \Gamma_{\mu}^{-}, \quad (3.14)$$

ラシュバ系では

$$\Gamma_\mu = \Gamma_\mu^- + \Gamma_\mu^+, \quad (3.15)$$

がダンピングパラメータとなる。以下では、磁化の方向が一般の場合と、解析解が容易に求まる磁化が面直の場合に分けて考える。

3.1.3 磁化の方向が一般の場合

$\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$ に対しては、 Γ_μ^\pm は以下の積分で与えられる。

$$\Gamma_\mu^\pm = v_F^2 \gamma_0 \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_{\mathbf{k}}}{2\pi} \text{sgn}(g_\pm^0) \frac{sg_\pm^c}{X_\pm} \quad (\mu = 0, x, y, z), \quad (3.16)$$

ここで、 $\phi_{\mathbf{k}}$ は \mathbf{k} が k_x 軸と成す角度であり、 $s = 1$ ($\mu = 0$), $s = -1$ ($\mu = x, y, z$)、 $g_\pm^0 = \mu - \epsilon_{\mathbf{k}\pm}$, $g_\pm^x = v_F k_- \sin\phi - M_x$, $g_\pm^y = -M_y - v_F k_- \cos\phi$, $\gamma = n_i u_0^2 / (4m^* v_F^2)$ であり、

$$X_\pm = \left| 2(\partial_k \epsilon_{\mathbf{k}\pm}) g_\pm^0 + v_F^2 (2k_\pm - \tilde{M}_x \sin\phi_{\mathbf{k}} + \tilde{M}_y \sin\phi_{\mathbf{k}}) \right| / 2k, \quad (3.17)$$

そして、 k_\pm は $(g_\pm^0)^2 - (v_F k_\pm \cos\phi_{\mathbf{k}} + M_y)^2 - (v_F k_\pm \sin\phi_{\mathbf{k}} - M_x)^2 = 0$ の解 ($\phi_{\mathbf{k}}$ に依存する) であり、 $k_+ > k_-$ を満たすものとする。 x 成分と y 成分は線形分散モデルでは消えるが、現在のモデルのように $1/m^* \neq 0$ の場合には、 M_x, M_y がゲージの自由度とはならない (ディラック点の平行移動にはならない) ため、 x 成分と y 成分も有限に残る。

3.1.4 磁化の方向が面直の場合

$\mathbf{M} = (0, 0, M_z)$, $\epsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2m^*$ の場合には、 k_\pm は $\phi_{\mathbf{k}}$ には依存せず、 Γ_μ^\pm は解析的に以下のように求めることが出来る。

$$\left\{ \begin{array}{c} \Gamma_0^\pm \\ \Gamma_z^\pm \end{array} \right\} = v_F^2 \frac{\gamma_0}{X_\pm} \left\{ \begin{array}{c} g_0^\pm \\ M_z \end{array} \right\} \text{sgn}(g_\pm^0). \quad (3.18)$$

ここで、 $\gamma_0 = n_i u_0^2 / 4v_F^2$,

$$X_\pm = |g_\pm^0 / m^* + v_F^2|, \quad (3.19)$$

$$k_\pm = \sqrt{2} m^* \left[\frac{\mu}{m^*} + v_F^2 \pm \sqrt{\left(\frac{\mu}{m^*} + v_F^2 \right)^2 - \frac{\mu^2 - M_z^2}{(m^*)^2}} \right]^{1/2}, \quad (3.20)$$

とした。また、 $\Gamma_\pm^x = \Gamma_\pm^y = 0$ である。 $m^* \rightarrow \infty$ とすると、これらの結果は、以下のように線形分散モデルの結果に帰着する。

$$k_- = \sqrt{2} m^* \left[\frac{\mu}{m^*} + v_F^2 - \left(\frac{\mu}{m^*} + v_F^2 - (\mu^2 - M_z^2) \right)^{1/2} \right]^{1/2} = \sqrt{\mu^2 - M_z^2}, \quad (3.21)$$

$$X_- \simeq |v_F^2|, \quad (3.22)$$

$$\Gamma_0^- = \gamma_0 |\mu|, \quad (3.23)$$

$$\Gamma_z^- = \gamma_0 M_z \text{sgn}(\mu). \quad (3.24)$$

$\theta_M = 0$, または $\theta_M = \pi/4$, $\phi_M = 0$, または $\theta_M = \pi/2$, $\phi_M = 0$ の場合に、 $\epsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2m^*$ として、ディラック系とラシュバ系の $\tilde{\Gamma}^c$ の数値計算の結果を図 3.6 に示す。

ディラック系での $\tilde{\Gamma}_\mu$ の絶対値は、 $1/m^* = 0$ の線形分散モデルと異なり、 μ の符号の違いによって異なったものになる。この性質は k^2/m^* の項による粒子正孔対称性の破れに由来するものである。

ラシュバ系における $\tilde{\Gamma}_\mu$ は、 $\theta_M \neq \pi/2$ の場合にはフェルミ面の枚数が変わるところで不連続になり、また、 $\theta_M = \pi/2$ の場合にはディラック点でカスプ（微分の不連続点）を示す。また、フェルミエネルギーがディラック点より上（上のバンドの極小値より上）にある場合は $\tilde{\Gamma}_x, \tilde{\Gamma}_z$ はゼロになる。これらの特徴的な結果は物理量に直接的に影響を与える。また、 $\tilde{\Gamma}_0$ は $\tilde{M}, \tilde{\mu}$ に依存しない定数

$$\tilde{\Gamma}_0 = 2, \tag{3.25}$$

となる。このようなラシュバ系における特殊性は、カツツ・ムーディー・フィボナッチ数列と呼ばれる数列と関係があることを付録 E で示す。

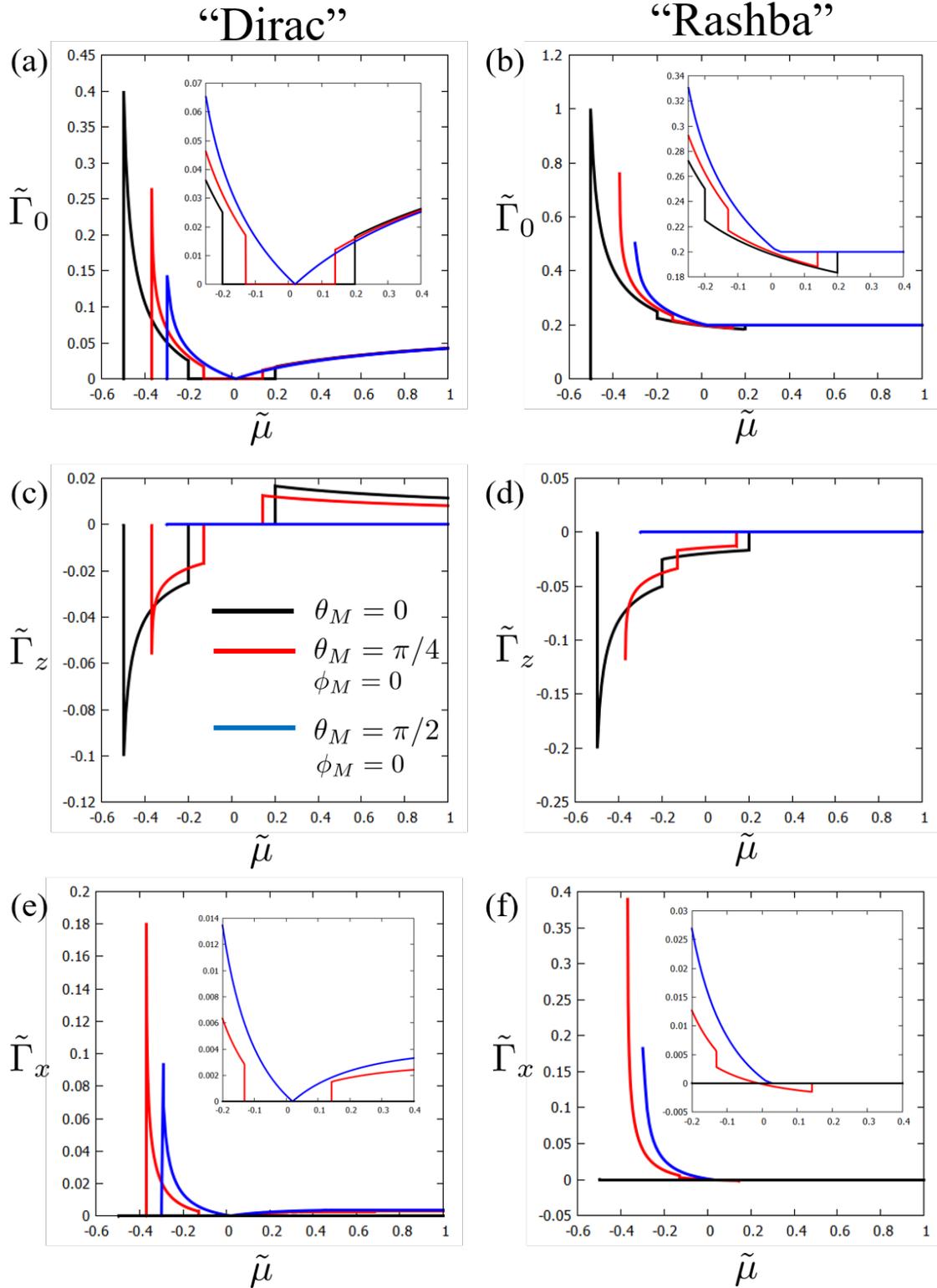


図 3.6: (a) $\tilde{\Gamma}_-^0$, (b) $\tilde{\Gamma}_-^0 + \tilde{\Gamma}_+^0$, (c) $\tilde{\Gamma}_z^-$, (d) $\tilde{\Gamma}_z^- + \tilde{\Gamma}_z^+$, (e) $\tilde{\Gamma}_x^-$, (f) $\tilde{\Gamma}_x^- + \tilde{\Gamma}_x^+$. ただし、 $\gamma = 0.1$, $\tilde{M} = 0.2$, $\theta_M = 0$ (黒)、 $\theta_M = \pi/4$, $\phi_M = 0$ (赤)、 $\theta_M = \pi/2$, $\phi_M = 0$ (青)。

3.2 電気伝導度とスピン軌道トルクの定式化

3.2.1 定式化

この節では、ディラック系とラシュバにおけるスピン軌道トルクと電気伝導度の定式化について説明する。磁化の一般的な面内成分の効果も取り入れているので、ダンピングの x, y, z 成分が現れるなど、ヘキサゴナル・ワーピング項がある場合の定式化とは異なる部分がある。また、スカラー部分の波数依存性は一般的に ϵ_k として定式化を行う。まず、スピン軌道トルクを生み出す電子のスピン密度 ($s_0 \mathbf{t} = \mathbf{M} \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$) と、電気伝導度は、電場の一次の範囲で一般に以下のように与えられる。

$$\langle \sigma_\alpha \rangle = \frac{-e}{2\pi v_F} \chi_{\alpha j} E_j, \quad (3.26)$$

$$\langle j_i \rangle = \frac{e^2}{2\pi} \sigma_{ij} E_j. \quad (3.27)$$

磁化が面直の場合 ($\theta_M = 0$) には σ_{xx} は等方的であり、 σ_{xy} は異常ホール成分のみを持つ。磁化が面内の場合 ($\theta_M = \pi/2$) には、 σ_{xx} は等方成分と AMR 成分を持ち、 σ_{xy} は PHE 成分のみを持つ。 $\theta_M = \pi/4$ の場合には、 σ_{xx} は等方成分と AMR 成分を持ち、 σ_{xy} は異常ホール成分と PHE 成分を共に持つ。 χ_{ij} についても同様な性質が成り立つ。

また、線形ディラックでは面直方向のスピン密度は現れなかったが、今回扱うモデルでは、面直方向のスピン密度も新たに生じる。

これらの係数をグリーン関数を用いて表すために、次の量を定義する。

$$\langle P; Q \rangle^{\text{surf}} \equiv \sum_{\mathbf{k}} \{ \text{tr}[P G^R Q G^A] - \text{Re tr}[P G^R Q G^R] \}, \quad (3.28)$$

$$\langle P; Q \rangle^{\text{sea}} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\varepsilon \{ \text{tr}[P G^R Q (\partial_\varepsilon G^R)] - (G^R \rightarrow G^A) \} - (P \leftrightarrow Q). \quad (3.29)$$

ここで、 P と Q は一体の物理量 (スピンや速度) であり、 $p = \partial H / \partial P$ 、 $q = \partial H / \partial Q$ はそれらに共役な量である (例えば、速度と波数、スピンと磁化は互いに共役な関係になっている)。式 (3.28) は Fermi-surface term と呼ばれ、式 (3.28) の第二項は γ の高次であるか、もしくは消えるので、本論文では、次のように近似する。

$$\langle P; Q \rangle^{\text{surf}} \simeq \sum_{\mathbf{k}} \text{tr}[P G^R Q G^A]. \quad (3.30)$$

式 (3.29) は Fermi-sea term と呼ばれ、 δ 関数 (フェルミ面) による寄与 (sea1) と θ 関数 (フェルミ海) による寄与 (sea2) の二つの寄与があり、次式のように表すことができる。

$$\langle P; Q \rangle^{\text{sea}} = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} \left[g_0^2 \delta(g^2 - (g^0)^2) - \frac{1}{2} \theta(-(g^0)^2 + g^2) \right] \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} & \times \hat{\mathbf{g}} \cdot (\partial_p \hat{\mathbf{g}} \times \partial_q \hat{\mathbf{g}}) \\ & = \langle P; Q \rangle^{\text{sea1}} + \langle P; Q \rangle^{\text{sea2}}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

Sea2 項は、 $x = k_x, y = k_y$ とすると、ベリー曲率となる。

これらを用いると、

$$\chi_{\alpha j} = \chi_{\alpha j}^{\text{surf}} + \chi_{\alpha j}^{\text{sea1}} + \chi_{\alpha j}^{\text{sea2}}, \quad (3.33)$$

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{\text{surf}} + \sigma_{ij}^{\text{sea1}} + \chi_{ij}^{\text{sea2}}, \quad (3.34)$$

$$\chi_{\alpha j}^{\text{surf/sea}} = v_F \langle \sigma'_\alpha; v_j \rangle^{\text{surf/sea}}, \quad (3.35)$$

$$\sigma_{ij}^{\text{surf/sea}} = \langle v_i; v_j \rangle^{\text{surf/sea}}, \quad (3.36)$$

と表すことが出来る。 $C = \chi_{ij}, \sigma_{ij}$ に対して、ディラック系とラシュバ系の Fermi surface term と Fermi sea 1 term は以下のように計算できる。

$$\text{“ディラック系”}: C^{\text{surf}} = C_{-}^{\text{surf}},$$

$$\text{“ラシュバ系”}: C^{\text{surf}} = C_{-}^{\text{surf}} + C_{+}^{\text{surf}}.$$

$$\text{“ディラック系”}: C^{\text{sea1}} = C_{-}^{\text{sea1}},$$

$$\text{“ラシュバ系”}: C^{\text{sea1}} = C_{-}^{\text{sea1}} + C_{+}^{\text{sea1}}.$$

ここで C_{ζ} はフェルミ面を指定する指数 ($\zeta = +1$: 外側のフェルミ面, $\zeta = -1$: 内側のフェルミ面) である。ここで、ラシュバ系におけるダンピングに関する和 (式 (3.15) の和) は、 C_{+}^{surf} の波数和の中、 C_{-}^{surf} の波数和の中のそれぞれでとられる (Γ_{μ}^{\pm} がそれぞれ C_{\pm}^{surf} に含まれるのではない) ことに注意が必要である。すなわち、実際の計算結果 (式 (3.40) から式 (3.47), 式 (3.58) から式 (3.67) など) に含まれるダンピングは、ラシュバ系に対しては土に関して和をとったものである。また、Fermi sea 2 term に関しては、 θ 関数によって以下の積分

$$\int \frac{d\phi}{2\pi} \int_{k_{-}}^{k_{+}} dk, \quad (3.37)$$

の形にまとめることができ、 $k_{+} \rightarrow \infty$ とすることでディラック系の結果を得ることが出来る。ディラック系とラシュバ系の違いは以下のような模式図で表すことが出来る (図 3.7)。これまでの定式化では、 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ を一般の関数としていたが、 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ として波数が小さいところでは k^2 に比例し、波数が大きいところでは定数か高々線形の関数になるようなもの (図 3.7 の $\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{D}}$) を選べば、外側のフェルミ面が表れない状況を実現することが出来る。したがって、適切な $\epsilon_{\mathbf{k}}$ を選ぶことで、これまで行ってきたディラック系の定式化を正当化することが出来る。 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ として $k^2/2m^*$ を選ぶと、ディラック系のバンド $\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{D}}$ では、下のバンドが極小値に到達する前にバルクのバンドにかかるが、ラシュバ系に対応するバンド $\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{R}}$ では下のバンドが極小値を超えると上に上がっていき、2枚のフェルミ面を作る。

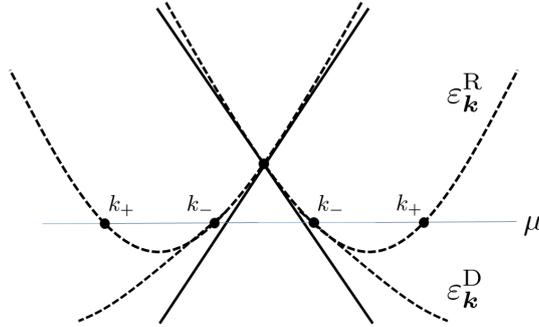


図 3.7: ディラック系とラシュバ系のバンドの模式図。

3.2.2 磁化の方向が一般の場合

$\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$ とすると、それぞれの応答係数は以下のように与えられる。

$$\sigma_{ij}^{\text{surf}} = \sigma_{ij}^{\text{surf}(1)} + \sigma_{ij}^{\text{surf}(2)} + \sigma_{ij}^{\text{surf}(3)}, \quad (3.38)$$

$$\chi_{\alpha j}^{\text{surf}} = \chi_{\alpha j}^{\text{surf}(1)} + \chi_{\alpha j}^{\text{surf}(2)} + \chi_{\alpha j}^{\text{surf}(3)} + \chi_{\alpha j}^{\text{surf}(4)}. \quad (3.39)$$

ここで

$$\sigma_{ij}^{\text{surf}(1)} = \langle v_{i,\eta} v_{j,\eta} \rangle_{\mathbf{k}\eta}, \quad (3.40)$$

$$\sigma_{ij}^{\text{surf}(2)} = \langle v_F^2 \epsilon_{\alpha i} \delta_{\alpha j} \hat{g}_z \Delta_{\mathbf{k}\eta} \rangle_{\mathbf{k}\eta}, \quad (3.41)$$

$$\sigma_{ij}^{\text{surf}(3)} = \langle \eta v_F^2 \epsilon_{\alpha i} \delta_{\alpha j} \Gamma_z^{\text{perp}} \rangle_{\mathbf{k}\eta}, \quad (3.42)$$

$$\sigma_{ij}^{\text{surf}(4)} = \langle v_F \epsilon_{ij} \epsilon^{\alpha\beta} (\hat{g}_\alpha v'_\beta \Gamma^z - \hat{g}_z v'_\alpha \Gamma^\beta) \rangle_{\mathbf{k}\eta}, \quad (3.43)$$

$$\chi_{\alpha j}^{\text{surf}(1)} = v_F \langle \eta \hat{g}_\alpha v_{j,\eta} \rangle_{\mathbf{k}\eta}, \quad (3.44)$$

$$\chi_{\alpha j}^{\text{surf}(2)} = v_F^2 \langle v_F (\delta_{\alpha j} \hat{g}_z - \delta_{\alpha z} \hat{g}_j) \Delta_{\mathbf{k}\eta} \rangle_{\mathbf{k}\eta}, \quad (3.45)$$

$$\chi_{\alpha j}^{\text{surf}(3)} = v_F^2 \langle \eta v_F (\delta_{\alpha\beta} \Gamma_z^{\text{perp}} - \delta_{\alpha z} \Gamma_j^{\text{perp}}) \rangle_{\mathbf{k}\eta}, \quad (3.46)$$

$$\chi_{\alpha j}^{\text{surf}(4)} = -v_F \langle \epsilon_{\alpha\beta\gamma} v'_j (\hat{g}_\beta \Gamma^\gamma - \hat{g}_\gamma \Gamma^\beta) \rangle_{\mathbf{k}\eta}, \quad (3.47)$$

また、

$$\langle X \rangle_{\mathbf{k}\eta} = 2\pi \sum_{\mathbf{k}\eta} \frac{X}{2g\Delta_{\mathbf{k}\eta}} \delta(\mu - E_{\mathbf{k}\eta}) \theta_{\text{band}}, \quad (3.48)$$

であり、ここで、 η はバンド指数を表し (フェルミ面に対する指標との対応は次節で示す)、 $\hat{g}_\alpha = g_{\mathbf{k}\alpha}/g$, $E_{\mathbf{k}\eta} = \frac{k^2}{2m^*} - \eta g$, $\mathbf{v}_{\mathbf{k}\eta} = \frac{\mathbf{k}}{m^*} - \eta v_F (\hat{z} \times \hat{\mathbf{g}})$, $\Delta_{\mathbf{k}\eta} = \Gamma^0 + \eta \hat{\mathbf{g}} \cdot \boldsymbol{\Gamma}$, $\Gamma_\gamma^{\text{perp}} = [\Gamma_\gamma - \hat{g}_\gamma (\hat{\mathbf{g}} \cdot \boldsymbol{\Gamma})]$, θ_{band} はフェルミ面がある場合に 1、無い場合には 0 となる関数である。それぞれの寄与に対する解釈を考えるために、グリーン関数を以下の形に表す。

$$G_{\mathbf{k}}^{\text{R}} = \sum_{\eta=\pm 1} \frac{\hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^{\text{R}}}{\mu - E_{\mathbf{k}\eta} + i\Delta_{\mathbf{k}\eta}}. \quad (3.49)$$

ここで、 $\hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^{\text{R}}$ はバンド η の波動関数およびダンピング γ の情報を含む 2×2 行列である。さらに、 $\hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^0 = \hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^{\text{R}}(\gamma = 0)$, $\hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^1 = \hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^{\text{R}} - \hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^0$ とする。このとき、 $\sigma_{ij}^{\text{surf}(1)}$ ($\chi_{\alpha j}^{\text{surf}(1)}$) は二つの $\hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^0$ によるバンド内の寄与である。 $\sigma_{ij}^{\text{surf}(2)}$ ($\chi_{\alpha j}^{\text{surf}(2)}$) は \mathbf{v}_0 は、二つの“通常”速度 (スピン) と、二つの $\hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^0$ によるバンド間の寄与である。 $\sigma_{ij}^{\text{surf}(3)}$ ($\chi_{\alpha j}^{\text{surf}(3)}$) は、二つの“通常”速度 (スピン) と、 $\hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^0$ と $\hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^1$ によるバンド内の寄与である。 $\sigma_{ij}^{\text{surf}(4)}$ ($\chi_{\alpha j}^{\text{surf}(4)}$) は、通常速度 (スピン) と異常速度、 $\hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^0$ と $\hat{z}_{\mathbf{k}\eta}^1$ によるバンド内の寄与である。

また、 $m^* \rightarrow \infty$ の極限で、 $\sigma_{ij}^{\text{surf}(2)}$ は $e^2 M_z / 4\pi \hbar |\mu|$ となる。これは以下の量と等しい。

$$\left. \frac{e^2}{4\pi} \frac{g_0 \Gamma^z - g_z \Gamma^0}{g_0 \Gamma^0 + g_z \Gamma^z} \text{sgn}(g_0) \right|_{\Gamma^z=0}. \quad (3.50)$$

この量は線形分散モデルにおいて $\Gamma_z = 0$ として計算した結果、すなわち、不純物の効果を見捨て単位行列に比例する無限小の虚部を入れて計算した結果である [88]。

また、有限に残る Fermi-sea term は以下のようになる。

$$\begin{aligned} \chi_{yy}^{\text{sea}} = \sigma_{xy}^{\text{sea}} &= -2 \int \frac{d\phi_{\mathbf{k}}}{2\pi} \frac{(g^0)^2 M_z}{2g^3 X} \\ &+ \int \frac{d\phi_{\mathbf{k}}}{2\pi} \int_0^\infty dk \frac{1}{2} k \frac{M_z}{g^3} \theta(-(g^0)^2 + g^2), \end{aligned} \quad (3.51)$$

$$\chi_{zx}^{\text{sea}} = -2 \int \frac{d\phi_{\mathbf{k}}}{2\pi} \frac{(g^0)^2 g^x}{2X g^3} + \int \frac{d\phi_{\mathbf{k}}}{2\pi} \int_0^\infty dk k \frac{g^x}{2g^3} \theta(-(g^0)^2 + g^2). \quad (3.52)$$

3.2.3 スピン表示

グリーン関数をパウリ行列で分解して得られるそれぞれの成分によって $\sigma_{xx}^{\text{surf}}$, $\sigma_{xy}^{\text{surf}}$, χ_{yx}^{surf} , χ_{yy}^{surf} , χ_{zx}^{surf} を表すことを考える。まず、

$$\sigma_{xx}^{\text{surf}} = A_1^{\text{surf}} + \bar{A}_1^{\text{surf}} + \bar{A}_2^{\text{surf}} + \bar{\bar{A}}^{\text{surf}}, \quad (3.53)$$

$$\sigma_{xy}^{\text{surf}} = B_1^{\text{surf}} + \bar{B}_1^{\text{surf}} + \bar{B}_2^{\text{surf}} + \bar{\bar{B}}^{\text{surf}}, \quad (3.54)$$

$$\chi_{yx}^{\text{surf}} = A_1^{\text{surf}} + \bar{A}_1^{\text{surf}}, \quad (3.55)$$

$$\chi_{yy}^{\text{surf}} = B_1^{\text{surf}} + \bar{B}_1^{\text{surf}}, \quad (3.56)$$

$$\chi_{zx}^{\text{surf}} = D_1^{\text{surf}} + \bar{D}_1^{\text{surf}}, \quad (3.57)$$

とする。ただし、 \bar{X} は相関関数の中で異常速度を一つ含む寄与、 $\bar{\bar{X}}$ は相関関数の中で異常速度を二つ含む寄与であり、それぞれ次のように表すことができる。

$$A_1^{\text{surf}} = \langle v_x^0; v_x^0 \rangle^{\text{surf}} = 2\pi v_F^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{g_0^2 - g_x^2 + g_y^2 - g_z^2}{\Gamma} \delta(g_0^2 - g^2) \text{sgn}(g_0), \quad (3.58)$$

$$\bar{A}_1^{\text{surf}} = \langle v_x^0; v_x' \rangle^{\text{surf}} = -4\pi v_F \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{g_y g_0 + g_z \Gamma_x - g_x \Gamma_z}{\Gamma} \delta(g_0^2 - g^2) \text{sgn}(g_0), \quad (3.59)$$

$$\bar{A}_2^{\text{surf}} = \langle v_x'; v_x^0 \rangle^{\text{surf}} = -4\pi v_F \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{g_y g_0 - g_z \Gamma_x + g_x \Gamma_z}{\Gamma} \delta(g_0^2 - g^2) \text{sgn}(g_0), \quad (3.60)$$

$$\bar{\bar{A}}^{\text{surf}} = \langle v_x'; v_x' \rangle^{\text{surf}} = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 \frac{g_0^2 + g_x^2 + g_y^2 + g_z^2}{\Gamma} \delta(g_0^2 - g^2) \text{sgn}(g_0), \quad (3.61)$$

$$B_1^{\text{surf}} = \langle v_x^0; v_y^0 \rangle^{\text{surf}} = -4\pi v_F^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{g_y g_x + g_z \Gamma_0 - g_0 \Gamma_z}{\Gamma} \delta(g_0^2 - g^2) \text{sgn}(g_0), \quad (3.62)$$

$$\bar{B}_1^{\text{surf}} = \langle v_x^0; v_y' \rangle^{\text{surf}} = -4\pi v_F \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \frac{g_y g_0 + g_z \Gamma_x - g_x \Gamma_z}{\Gamma} \delta(g_0^2 - g^2) \text{sgn}(g_0), \quad (3.63)$$

$$\bar{B}_2^{\text{surf}} = \langle v_x'; v_y^0 \rangle^{\text{surf}} = 4\pi v_F \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{g_x g_0 + g_z \Gamma_y - g_y \Gamma_z}{\Gamma} \delta(g_0^2 - g^2) \text{sgn}(g_0), \quad (3.64)$$

$$\bar{\bar{B}}^{\text{surf}} = \langle v_x'; v_y' \rangle^{\text{surf}} = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \frac{g_0^2 + g_x^2 + g_y^2 + g_z^2}{\Gamma} \delta(g_0^2 - g^2) \text{sgn}(g_0), \quad (3.65)$$

$$D_1^{\text{surf}} = -\langle \sigma^z; v_x^0 \rangle^{\text{surf}} = 4\pi v_F \sum_{\mathbf{k}} \frac{g_z g_y + g_x \Gamma_0 - g_0 \Gamma_x}{\Gamma} \delta(g_0^2 - g^2) \text{sgn}(g_0), \quad (3.66)$$

$$\bar{D}^{\text{surf}} = -\langle \sigma^z; v_x' \rangle^{\text{surf}} = -4\pi \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{g_z g_0 + g_x \Gamma_y - g_y \Gamma_x}{\Gamma} \delta(g_0^2 - g^2) \text{sgn}(g_0). \quad (3.67)$$

この結果とバンド指標を用いた前節の結果の対応は、以下の関係式によって示すことができる。

$$\Gamma = 2(g_0 \Gamma_0 - \mathbf{g} \cdot \Gamma) = 2g_0 \Delta_{\mathbf{k}\eta}, \quad (3.68)$$

$$\delta(g_0^2 - g^2) = \delta[(\mu - E_{\mathbf{k}+})(\mu - E_{\mathbf{k}-})] = \frac{\delta(\mu - E_{\mathbf{k}+}) + \delta(\mu - E_{\mathbf{k}-})}{2g} \quad (3.69)$$

$$(g_0^2 - g_x^2 + g_y^2 - g_z^2) \delta(g_0^2 - g^2) = 2g_y^2 \delta(g_0^2 - g^2), \quad (3.70)$$

$$(g_0^2 + g_x^2 + g_y^2 + g_z^2) \delta(g_0^2 - g^2) = 2g^2 \delta(g_0^2 - g^2). \quad (3.71)$$

また、 k_- , k_+ とバンド指標は以下のように対応する。 $\theta_M = 0$, $\pi/4$ の場合を考える。このとき、上のバンドの最小値に対応する μ_{g1} に対して、 $\mu > \mu_{g1}$ の場合には、 k_{\pm} は $\eta = \pm 1$ に対応する。下のバンドの極大値に対応する μ_{g2} に対

して、 $\mu_{g1} > \mu > \mu_{g2}$ の場合には、 k_+ のみが寄与し、 $\eta = +1$ に対応する。下のバンドの上の極小値に対応する μ_{m1} に対して、 $\mu_{g2} > \mu > \mu_{m1}$ の場合には、 k_+ と k_- が寄与し、 $\eta = -1$ に対応する。下のバンドの最小値 μ_{m2} に対して、 $\mu_{m1} > \mu > \mu_{m2}$ の場合には、 k_+ が寄与し、 $\eta = +1$ に対応する。 $\theta_M = \pi/2$ の場合には $\mu_{g1} = \mu_{g2} = \mu_D$ となる。

3.2.4 磁化が面直の場合

$\mathbf{M} = M_z \hat{z}$, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2m^*$ の場合には、 γ の最低次では以下のような解析的な結果が得られる。まず、Fermi surface term は、

$$\chi_{yx}^{\text{surf}} = \left[(v_F k_{\pm})^2 + (v_F k_{\pm})^2 \frac{g_{0\pm}}{m^* v_F^2} \right] Y \Big|_{k=k_{\eta}}, \quad (3.72)$$

$$\chi_{yy}^{\text{surf}} = \left[2v_F^2 (g_{0\pm} \Gamma^z + M_z \Gamma^0) + \frac{k_{\pm}^2}{m^*} \Gamma^z \right] Y \Big|_{k=k_{\eta}}, \quad (3.73)$$

$$\sigma_{xx}^{\text{surf}} = \left[(v_F k_{\pm})^2 + 2(v_F k_{\pm})^2 \frac{g_{0\pm}}{m^* v_F^2} + (v_F k_{\pm})^2 \frac{g_{0\pm}^2}{(m^* v_F^2)^2} \right] Y \Big|_{k=k_{\eta}}, \quad (3.74)$$

$$\sigma_{xy}^{\text{surf}} = \left[2v_F^2 (g_{0\pm} \Gamma^z + M_z \Gamma^0) + 2 \frac{k_{\pm}^2}{m^*} \Gamma^z \right] Y \Big|_{k=k_{\eta}}, \quad (3.75)$$

$$\chi_{yz}^{\text{surf}} = 0, \quad (3.76)$$

となる。ここで、 $Y = v_F^2 k \operatorname{sgn}(g_0) \Theta_{\text{band}}/2\Gamma X$, $g_{0\pm} = g_0(k_{\pm})$, $\Theta_{\text{band}} = \theta(|\mu| - |M_z|)$,

$$\Gamma = 2(g_-^0 \Gamma_-^0 - g^z \Gamma_-^z) \text{ (for "Dirac")}, \quad (3.77)$$

$$= 2(g_{\eta}^0 (\Gamma_-^0 + \Gamma_+^0) - g^z (\Gamma_-^z + \Gamma_+^z)) \text{ (for "Rashba")}, \quad (3.78)$$

である。また、Fermi-sea term は以下ようになる。

$$\chi_{yy}^{\text{sea}} = \sigma_{xy}^{\text{sea}} = \frac{1}{2} \operatorname{sgn}(M_z) \Theta_{\text{gap}} \text{ (for "Dirac")}, \quad (3.79)$$

$$\begin{aligned} \chi_{yy}^{\text{sea}} = \sigma_{xy}^{\text{sea}} = & \left(-\frac{M_z}{2|g_+^0|X_+} + \frac{1}{2} - \frac{M_z}{2|g_+^0|} \right) \Theta_{\text{gap}} \\ & - \left(\frac{M_z}{2|g_-^0|X_-} + \frac{M_z}{2|g_+^0|X_+} + \frac{M_z}{2|g_-^0|} - \frac{M_z}{2|g_+^0|} \right) \Theta_{\text{band}} \\ & \text{(for "Rashba")}. \end{aligned} \quad (3.80)$$

ただし、 $\Theta_{\text{gap}} = \theta(-|\mu| + |M_z|)$ である。 $|\mu| < |M_z|$ の場合には、フェルミ面からの寄与はなくなり、ベリー曲率の全波数に関する和で与えられる。 $m^* \rightarrow \infty$ の極限では、線形分散モデルの結果に帰着する [88]。

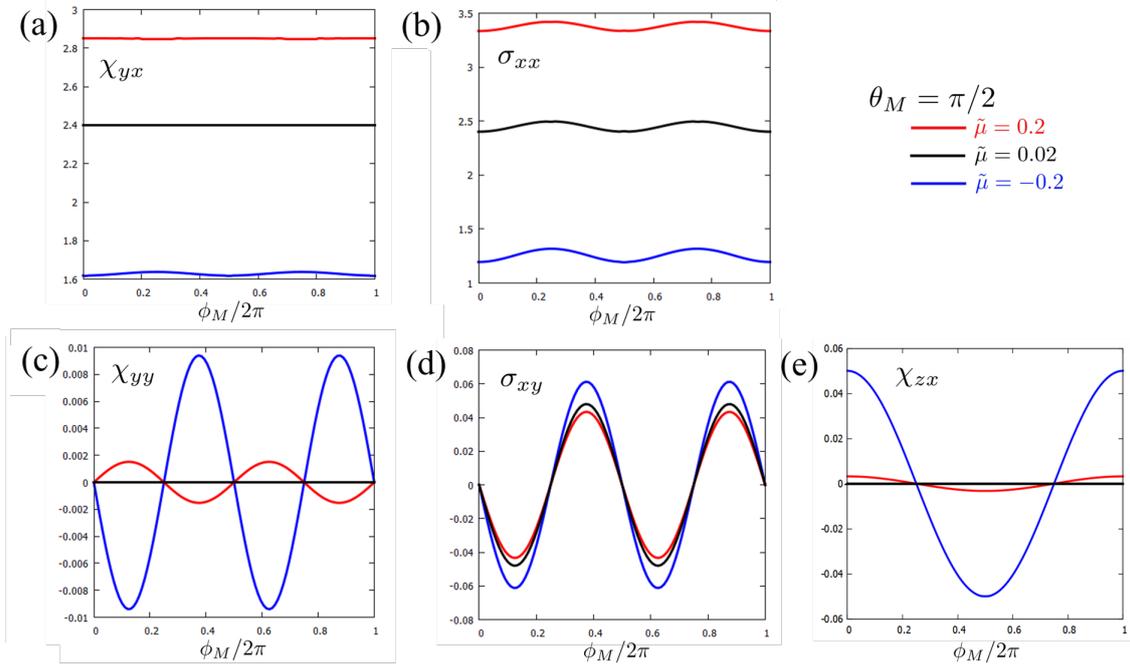


図 3.8: 面内磁化角度依存性 ($\mathbf{M} = M(\cos \phi_M, \sin \phi_M, 0)$)。 (a) χ_{yx} , (b) σ_{xx} , (c) χ_{yy} , (d) σ_{xy} , (e) χ_{zx} , ただし、 $\tilde{M} = 0.2$, $\tilde{\mu} = 0.2$ (赤線)、 -0.2 (青線)、 0.02 (黒線)。

3.3 ϕ_M 依存性

以下では、 $\varepsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2m^*$ とする。この節では、粒子正孔対称性が破れたディラック系におけるスピン軌道トルク、電気伝導の面内磁化角度 (ϕ_M) 依存性について調べる。図 3.8 は、 $\tilde{M} = 0.2$, $\tilde{\mu} = 0.2, -0.2, 0.02$ に対する、 $\theta_M = \pi/2$ の場合のプロットの結果であり、図 3.9 は、 $\tilde{M} = 0.2$, $\tilde{\mu} = 0.2, -0.2$ に対する $\theta_M = \pi/4$ の場合のプロットの結果である。

まず、全ての物理量に共通することとして、 $\tilde{\mu} = 0.2$ の場合と $\tilde{\mu} = -0.2$ の場合のふるまいの違いがある。この性質は粒子正孔対称性の破れの効果によるものである。特に、 $\tilde{\mu} = -0.2$ の場合は $\tilde{\mu} = 0.2$ の場合に比べて異方性が強く表れている。この結果は、フェルミ面の異方性も同様の傾向を示していることから自然な結果である。

$\theta_M = \pi/2$ の場合は、 $\chi_{yx}, \sigma_{xx}, \chi_{yy}, \sigma_{xy}$ は $\cos 2\phi_M$ もしくは $\sin 2\phi_M$ 依存性を示すが、一方で、 χ_{zx} は $\sin \phi_M$ 依存性を示す。また、 χ_{yx} (σ_{xx}) の振動の振幅は、 χ_{yy} (σ_{xy}) の振動の振幅に等しい。

また、 $\theta_M = \pi/4$ の場合は、 $\chi_{yx}, \sigma_{xx}, \chi_{yy}, \sigma_{xy}$ は $\cos(2\phi_M + \alpha)$ もしくは $\sin(2\phi_M + \alpha)$ 依存性を示すが、 χ_{zx} は $\cos(\phi_M + \beta)$ 依存性を示す。

これらの結果は以下のようなそれぞれの係数の分解を与える。次節では、これらの結果を対称性の観点から考える。

$$\chi_{yx} = \chi_{yx}^0 + \chi_{yx}^{\cos} \cos 2\phi_M + \chi_{yx}^{\sin} \sin 2\phi_M, \quad (3.81)$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_{xx}^0 + \sigma_{xx}^{\cos} \cos 2\phi_M + \sigma_{xx}^{\sin} \sin 2\phi_M, \quad (3.82)$$

$$\chi_{yy} = \chi_{yy}^0 + \chi_{yy}^{\sin} \sin 2\phi_M + \chi_{yy}^{\cos} \cos 2\phi_M, \quad (3.83)$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{xy}^0 + \sigma_{xy}^{\sin} \sin 2\phi_M + \sigma_{xy}^{\cos} \cos 2\phi_M, \quad (3.84)$$

$$\chi_{zx} = \chi_{zx}^{\cos} \cos \phi_M + \chi_{zx}^{\sin} \sin \phi_M. \quad (3.85)$$

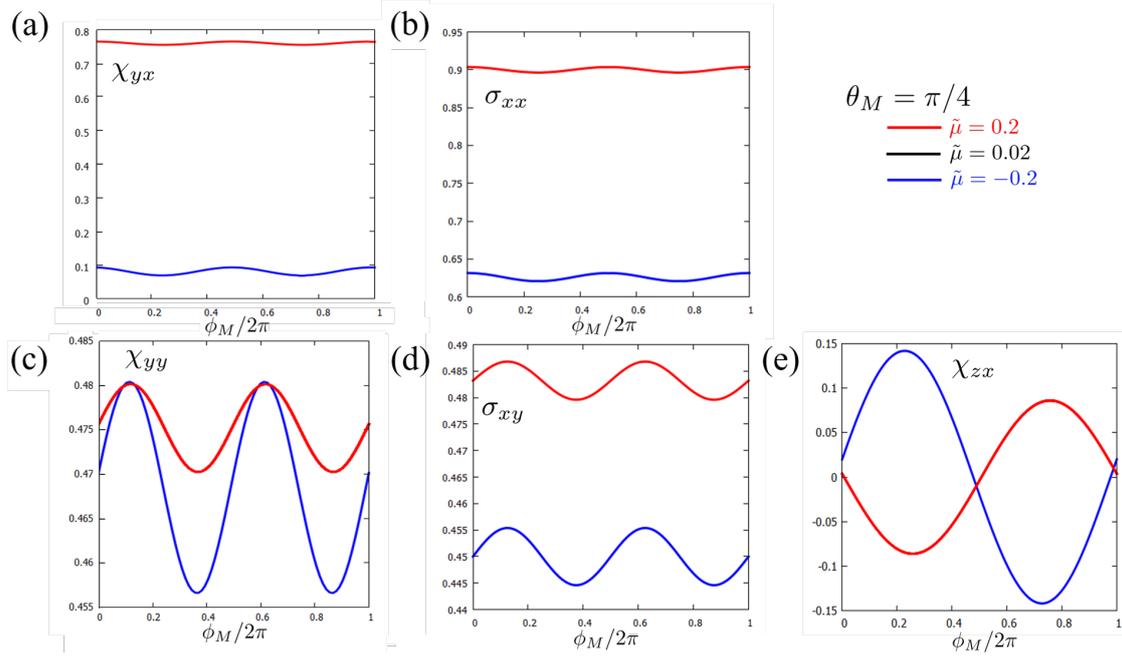


図 3.9: 面内磁化角度依存性 ($\mathbf{M} = M(\cos \phi_M, \sin \phi_M, 0)$)。 (a) χ_{yx} , (b) σ_{xx} , (c) χ_{yy} , (d) σ_{xy} , (e) χ_{zx} , ただし、 $\tilde{M} = 0.2$, $\tilde{\mu} = 0.2$ (赤線)、 -0.2 (青線)。

3.4 対称性

電場 \mathbf{E} の線形の範囲で、磁化 \mathbf{M} がある場合に対称性から許される電流密度 \mathbf{j} の表式は以下のようにまとめることができる。

$$\begin{aligned} \mathbf{j} = & a\mathbf{E} + 2b(\mathbf{M} \cdot \mathbf{E})\mathbf{M}_{\parallel} + 2c(\mathbf{M} \times \mathbf{E})^z(\hat{z} \times \mathbf{M}) \\ & + dM_z(\hat{z} \times \mathbf{E}) + 2eM_z(\mathbf{M} \cdot \mathbf{E})(\hat{z} \times \mathbf{M}) \\ & + 2fM_z(\mathbf{M} \times \mathbf{E})^z\mathbf{M}_{\parallel}. \end{aligned} \quad (3.86)$$

ただし、 \mathbf{M}_{\parallel} は磁化を面内に射影して得られるベクトルである。内積もしくは外積で表されるそれぞれの表式は、波数の二次の項を考慮したディラック系が示す対称性である $C_{\infty v}$ のもとで許されるベクトルの演算であり、係数は、 $C_{\infty v}$ におけるスカラー (A_1 既約表現) である。この係数は $M_{\parallel}^2 \equiv M_x^2 + M_y^2$ および M_z^2 の関数である。

この結果を電気伝導度テンソル表すと以下ようになる。

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & a\delta_{ij} + 2bM_iM_j + 2c\varepsilon_{ik}\varepsilon_{jl}M_kM_l \\ & - dM_z\varepsilon_{ij} - 2M_zM_k(e\varepsilon_{ik}M_j + f\varepsilon_{jk}M_i). \end{aligned} \quad (3.87)$$

$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(0)} + \sigma_{ij}^{(1)} + \sigma_{ij}^{(2)}$ の分解し、それぞれの成分を以下のように定義すると、電気伝導度テンソルの構造が明確になる。

$$\sigma_{ij}^{(0)} = \{a + (b + c)M^2\} \delta_{ij}, \quad (3.88)$$

$$\sigma_{ij}^{(1)} = -M_z \{d\varepsilon_{ij} + (e - f)(\varepsilon_{ik}M_j - \varepsilon_{jk}M_i)M_k\}, \quad (3.89)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^{(2)} = & 2bM_iM_j + 2c\varepsilon_{ik}\varepsilon_{jl}M_kM_l - (b + c)M^2\delta_{ij} \\ & - (e + f)(\varepsilon_{ik}M_j + \varepsilon_{jk}M_i)M_kM_z. \end{aligned} \quad (3.90)$$

$\sigma_{ij}^{(0)}$ は等方成分、 $\sigma_{ij}^{(1)}$ はホール成分、 $\sigma_{ij}^{(2)}$ は AHE-PHE 成分であることが分かる。また、 $\sigma_{ij}^{(2)}$ は、成分表示では以下のようなになる。

$$\sigma_{xx}^{(2)} = (b' - c') \cos 2\phi_M - (e' + f') M_z \sin 2\phi_M, \quad (3.91)$$

$$\sigma_{xy}^{(2)} = (b' - c') \sin 2\phi_M + (e' + f') M_z \cos 2\phi_M. \quad (3.92)$$

ここで、 $b' = M^2 b$, $c' = M^2 c$, $e' = M^2 e$, $f' = M^2 f$ である。

PHE 成分と AHE 成分は同じ振幅を持ち、 $M_z \neq 0$ の場合には、磁化画面内の場合に比べて以下のような位相のずれが現れる。

$$\delta = \tan^{-1}\{(e' + f') M_z / (b' - c')\}. \quad (3.93)$$

ちなみに、回転対称性が C_∞ から C_3 に落ちている系（ヘキサゴナル・ワーピング項がある系）では、 C_3 の二つの E 表現の積 $E \otimes E$ が再び E 表現を作るため、 $\cos n\phi_M$, $\sin n\phi_M$ ($n = 1, 3$) のような依存性も現れる。

面内スピン分極 $\langle \sigma_{\parallel} \rangle$ に関しても、対称性の観点からは $\hat{z} \times \mathbf{j}$ と等価であることから、同様に M_x , M_y , E_x , E_y の依存性を求めることが出来る。

また、面直のスピン分極は擬スカラーであるので、以下のような表式が対称性から許される。

$$\langle \sigma^z \rangle = g(\mathbf{E} \cdot \mathbf{M}) + h M_z (\mathbf{E} \times \mathbf{M})^z. \quad (3.94)$$

ここで、 g , h はスカラー係数である。

これらの結果は ϕ_M 依存性の結果と矛盾しない結果である。 $\mathbf{M} \parallel \hat{z}$ の場合には

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2\pi} a, \quad \sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi} d, \quad (3.95)$$

となり、他の係数は落ちる。

また、 $\mathbf{M} = (M_x, M_y, 0)$ の場合には

$$\sigma_{xx} = (a + b + c) M_{\parallel}^2 + (b - c)(M_x^2 - M_y^2), \quad (3.96)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi} (b - c) 2M_x M_y, \quad (3.97)$$

$$\chi_{zx} = \frac{e}{2\pi v_F} g M_x + \frac{e}{2\pi v_F} h M_x M_z, \quad (3.98)$$

となる。

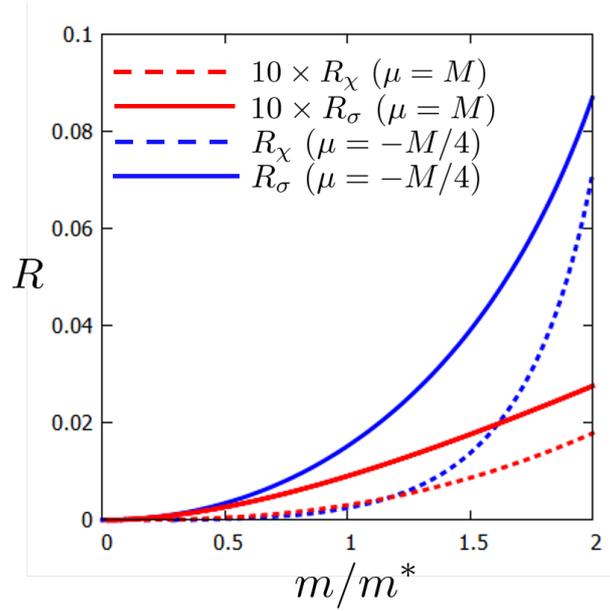


図 3.10: スピン軌道トルクの異方性 (R_χ) と電気伝導度の異方性 (R_σ) の m/m^* 依存性。赤点線: $10 \times R_\chi (\mu = M)$, 赤: $10 \times R_\sigma (\mu = M)$, 青点線: $R_\chi (\mu = -M/4)$, 青: $R_\sigma (\mu = -M/4)$. ただし, $M/mv_F^2 = 0.156$ (例えば, $M=0.02[\text{eV}]$, $v_F=1[\text{eV}\text{\AA}]$), $\theta_M = \pi/2$ とした。

3.5 m^* 依存性

ここで、粒子正孔対称性が破れたディラック系において現れる電気伝導度、スピン軌道トルクの異方性について、粒子正孔対称性の破れを表すパラメータである m^* の依存性を示す。そのために、以下の量を導入する。

$$R_\chi = 2 \left| \frac{\chi_{yx}(\phi_M = \pi/4) - \chi_{yx}(0)}{\chi_{yx}(\phi_M = \pi/4) + \chi_{yx}(0)} \right|, \quad (3.99)$$

$$R_\sigma = 2 \left| \frac{\sigma_{xx}(\phi_M = \pi/4) - \sigma_{xx}(0)}{\sigma_{xx}(\phi_M = \pi/4) + \sigma_{xx}(0)} \right|. \quad (3.100)$$

図 3.10 は、 $\mu = M, -0.25M$, $\bar{M} = M/mv_F^2 = 0.156$ (例えば $M = 0.02[\text{eV}]$, $v_F = 1[\text{eV}\text{\AA}]$) の場合の R_χ と R_σ の m/m^* 依存性である。ただし、 m は真空中の電子質量である。 $m/m^* = 0$ は線形分散モデルに対応するので異方性はゼロになり、 m/m^* の増大とともに異方性は単調に増大する。また、電気伝導度の異方性 (R_σ) は、SOT の異方性 (R_χ) より常に大きい。これらの特徴は、 μ, M の選び方に依らずに成り立つ特徴である。

3.6 $\tilde{\mu}$ 依存性

3.6.1 等方成分（ディラック系）

$\theta_M = 0, \pi/4, \pi/2$ に対して、 $\tilde{M} = 0.2$ の場合の縦伝導度と dissipative なスピン軌道トルク（電場と直交方向のスピン分極）の等方成分の化学ポテンシャル依存性を図 3.11 に示す。

線形分散モデルの場合には、スピンと速度の等価性 ($\mathbf{v} = v_F(\hat{z} \times \boldsymbol{\sigma})$) によって、 σ_{xx}/χ_{yx} と σ_{xy}/χ_{yy} の比は 1 になる。一方で、 $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ の項を考慮する場合には、速度とスピンは等価でなくなるため、この比は化学ポテンシャルや磁化に依存したものになる。磁化が面直 ($\theta_M = 0$)、 $\varepsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2m^*$ の場合には、 $1/m^*$ の 1 次の範囲で、以下のような解析式が求まる。

$$\frac{\sigma_{xx}}{\chi_{yx}} \simeq 1 + \tilde{\mu}, \quad (3.101)$$

$$\frac{\sigma_{xy}}{\chi_{yy}} \simeq 1 + \frac{\tilde{\mu}^2 - \tilde{M}_z^2}{4\tilde{\mu}}. \quad (3.102)$$

この解析的な表式は数値計算の結果と矛盾しないものであり、解析式と数値計算の結果はともに $\mu > M_z$ ($\mu < -M_z$) の場合には、 $\sigma_{xx}^0, \sigma_{xy}^0$ は χ_{yx}^0, χ_{yy}^0 より大きな（小さな）値をとっている。磁化の面内成分がある場合にも σ_{xx}^0 と χ_{yx}^0 の値の差はディラック点でゼロになり、それを境に符号が逆転している。また、 $|\mu| \gg |M|$ の場合には、それぞれの係数の等方成分は、 $\theta_M = 0, \theta_M = \pi/4, \theta_M = \pi/2$ の場合のそれぞれで近い値をとるようになる。これは μ が大きい場合には M への依存性が相対的に弱まるためである。

$\theta_M = 0, \theta_M = \pi/4$ の場合には χ_{yy} と σ_{xy} が有限に残る（図 3.12）。 χ_{yy} と σ_{xy} の Fermi-surface term はバンドエッジで不連続になるが、Fermi sea 1 の寄与も不連続になるため、これらの寄与を合わせると、バンドエッジでは連続になる。また、 $|\mu|$ がギャップより上でさらにギャップから大きく離れていない場合は、Fermi sea 1 の寄与と the Fermi sea 2 の寄与の和、Fermi surface term と Fermi sea 1 の寄与の和はそれぞれ小さな値になっている。

3.6.2 異方成分（ディラック系）

図 3.13, 3.14 は、 $\theta_M \pi/4, \pi/2$ の場合に電気伝導度と SOT の異方成分の化学ポテンシャル依存性を示したものである。これらの異方性は、波数の二次の項と面内磁化の協力（この協力はフェルミ面を真円から歪ませる）に由来するものである。

$\theta_M = \pi/2$ の場合には、対称性から導かれるように、 $\chi_{yx}^{\cos} = \chi_{yy}^{\sin}, \sigma_{xx}^{\cos} = \sigma_{xy}^{\sin}, \chi_{yx}^{\sin} = \chi_{yy}^{\cos} = \sigma_{xx}^{\sin} = \sigma_{xy}^{\cos} = 0$ が成立する。また、 χ_{yx}^{\cos} の符号はディラック点で変わるが、これは、ディラック点を境に符号を変えるスピン分極と、ディラック点を境に符号を変えない“異常”速度 (\mathbf{v}') の組み合わせに由来する（付録 D.3 を参照）。さらに、 σ_{xx}^{\cos} は χ_{yx}^{\cos} より一般に大きくなるが、この性質は \bar{A} に由来する。 χ_{zx} が一般的に正の値をとり、ディラック点以下では大きくなる。

$\theta_M = \pi/4$ の場合には、有限の χ_{yx}^{\sin} が生じ、対称性から導かれるように $\chi_{yx}^{\sin} = -\chi_{yy}^{\cos}$ となる。しかしながら、 χ_{yx}^{\sin} は他の成分に比べて小さな値になっており、位相のずれの効果は大きな効果にはならない（図 3.13 の (a), (b)）。また、 \mathbf{v} と \mathbf{v}'' の対称化によって、 $\sigma_{xx}^{\sin} = \sigma_{xy}^{\cos} = 0$ となり、電気伝導度に対しては位相のずれの効果はゼロになる。また、 χ_{yx}^{\cos} と σ_{xx}^{\cos} については、 M_z の効果によってギャップ付近にピークを生じ、 χ_{yx}^{\cos} はギャップ付近で σ_{xx}^{\cos} より大きな値をとっている。 $\mu \gg M$ の場合には、 $\theta_M = \pi/4$ のときの χ_{yx}^{\cos} と σ_{xx}^{\cos} はそれぞれ、 $\theta_M = \pi/2$ のときの χ_{yx}^{\cos} と σ_{xx}^{\cos} に近づく。

χ_{zx}^{\sin} は有限に残り、 μ がギャップより上にある時に大きな寄与を持つ。これは χ_{zx}^{\sin} がダンピングの低次の寄与になっているためであり、位相のずれの効果は大きく表れている（図 3.13(e)）。

3.6.3 ラシュバ系の場合

ラシュバ系の場合の結果を図 3.11、3.12、3.13、3.14 の右側に示す。ディラック系の場合と同様に、化学ポテンシャルが負の場合に大きな異方性が表れている。ダンピングの性質も反映して、一般にディラック点ではカスプ、ディラックのバンド端では不連続性が表れている。また、 χ_{yx} の符号は（部分的には）、ディラック系の場合とは逆になっている。これはスピン運動量ロッキングの符号がフェルミ面の内側と外側で逆になっており、ラシュバ系では外側のフェルミ面、ディラック系では内側のフェルミ面が効くためである。

$\theta_M = \pi/2$ の場合には一般にディラック点より上、 $\theta_M = 0, \pi/4$ の場合には上のバンドの下端より上では特異な性質が現れる。まず、 $\theta_M = \pi/2$ の場合には $\chi_{yx}^{\cos} = \sigma_{xx}^{\cos} = \chi_{zx}^{\cos} = 0$ が成立するが、これは内側のフェルミ面の寄与と外側のフェルミ面の寄与がキャンセルするためである。また、 $\sigma_{xy}^0, \chi_{yy}, \chi_{zx}$ に対する Fermi sea 1 の寄与と Fermi-surface term の和、もしくは、Fermi sea 1 の寄与と Fermi sea 2 の寄与の和はゼロになっている。ここで、 $\Gamma_-^z + \Gamma_+^z = 0$ であることから、 $\chi_{yy}^0 = \sigma_{xy}^0$ となっている。また、 χ_{zx} がディラック点において不連続になることは、他の物理量には表れていない非自明な結果であり、ディラックの価電子帯に対応する領域まで調べたことで得られた結果である。他の物理量に現れる不連続性は、フェルミ面の枚数が変わることに由来するものであった。一方、 χ_{zx} で現れている不連続性はディラック点におけるものであり、フェルミ面の枚数の違いに由来するものではない。ディラック点の上下では、そのバンドの性質が著しく変化することが不連続性の由来である。ディラック点より上の領域では上下のバンドのそれぞれがフェルミ面を作っているが、一方で、ディラック点より下の領域では下のバンドが二つのフェルミ面を作っている。このような性質の違いが不連続性を生み出している。さらに、この不連続性については、以下のように解析的な計算結果からも導かれる（計算の詳細は付録 D.4 を参照）。

$$\chi_{zx} = 0 \quad (\tilde{\mu} \rightarrow \tilde{M}^2/2 + 0), \quad (3.103)$$

$$\chi_{zx} = -\cos\phi_M \frac{1}{\tilde{M}} (1 - \sqrt{1 - \tilde{M}^2}) \quad (\tilde{\mu} \rightarrow \tilde{M}^2/2 - 0). \quad (3.104)$$

また、面直磁化がある場合には、 $A_2^{\cos}, \sigma_{xx}^{\cos}$ および χ_{zx}^{\cos} はギャップ付近で有限の値を持つが、 $\chi_{yx}^{\sin} = 0$ となる。また、 $\sigma_{xx}^{\sin} = \sigma_{xy}^{\cos} = 0$ が一般に成立するが、これは \mathbf{v} と \mathbf{v}' の対称化による。

ラシュバ系における物理量には多くの不連続性が現れたが、一方でディラック系における物理量には不連続性は全く現れていない。この特徴は、類似した系であるディラック系とラシュバ系を区別する明確な特徴である。

本論文では、 $\tilde{M} < 1$ の場合ディラック系のギャップと価電子帯に対応する領域も含めてラシュバ系の場合の結果をバーテックス補正の効果は含めずに示した。この論文ではディラック系での計算を目的にしており、ディラック系の場合にはバーテックス補正の効果は重要にならないことが示されているためである [88]。定量的により精密な結果を得るためには、ダンピングの回数に関してバーテックス補正の効果を含めていない場合と同じ次数のバーテックス補正の寄与を全て考慮する必要がある。

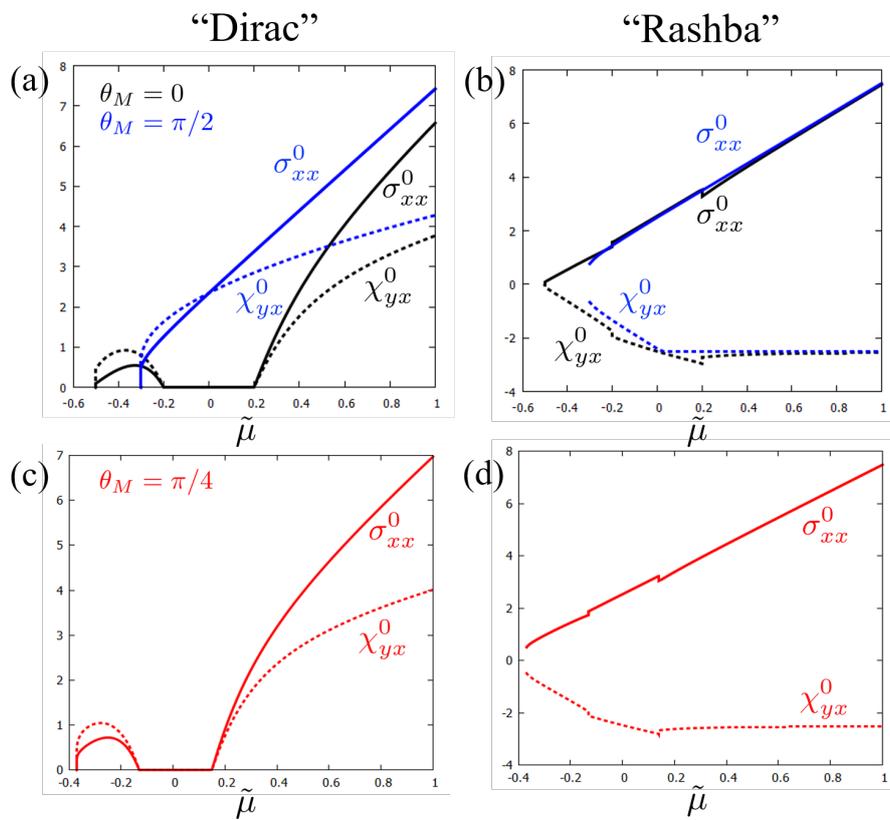


図 3.11: χ_{yx} (点線)、 σ_{xx} (実線) の化学ポテンシャル依存性: (a) デイラック系、 $\theta_M = 0$ (黒線)、 $\theta_M = \pi/2$ (青線)、(b) ラシユバ系、 $\theta_M = 0$ (黒線)、 $\theta_M = \pi/2$ (青線)、(c) デイラック系、 $\theta_M = \pi/4$ (赤線)、(d) ラシユバ系、 $\theta_M = \pi/4$ (赤線)。

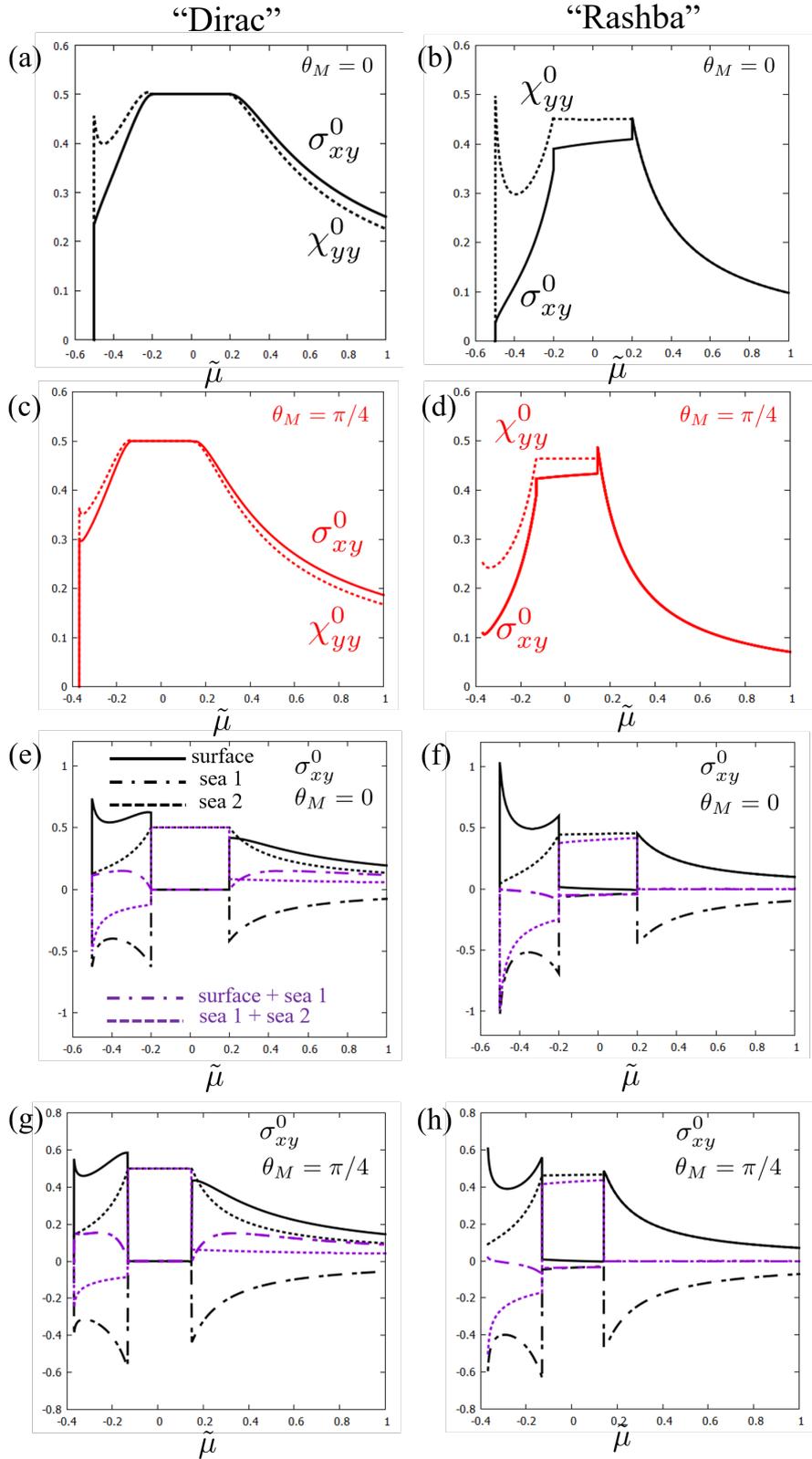


図 3.12: χ_{yy}^0 (点線)、 σ_{xy}^0 (実線) の化学ポテンシャル依存性 : (a) $\theta_M = 0$, デイラック系 (黒線)、(b) $\theta_M = 0$, ラシユバ系 (黒線)、(c) $\theta_M = \pi/4$, デイラック系 (赤線)、(d) $\theta_M = \pi/4$, ラシユバ系 (赤線)。 $\sigma_{xy}^{\text{surf}}$ (黒点線) $\sigma_{xy}^{\text{sea1}}$ (黒一点鎖線)、 $\sigma_{xy}^{\text{sea2}}$ (黒点線)、 $\sigma_{xy}^{\text{surf}} + \sigma_{xy}^{\text{sea1}}$ (紫一点鎖線)、 $\sigma_{xy}^{\text{sea1}} + \sigma_{xy}^{\text{sea2}}$ (紫点線) の化学ポテンシャル依存性 : (e) $\theta_M = 0$, デイラック系、(f) $\theta_M = 0$, ラシユバ系、(g) $\theta_M = \pi/4$, デイラック系、(h) $\theta_M = \pi/4$, ラシユバ系。

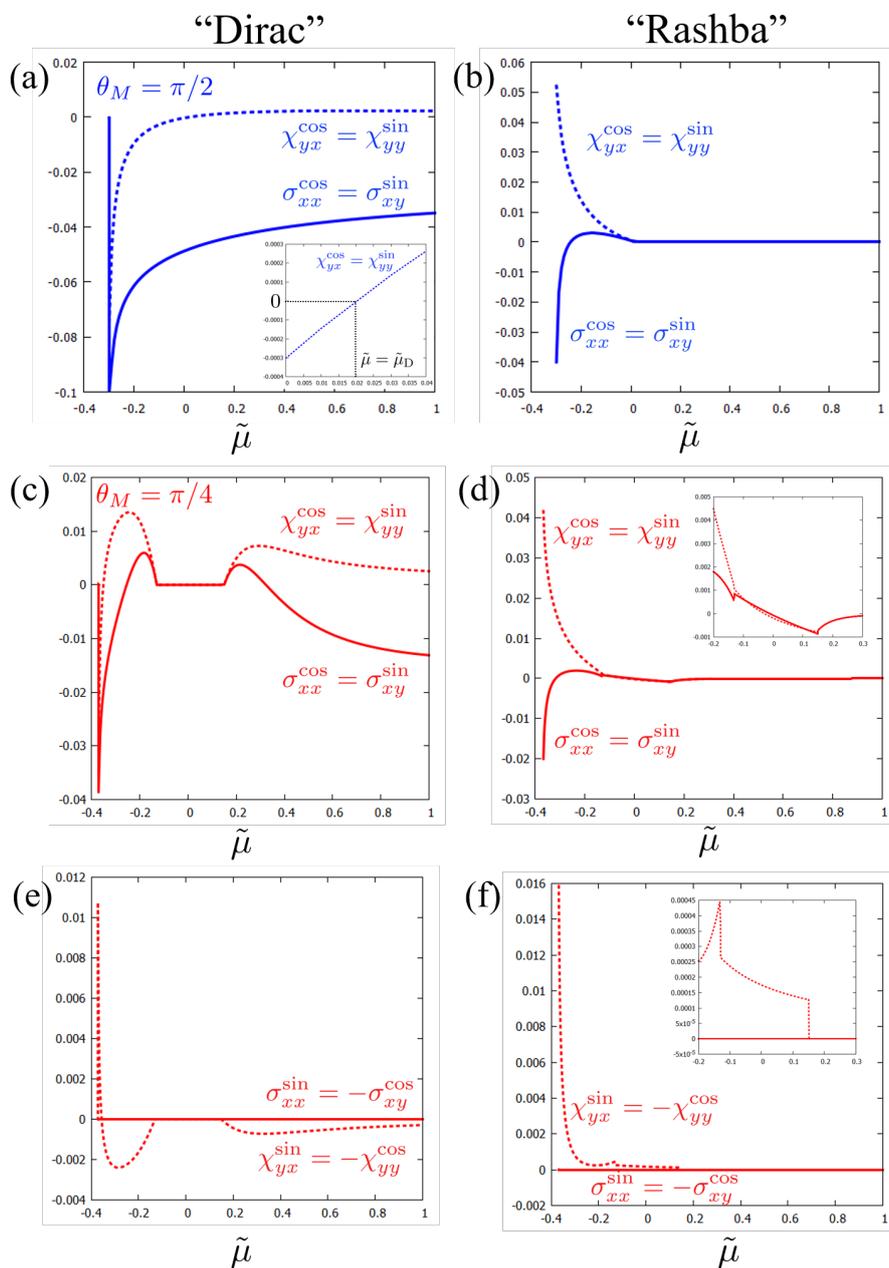


図 3.13: $\chi_{yx}^{\cos} = \chi_{yy}^{\sin}$ (点線)、 $\sigma_{xx}^{\cos} = \sigma_{xy}^{\sin}$ (実線)、 $\chi_{yx}^{\sin} = -\chi_{yy}^{\cos}$ (点線)、 $\sigma_{xx}^{\sin} = -\sigma_{xy}^{\cos}$ (実線) の化学ポテンシャル依存性 : (a) $\theta_M = \pi/2$, デイラック系 (青線)、(b) $\theta_M = \pi/2$, ラシユバ系 (青線)、(c) $\theta_M = \pi/4$, デイラック系 (赤線)、(d) $\theta_M = \pi/4$, ラシユバ系 (赤線)。 $\chi_{yx}^{\sin} = -\chi_{yy}^{\cos}$ 、 $\sigma_{xx}^{\sin} = -\sigma_{xy}^{\cos}$ の化学ポテンシャル依存性 : (e) $\theta_M = \pi/4$, デイラック系 (赤線)、(f) $\theta_M = \pi/4$, ラシユバ系 (赤線)。

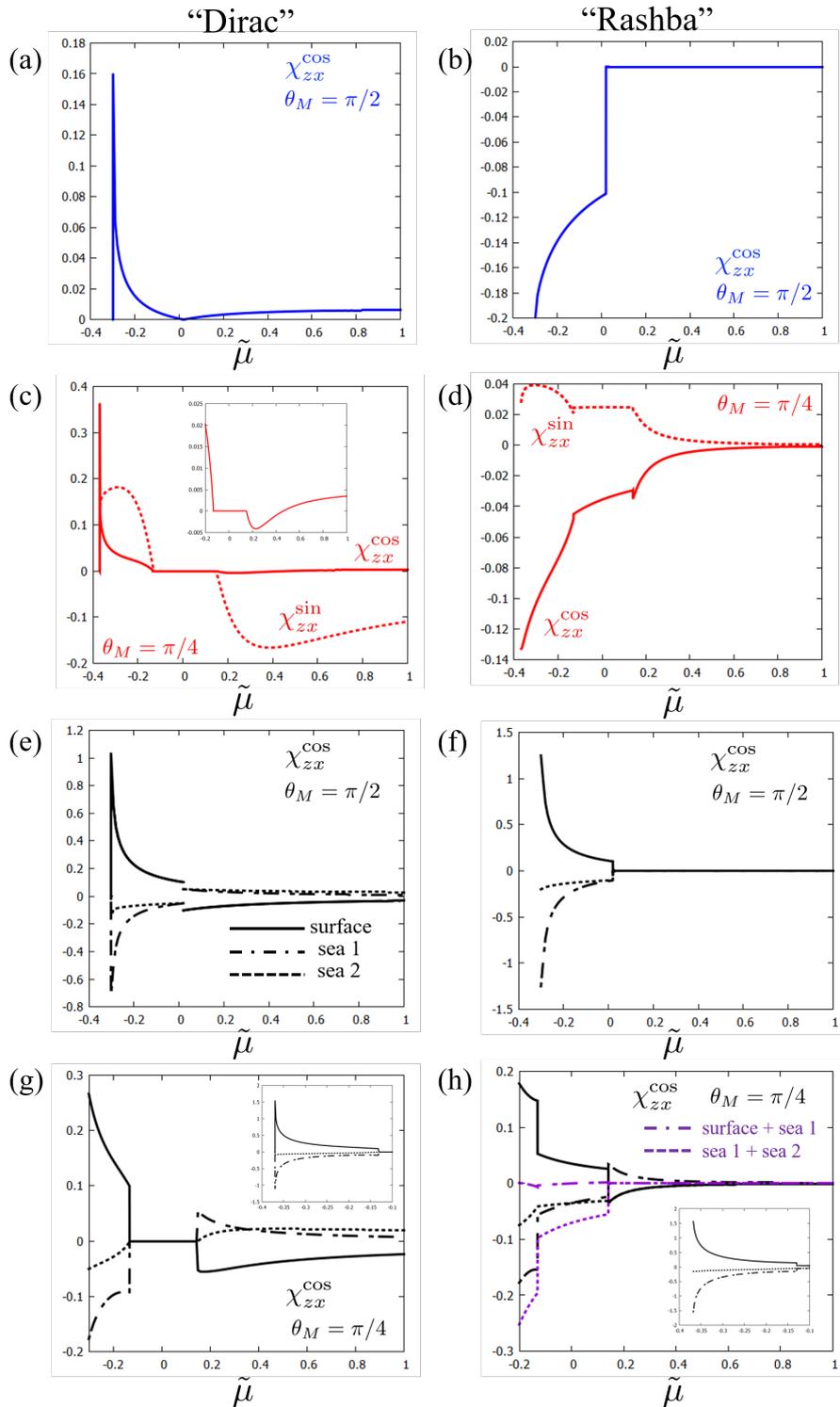


図 3.14: χ_{zx}^{\sin} (点線)、 χ_{zx}^{\cos} (実線) の化学ポテンシャル依存性 : (a) $\theta_M = \pi/2$, ディラック系 (青線)、(b) $\theta_M = \pi/2$, ラシュバ系 (青線)、(c) $\theta_M = \pi/4$, ディラック系 (赤線)、(d) $\theta_M = \pi/4$, ラシュバ系 (赤線)。 χ_{zx}^{surf} (黒実線)、 χ_{zx}^{sea1} (黒一点鎖線)、 χ_{zx}^{sea2} (黒点線)、 $\chi_{zx}^{\text{surf}} + \chi_{zx}^{\text{sea1}}$ (紫一点鎖線)、 $\chi_{zx}^{\text{sea1}} + \chi_{zx}^{\text{sea2}}$ (紫点線) の化学ポテンシャル依存性 : (e) $\theta_M = \pi/2$, ディラック系、(f) $\theta_M = \pi/2$, ラシュバ系、(g) $\theta_M = \pi/4$, ディラック系、(h) $\theta_M = \pi/4$, ラシュバ系。

第 4 章

結論

本論文では、磁性トポロジカル絶縁体表面を表すハミルトニアンにおける波数の高次の項を考慮することによって、波数に関して線形の範囲では生じなかった物理現象について微視的に調べた。まず、波数の三次の項を考慮した場合にはギルバート・ダンピング、スピン軌道トルク、電気伝導度の間の等価性が破れること、波数の三次の項が大きい場合には速度の増大によってスピン軌道トルク、電気伝導度が大幅に増大することを明らかにした。また、対称性に加えて代数的な考察を行うことによって磁化の空間微分を含むスピントルクのどの成分がどのような物理現象に効果を及ぼすかを明確に出来、具体的に、磁壁駆動、スピン波のドップラーシフトについて調べた。その結果、波数の三次の項が大きい場合には磁壁駆動の非断熱性が大きくなること、スピン波のドップラーシフトの方向が大きく変わることが分かった。さらに、波数の三次の項がある場合には電流によって面直方向のスピン分極が誘起されるようになり、それによってジャロシンスキー・守谷相互作用（磁化構造にねじれを生じさせる相互作用）が変調することも明らかにした。

さらに、波数の二次を考慮した場合のスピン軌道トルクと電気伝導度の磁化の面内方向依存性について計算し、類似した系であるラシュバ系との比較を行った。まず、対称性の議論によって、磁化が面内の場合には縦伝導度の異方性と横伝導度の異方性の振幅は等しく位相は90度異なることを導き、また面直磁化もある場合にはそこから位相がずれることを示した。そして、微視的な計算結果が対称性による議論と整合していることを確かめ、さらに以下のような結果を得た。まず、ディラック系とラシュバ系で共通して、ディラックの価電子帯に対応する領域の方が伝導帯に対応する領域より大きな異方性が生じることが分かった。また、ディラック系の場合には物理量に不連続性は生じず、磁化が面内の場合の面内方向のスピン分極の異方性に関してはディラック点で符号変化するという特徴を明らかにした。さらに、ラシュバ系では、化学ポテンシャルの値によってフェルミ面の枚数が変わることを反映して電気伝導度とスピン軌道トルクに不連続性が生じること、磁化が面内の場合にはディラック点において面直スピン分極が不連続になることを発見した。

本論文では、電場に対する電流とスピンの応答について調べたが、電場に対するスピン流の応答や、光や振動などに対するそれらの応答については調べられておらず、磁性トポロジカル絶縁体表面におけるスピントロニクス現象について統一的に調べるためには、それらも合わせて調べることが重要である。また、本論文では磁化の構造は与えられたものとして計算を行ったが、磁性トポロジカル絶縁体表面の伝導電子と磁化の結合によってどのような磁化構造が実現するかを調べることも重要な課題である。さらに、本論文では磁性トポロジカル絶縁体表面において様々なスピントロニクス現象を対称性とその代数的構造によって考察したが、他の対称性を持つ系においてどのような結果が得られるかは未解明であり、興味深い課題である。

付録 A

フェルミ面の枚数の分類について

ヘキサゴナル・ワーピング項がある場合のディラック系の停留値は以下の方程式で与えられる。

$$(\hbar v_F)^2 k \cos \phi_{\mathbf{k}} + 3\lambda k^2 \cos 2\phi_{\mathbf{k}} (2\lambda k^3 \cos 3\phi_{\mathbf{k}} - M_z) = 0, \quad (\text{A.1})$$

$$(\hbar v_F)^2 k \sin \phi_{\mathbf{k}} - 3\lambda k^2 \sin 2\phi_{\mathbf{k}} (2\lambda k^3 \cos 3\phi_{\mathbf{k}} - M_z) = 0. \quad (\text{A.2})$$

これらは以下のようなフェルミ面の分類を与える。

1. $|M'_z| < 4/3^{\frac{3}{2}}$

$$N_{\text{FS}} = \begin{cases} 0 & (|\mu| < |M_z|) \\ 1 & (|M_z| < |\mu|) \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

2. $4/3^{\frac{3}{2}} < |M'_z| < 2/3^{\frac{3}{4}}$

$$N_{\text{FS}} = \begin{cases} 0 & (|\mu| < |M_z|) \\ 1 & (|M_z| < |\mu| < E_0) \\ 4 & (E_0 < |\mu| < E_1) \\ 1 & (E_1 < |\mu|) \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

3. $2/3^{\frac{3}{4}} < |M'_z|$

$$N_{\text{FS}} = \begin{cases} 0 & (|\mu| < E_0) \\ 3 & (E_0 < |\mu| < |M_z|) \\ 4 & (|M_z| < |\mu| < E_1) \\ 1 & (E_1 < |\mu|) \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

ここで、 $M'_z \equiv M_z/(\sqrt{v_F^3/\lambda})$ であり、 E_0, E_1 , 対応する波数は以下で与えられる。

$$E_0 = \sqrt{M_z^2 + (v_F k_0)^2 - 2\lambda M_z k_0^3 + \lambda^2 k_0^6}, \quad (\text{A.6})$$

$$k_0 = \sqrt{\frac{t}{2}} + \sqrt{-\frac{t}{2} + \frac{|M_z|}{2\sqrt{2t}\lambda}}, \quad (\text{A.7})$$

$$t = \sqrt[3]{\left(\frac{M_z}{4\lambda}\right)^2 + \sqrt{\left(\frac{M_z}{4\lambda}\right)^4 - \left(\frac{v_F}{3\lambda}\right)^6}} + \sqrt[3]{\left(\frac{M_z}{4\lambda}\right)^2 - \sqrt{\left(\frac{M_z}{4\lambda}\right)^4 - \left(\frac{v_F}{3\lambda}\right)^6}}, \quad (\text{A.8})$$

$$E_1 = \sqrt{M_z^2 + (v_F \bar{k}_0)^2 - 2\lambda M_z \bar{k}_0^3 + \lambda^2 \bar{k}_0^6}, \quad (\text{A.9})$$

$$\bar{k}_0 = \sqrt{\frac{t}{2}} + \sqrt{-\frac{t}{2} - \frac{|M_z|}{2\sqrt{2t}\lambda}}. \quad (\text{A.10})$$

原点からずれた停留点は以下で与えられる。 $M_z > 0$ の場合は

$$\mathbf{k}_{\min} = \{k_0(1, 0), k_0(-1/2, \sqrt{3}/2), k_0(-1/2, -\sqrt{3}/2)\}, \quad (\text{A.11})$$

$$\mathbf{k}_{\text{saddle}} = \{\bar{k}_0(1/2, \sqrt{3}/2), \bar{k}_0(-1, 0), \bar{k}_0(1/2, -\sqrt{3}/2)\}, \quad (\text{A.12})$$

$M_z < 0$ の場合は

$$\mathbf{k}_{\min} = \{k_0(1/2, \sqrt{3}/2), k_0(-1, 0), k_0(1/2, -\sqrt{3}/2)\}, \quad (\text{A.13})$$

$$\mathbf{k}_{\text{saddle}} = \{\bar{k}_0(1, 0), \bar{k}_0(-1/2, \sqrt{3}/2), \bar{k}_0(-1/2, -\sqrt{3}/2)\}, \quad (\text{A.14})$$

である。

付録 B

ヘキサゴナル・ワーピング項がある場合の Fermi sea term の定式化

フェルミ面からの寄与においてダンピングの最低次がゼロ次となる物理量に対しては、フェルミ海からの寄与もダンピングに関して同じ次数で効く。波数の二次の項は Fermi sea term の定式化に影響を与えず、文献 [88] と同様に定式化できるので、波数の三次の項（ヘキサゴナル・ワーピング項）によって修正を受ける部分を見ていく。

まず、絶縁体領域を考える。このとき、 B_1^{sea} は以下のように表すことが出来る。

$$B_1^{\text{sea}} = \lim_{M_x, M_y \rightarrow 0} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \hat{\mathbf{g}} \cdot (\partial_{M_y} \hat{\mathbf{g}} \times \partial_{M_x} \hat{\mathbf{g}}). \quad (\text{B.1})$$

ここで

$$\hat{\mathbf{g}} = (g_x - M_x, g_y - M_y, g_z)/g, \quad (\text{B.2})$$

$$g = \sqrt{(g_x - M_x)^2 + (g_y - M_y)^2 + g_z^2}, \quad (\text{B.3})$$

とした。

ヘキサゴナル・ワーピング項が無い場合には、 $\hat{\mathbf{g}}$ は $k_x - M_y, k_y + M_x, M_z$ のみに依存する。よって、微分の変数を $M_x \rightarrow -k_y, M_y \rightarrow k_x$ と置き換えることが出来、 B_1^{sea} の波数和中の身は波数微分に関するベリー曲率となり、波数積分を実行するとチャーン数となる。磁化の微分と波数の微分が等価になっていることは、ハミルトニアンの中で波数と速度が結合しており、磁化とスピンの結合していることから、スピンと速度の等価性の現れである。これらの議論は B_2^{sea} に対しても同様に成り立つ。

しかしながら、ヘキサゴナル・ワーピング項がある場合には、 $\hat{\mathbf{g}}$ は $k_x - M_y, k_y + M_x, g_z$ のみでなく、 k_x, k_y にも依存するようになる。このときは、微分の変数の置き換えを行うことが出来ない。これは、ヘキサゴナル・ワーピング項によるスピンと速度の等価性の破れによって、波数微分に関するベリー曲率と磁化微分に関するベリー曲率が等価とならないことを表している（磁化微分によるベリー曲率も磁化に関して和をとればチャーン数になる）。この場合の B_1, B_2 は以下のように表される。

$$B_1^{\text{sea}} - B_2^{\text{sea}} = -\pi v_F \text{Im} \hat{\mathbf{g}} \cdot (\partial_{M_x} \hat{\mathbf{g}} \times (v_F \partial_{M_y} - \partial_x) \hat{\mathbf{g}}) \quad (\text{B.4})$$

$$= -\pi v_F \text{Im} \hat{\mathbf{g}} \cdot (\partial_{M_x} \hat{\mathbf{g}} \times (-v'_x \partial_z \hat{\mathbf{g}})) \quad (\text{B.5})$$

$$= -\pi v_F \text{Im} \hat{\mathbf{g}} \cdot ((-\partial_y \hat{\mathbf{g}}) \times (-v'_x \partial_z \hat{\mathbf{g}})), \quad (\text{B.6})$$

$$B_2^{\text{sea}} - B_3^{\text{sea}} = -\pi \text{Im} \hat{\mathbf{g}} \cdot ((v_F \partial_{M_y} - \partial_x) \hat{\mathbf{g}} \times \partial_y \hat{\mathbf{g}}) \quad (\text{B.7})$$

$$= -\pi \text{Im} \hat{\mathbf{g}} \cdot ((-v'_x \partial_z \hat{\mathbf{g}}) \times (\partial_y \hat{\mathbf{g}})). \quad (\text{B.8})$$

ただし、

$$\partial_z = \frac{\partial}{\partial g_z}, \quad (\text{B.9})$$

とした。金属領域に関してもデルタ関数による寄与とシータ関数による寄与を共に考えることで、同様に定式化できる。まとめると、本文の式が得られる。

付録 C

空間微分を含むスピントルクの式変形

ヘキサゴナル・ワーピング項がある場合の、空間微分を含むスピントルクの計算を行うためにいくつかの有用な公式を載せる。

まず、

$$\frac{1}{D^R} = \frac{1}{x + i\gamma}, \quad \frac{1}{D^A} = \frac{1}{x - i\gamma}, \quad (\text{C.1})$$

に対して、

$$\frac{1}{D^R D^A} = \frac{1}{x^2 + \gamma^2} \simeq \frac{\pi}{\gamma} \delta(x) \text{sgn}(\gamma), \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{1}{(D^R D^A)^2} = \frac{1}{(x^2 + \gamma^2)^2} \simeq \frac{\pi}{2\gamma^3} \delta(x) \text{sgn}(\gamma), \quad (\text{C.3})$$

$$\frac{1}{(D^R)^2 D^A} = -\frac{i\pi}{2\gamma^2} \delta(x) \text{sgn}(\gamma) - \frac{\pi}{2\gamma} \delta'(x) \text{sgn}(\gamma), \quad (\text{C.4})$$

$$\frac{1}{(D^R)^3 D^A} = -\frac{i\pi}{4\gamma^3} \delta(x) \text{sgn}(\gamma) + \frac{i\pi}{4\gamma^2} \delta'(x) \text{sgn}(\gamma) + \frac{\pi}{4\gamma} \delta''(x) \text{sgn}(\gamma), \quad (\text{C.5})$$

が成立する。これらの公式により、相関関数に現れるグリーン関数の分母部分をダンピングの逆数を使って書き換えることが出来る。

ここで、以下の量を定義する。

$$x = v_F k, \quad (\text{C.6})$$

$$a = |g_0|^2 - |g_z|^2, \quad (\text{C.7})$$

$$b = \text{Im}(g_0^A g_z^R), \quad (\text{C.8})$$

$$c = (g_0^R)^2 - (g_z^R)^2, \quad (\text{C.9})$$

$$K_c = 3\lambda k^3 \cos 3\phi_{\mathbf{k}}, \quad (\text{C.10})$$

$$K_s = 3\lambda k^3 \sin 3\phi_{\mathbf{k}}. \quad (\text{C.11})$$

グリーン関数の分子部分に関してスピンの tr ととるために、

$$G^R = \frac{g^R}{D^R} = \frac{g_0^R + \mathbf{g}^R \cdot \boldsymbol{\sigma}}{D^R}, \quad (\text{C.12})$$

に対して、以下の公式が有用である。

$$g^A \sigma^\alpha g^R = \sigma^\alpha (A_\alpha + iB_\alpha \sigma^z) + (\theta_\alpha + \phi_\alpha \sigma^z), \quad (\text{C.13})$$

$$g^R \sigma^\beta g^R = \sigma^\beta (C_\beta + iD_\beta \sigma^z) + (\theta_\beta^0 + \phi_\beta^0 \sigma^z). \quad (\text{C.14})$$

ここで、

$$A_\alpha = |g_0|^2 - |g_z|^2 + \eta_\alpha(g_x^2 - g_y^2), \quad (\text{C.15})$$

$$B_\alpha = 2\text{Im}(g_0^A g_z^R) + 2\eta_\alpha g_x g_y, \quad (\text{C.16})$$

$$C_\beta = (g_0^R)^2 - (g_z^R)^2 + \eta_\beta(g_x^2 - g_y^2), \quad (\text{C.17})$$

$$D_\beta = 2\eta_\beta g_x g_y, \quad (\text{C.18})$$

$$\theta_\alpha = 2(g_0 g'_0 + \eta_\alpha g_{\bar{\alpha}} g''_z), \quad (\text{C.19})$$

$$\phi_\alpha = 2(g_\alpha g'_z + \eta_\alpha g_{\bar{\alpha}} g''_0), \quad (\text{C.20})$$

$$\theta_\beta^0 = 2g_\beta g_0^R, \quad (\text{C.21})$$

$$\phi_\beta^0 = 2g_\beta g_z^R, \quad (\text{C.22})$$

また、

$$g_0^R = g'_0 + i g''_0, \quad (\text{C.23})$$

$$g_z^R = g'_z + i g''_z, \quad (\text{C.24})$$

$$\eta_x = +1, \quad (\text{C.25})$$

$$\eta_y = -1, \quad (\text{C.26})$$

とした。これらの公式を、相関関数に現れるグリーン関数の分子部分に適用していくことで、スピン空間の tr をとった表式を得ることが出来る。

また、式変形のために波数の角度平均 $\langle \dots \rangle$ に対して、以下の公式が有用である。

$$\langle g_\alpha g_\beta \rangle = \frac{1}{2} (v_F k)^2 \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{C.27})$$

$$\langle (g_x^2 - g_y^2)^2 \rangle = \langle (2g_x g_y)^2 \rangle = \frac{1}{2} (v_F k)^4, \quad (\text{C.28})$$

$$\langle v'_i g_\alpha g_\beta g_\gamma \rangle = -\frac{3}{8} (v_F k)^3 \lambda k^2 \langle \cos 3\phi \rangle \{ \epsilon_{i\alpha} \delta_{\beta\gamma} + \epsilon_{i\beta} \delta_{\gamma\alpha} + \epsilon_{i\gamma} \delta_{\alpha\beta} \}, \quad (\text{C.29})$$

$$\langle v'_i v'_j g_\alpha g_\beta \rangle = \frac{1}{8} (3\lambda k^2)^2 (v_F k)^2 \{ \langle \cos 6\phi \rangle (\delta_{i\alpha} \delta_{j\beta} - \epsilon_{i\alpha} \delta_{j\beta}) + 2\delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \}. \quad (\text{C.30})$$

公式を組み合わせると以下のようになる。

$$\langle A_\alpha C_\beta \rangle = ac + \frac{1}{2} \eta_\alpha \eta_\beta (v_F k)^4, \quad (\text{C.31})$$

$$\langle B_\alpha D_\beta \rangle = \frac{1}{2} \eta_\alpha \eta_\beta (v_F k)^4, \quad (\text{C.32})$$

$$\langle A_\alpha D_\beta \rangle = 0, \quad (\text{C.33})$$

$$\langle B_\alpha C_\beta \rangle = 2bc, \quad (\text{C.34})$$

$$\langle \theta_\alpha \theta_\beta^0 \rangle = 2(v_F k)^2 g_0^R (g'_0 \delta_{\alpha\beta} + g''_3 \epsilon_{\alpha\beta}), \quad (\text{C.35})$$

$$\langle \phi_\alpha \phi_\beta^0 \rangle = 2(v_F k)^2 g_3^R (g'_3 \delta_{\alpha\beta} + g''_0 \epsilon_{\alpha\beta}), \quad (\text{C.36})$$

$$\langle \theta_\alpha \phi_\beta^0 \rangle = 2(v_F k)^2 g_3^R (g'_0 \delta_{\alpha\beta} + g''_3 \epsilon_{\alpha\beta}), \quad (\text{C.37})$$

$$\langle \phi_\alpha \theta_\beta^0 \rangle = 2(v_F k)^2 g_0^R (g'_3 \delta_{\alpha\beta} + g''_0 \epsilon_{\alpha\beta}), \quad (\text{C.38})$$

$$\begin{aligned} & \langle v'_i v'_j (\theta_\alpha \theta_\beta^0) + \phi_\alpha \phi_\beta^0 \rangle \\ &= \frac{1}{2} (3\lambda k^2)^2 (v_F k)^2 \{ [d_5 (-\delta_{i\alpha} \delta_{j\beta} + \epsilon_{i\alpha} \epsilon_{j\beta}) + d_6 (\epsilon_{i\alpha} \delta_{i\beta} + \delta_{i\beta} \epsilon_{j\beta})] \langle \cos 6\phi \rangle + 2\delta_{ij} (d_5 \delta_{\alpha\beta} + d_6 \epsilon_{\alpha\beta}) \}, \end{aligned} \quad (\text{C.39})$$

$$\langle v'_i A_\alpha \phi_\beta^0 \rangle = \frac{3}{2} v_F \lambda k^3 g_z^R \{-2a\epsilon_{i\beta} + \eta_\alpha (v_F k)^2 (\tau_x)_{i\beta}\} \langle \cos 3\phi \rangle, \quad (\text{C.40})$$

$$\langle v'_i B_\alpha \theta_\beta^0 \rangle = \frac{3}{2} v_F \lambda k^3 g_0^R \{4b\epsilon_{i\beta} + \eta_\alpha (v_F k)^2 (\tau_z)_{i\beta}\} \langle \cos 3\phi \rangle, \quad (\text{C.41})$$

$$\langle v'_i A_\alpha \theta_\beta^0 \rangle = \frac{3}{2} v_F \lambda k^3 g_0^R \{-2a\epsilon_{i\beta} + \eta_\alpha (v_F k)^2 (\tau_x)_{i\beta}\} \langle \cos 3\phi \rangle, \quad (\text{C.42})$$

$$\langle v'_i B_\alpha \theta_\beta^0 \rangle = \frac{3}{2} v_F \lambda k^3 g_z^R \{4b\epsilon_{i\beta} + \eta_\alpha (v_F k)^2 (\tau_z)_{i\beta}\} \langle \cos 3\phi \rangle, \quad (\text{C.43})$$

$$\langle v'_i \phi_\alpha C_\beta \rangle = -3v_F \lambda k^3 \left\{ c(\epsilon_{i\alpha} g'_z + \delta_{i\alpha} g''_z) - \frac{1}{2} \eta_\beta (v_F k)^2 [(\tau_x)_{i\alpha} g'_z + (\tau_z)_{i\alpha} g''_z] \right\} \langle \cos 3\phi \rangle, \quad (\text{C.44})$$

$$\langle v'_i \theta_\alpha D_\beta \rangle = -\frac{3}{2} \eta_\beta (v_F k)^2 v_F \lambda k^3 \{(\tau_z)_{i\alpha} g'_z - (\tau_x)_{i\alpha} g''_z\} \langle \cos 3\phi \rangle, \quad (\text{C.45})$$

$$\langle v'_i \theta_\alpha C_\beta \rangle = -3v_F \lambda k^3 \left\{ c(\epsilon_{i\alpha} g'_z + \delta_{i\alpha} g''_z) - \frac{1}{2} \eta_\beta (v_F k)^2 [(\tau_x)_{i\alpha} g'_z + (\tau_z)_{i\alpha} g''_z] \right\} \langle \cos 3\phi \rangle, \quad (\text{C.46})$$

$$\langle v'_i \phi_\alpha D_\beta \rangle = -\frac{3}{2} \eta_\beta (v_F k)^2 v_F \lambda k^3 \{(\tau_z)_{i\alpha} g'_z - (\tau_x)_{i\alpha} g''_z\} \langle \cos 3\phi \rangle. \quad (\text{C.47})$$

空間微分を含むスピントルクの計算は以下の四つの式

$$L_1 = v_F^2 \epsilon_{i\gamma} \epsilon_{j\delta} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{(D^R)^3 D^A} \text{tr}[\sigma^\alpha g^R \sigma^\delta g^R \sigma^\beta g^R \sigma^\gamma g^A], \quad (\text{C.48})$$

$$L_2 = -v_F \epsilon_{j\delta} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \frac{v'_i}{(D^R)^3 D^A} \text{tr}[\sigma^\alpha g^R \sigma^\delta g^R \sigma^\beta g^R \sigma^\gamma g^A], \quad (\text{C.49})$$

$$L_3 = -v_F \epsilon_{i\gamma} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \frac{v'_j}{(D^R)^3 D^A} \text{tr}[\sigma^\alpha g^R \sigma^\delta g^R \sigma^\beta g^R \sigma^\gamma g^A], \quad (\text{C.50})$$

$$L_4 = \epsilon_{i\gamma} \epsilon_{j\delta} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \frac{v'_i v'_j}{(D^R)^3 D^A} \text{tr}[\sigma^\alpha g^R \sigma^\delta g^R \sigma^\beta g^R \sigma^\gamma g^A], \quad (\text{C.51})$$

に分解できるので、それぞれに対して、上の公式を適用していくと、以下のようになる。

$$\begin{aligned} L_1/v_F^2 &= \epsilon_{i\gamma} \epsilon_{j\delta} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{(D^R)^3 D^A} [2(\delta_{\gamma\alpha} \delta_{\alpha\beta} - \epsilon_{\gamma\alpha} \epsilon_{\delta\beta})(A_\alpha C_\beta - B_\alpha D_\beta) - 2(\delta_{\gamma\alpha} \delta_{\alpha\beta} + \epsilon_{\gamma\alpha} \epsilon_{\delta\beta})(A_\alpha D_\beta - B_\alpha C_\beta) \\ &\quad + 2\delta_{\gamma\delta}(\theta_\alpha \theta_\beta^0 - \phi_\alpha \phi_\beta^0) + 2i\epsilon_{\gamma\delta}(\theta_\alpha \phi_\beta^0 - \phi_\alpha \theta_\beta^0)], \end{aligned} \quad (\text{C.52})$$

$$\begin{aligned} &= 2(\epsilon_{i\alpha} \epsilon_{j\beta} - \delta_{i\alpha} \delta_{j\beta}) \langle ac \rangle_{31} \\ &\quad + 4(\epsilon_{i\alpha} \epsilon_{j\beta} + \delta_{i\alpha} \delta_{j\beta}) \langle bd \rangle_{31} \\ &\quad + 4\langle (v_F k)^2 \{ (g_0^R g'_z - g_z^R g'_z) \delta_{\alpha\beta} + (g_0^R g''_z - g_z^R g''_z) \epsilon_{\alpha\beta} \} \rangle_{31} \\ &\quad + 4\langle (v_F k)^2 \{ (g_z^R g'_z - g_0^R g'_z) \delta_{\alpha\beta} + (g_z^R g''_z - g_0^R g''_z) \epsilon_{\alpha\beta} \} \rangle_{31}, \end{aligned} \quad (\text{C.53})$$

$$\begin{aligned} L_4 &= \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{(D^R)^3 D^A} [\langle v'_i v'_j (A_\alpha C_\beta + B_\alpha D_\beta) \rangle + 2\epsilon_{\alpha\beta} \langle v'_i v'_j (A_\alpha D_\beta - B_\alpha C_\beta) \rangle \\ &\quad + 2\langle v'_i v'_j (\theta_\alpha \theta_\beta^0 + \phi_\alpha \phi_\beta^0) \rangle], \end{aligned} \quad (\text{C.54})$$

$$\begin{aligned} &= \langle -(3\lambda k^2)^2 (ac - 2d_5 x^2 + x^4) \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \rangle_{31} \\ &\quad - \langle 2(3\lambda k^2)^2 (bd - d_6 x^2) \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \rangle_{31} \\ &\quad - \langle 2x^2 g_z^R g'_z \cos 6\phi (\delta_{i\alpha} \delta_{j\beta} - \epsilon_{i\alpha} \epsilon_{j\beta}) \rangle_{31} \\ &\quad + \langle 2x^2 g_z^R g'_z \cos 6\phi (\delta_{i\alpha} \delta_{j\beta} + \epsilon_{i\alpha} \epsilon_{j\beta}) \rangle_{31}, \end{aligned} \quad (\text{C.55})$$

$$\begin{aligned}
L_2 + L_3 &= \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{(D^{\text{R}})^3 D^{\text{A}}} [\epsilon_{j\alpha} \langle v'_i (A_\alpha \phi_\beta^0 - i B_\alpha \theta_\beta^0) \rangle + i \delta_{j\alpha} \langle v'_i (A_\alpha \theta_\beta^0 - i B_\alpha \phi_\beta^0) \rangle \\
&\quad + \epsilon_{j\beta} \langle v'_i (\phi_\alpha C_\beta + i \theta_\alpha D_\beta) \rangle - i \delta_{j\beta} \langle v'_i (\theta_\alpha C_\beta + i \phi_\alpha D_\beta) \rangle \\
&\quad + \epsilon_{i\alpha} \langle v'_j (A_\alpha \phi_\beta^0 + i B_\alpha \theta_\beta^0) \rangle - i \delta_{i\alpha} \langle v'_j (A_\alpha \theta_\beta^0 + i B_\alpha \phi_\beta^0) \rangle \\
&\quad + \epsilon_{i\beta} \langle v'_j (\phi_\alpha C_\beta - i \theta_\alpha D_\beta) \rangle + i \delta_{i\beta} \langle v'_j (\theta_\alpha C_\beta - i \phi_\alpha D_\beta) \rangle], \tag{C.56}
\end{aligned}$$

$$= \langle 3v_{\text{F}} \lambda k^3 [\{F_{ij}^{(1,a)} + F_{ji}^{(1,a)}\} + \{F_{ij}^{(1,b)} - F_{ji}^{(1,b)}\}] \rangle_{31}. \tag{C.57}$$

ただし

$$\begin{aligned}
F_{ij}^{(1,a)} &= g_z^{\text{R}} \{2a \epsilon_{j\alpha} \epsilon_{i\beta} + 4b \delta_{j\alpha} \epsilon_{i\beta} + (v_{\text{F}} k)^2 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} + \epsilon_{\alpha\beta} \epsilon_{ij})\} \\
&\quad + 2c \epsilon_{j\beta} (\epsilon_{i\alpha} g'_z + \delta_{i\alpha} g''_0) \\
&\quad + (v_{\text{F}} k)^2 (\delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} - \epsilon_{ij} \epsilon_{\alpha\beta}) g'_z \\
&\quad + (v_{\text{F}} k)^2 (\delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} + \epsilon_{ij} \epsilon_{\alpha\beta}) g''_0, \tag{C.58}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_{ij}^{(1,b)} &= -g_0^{\text{R}} \{2a \delta_{j\alpha} \epsilon_{i\beta} - 4b \epsilon_{j\alpha} \epsilon_{i\beta} + (v_{\text{F}} k)^2 (\delta_{\alpha\beta} \epsilon_{ij} - \epsilon_{\alpha\beta} \delta_{ij})\} \\
&\quad + 2c \delta_{j\beta} (\epsilon_{i\alpha} g'_0 + \delta_{i\alpha} g''_z) \\
&\quad + (v_{\text{F}} k)^2 (\epsilon_{ij} \delta_{\alpha\beta} - \delta_{ij} \epsilon_{\alpha\beta}) g'_0 \\
&\quad + (v_{\text{F}} k)^2 (\epsilon_{ij} \delta_{\alpha\beta} + \delta_{ij} \epsilon_{\alpha\beta}) g''_z. \tag{C.59}
\end{aligned}$$

まとめると

$$\Delta_1 = -\epsilon_{i\alpha} \delta_{j\beta}, \tag{C.60}$$

$$L_1 = 2v_{\text{F}}^2 \{(2b + g''_0 K_c)(x^2 - c) - g_z^{\text{R}} g''_0 (K_c^2 - K_s^2)\} - (3\lambda k^2)^2 (bc - d_6 x^2), \tag{C.61}$$

$$\Delta_2 = \delta_{i\alpha} \delta_{j\beta}, \tag{C.62}$$

$$L_2 = 2v_{\text{F}}^2 \{(a + g'_z K_c)(x^2 - c) - g_z^{\text{R}} g'_z (K_c^2 - K_s^2)\} - \frac{1}{2} (3\lambda k^2)^2 (ac - 2d_5 x^2 + x^4), \tag{C.63}$$

$$\Delta_3 = \delta_{i\alpha} \epsilon_{j\beta}, \tag{C.64}$$

$$L_3 = 2v_{\text{F}}^2 \{(2b + g''_0 K_c)(x^2 + c) + 4b g_z^{\text{R}} K_c + g_z^{\text{R}} g''_0 (K_c^2 - K_s^2)\} - (3\lambda k^2)^2 (bc - d_6 x^2), \tag{C.65}$$

$$\Delta_4 = \epsilon_{i\alpha} \epsilon_{j\beta}, \tag{C.66}$$

$$L_4 = 2v_{\text{F}}^2 \{(a + g'_z K_c)(x^2 + c) + 2a g_z^{\text{R}} K_c + g_z^{\text{R}} g'_z (K_c^2 - K_s^2)\} - \frac{1}{2} (3\lambda k^2)^2 (ac - 2d_5 x^2 + x^4), \tag{C.67}$$

$$\Delta_5 = (\tau_z)_{i\alpha} (\tau_x)_{j\beta} - (\tau_x)_{i\alpha} (\tau_z)_{j\beta}, \tag{C.68}$$

$$L_5 = 2v_{\text{F}}^2 c g''_0 K_c - (3\lambda k^2)^2 (bc - d_6 x^2) \tag{C.69}$$

$$\Delta_6 = (\tau_x)_{i\alpha} (\tau_x)_{j\beta} + (\tau_z)_{i\alpha} (\tau_z)_{j\beta}, \tag{C.70}$$

$$L_6 = 2v_{\text{F}}^2 \{cx^2 + (c g'_z + x^2 g_z^{\text{R}}) K_c\} - \frac{1}{2} (3\lambda k^2)^2 (ac - 2d_5 x^2 + x^4), \tag{C.71}$$

となる。

さらに、

$$X = x^2 + g_z^{\text{R}} K_c, \tag{C.72}$$

$$Y = g_z^{\text{R}} K_s, \tag{C.73}$$

とすると、

$$L_1 = 2v_F^2 \{-(2b + g_0'' K_c) D^R + 2g_0'' K_s Y\} - (3\lambda k^2)^2 b D^R, \quad (\text{C.74})$$

$$L_2 = 2v_F^2 \{-(a + g_z' K_c) D^R + 2g_0'' K_s Y\} - \frac{1}{2} (3\lambda k^2)^2 (a - x^2) D^R, \quad (\text{C.75})$$

$$L_3 = 2v_F^2 (2b + g_0'' K_c) (D^R + 2X) - (3\lambda k^2)^2 b D^R, \quad (\text{C.76})$$

$$L_4 = -\frac{1}{2} (3\lambda k^2)^2 (a - x^2) D^R, \quad (\text{C.77})$$

$$L_5 = -(3\lambda k^2)^2 b D^R, \quad (\text{C.78})$$

$$L_6 = 2v_F^2 \{(x^2 + g_z' K_c) (D^R + X) + g_z' K_s Y\} - \frac{1}{2} (3\lambda k^2)^2 (a - x^2) D^R, \quad (\text{C.79})$$

となり、

$$k_x (\partial_x D^R) + k_y (\partial_y D^R) = -2X, \quad (\text{C.80})$$

$$k_x (\partial_y D^R) - k_y (\partial_x D^R) = 2Y, \quad (\text{C.81})$$

より、本文の式が得られる。

付録 D

ディラック点付近の摂動計算

この章では、磁化が面内 ($\theta_M = \pi/2$) の場合のディラック点付近の摂動計算の結果について説明する。

D.1 フェルミ波数

この節では、まずフェルミ波数のふるまいについて、パラメータ領域によって場合分けして議論する。まず、ハミルトニアンを以下のように表せるような新しい変数 \mathbf{p} を導入する。

$$\mathcal{H}_{\mathbf{p}} = \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{(\mathbf{p} + \mathbf{M})^2}{2m^*v_F^2} - \mu. \quad (\text{D.1})$$

$\delta\tilde{\mu} = \mu/m^*v_F^2 - M^2/2(m^*v_F^2)^2$, $\phi = \phi_p - \phi_M$ とすると、フェルミ波数の条件は

$$\delta\tilde{\mu} = \tilde{p} \left(\frac{\tilde{p}}{2} + \tilde{M}\cos\phi \right) - \eta\tilde{p}, \quad (\text{D.2})$$

となる。上記の二次方程式を解くと

$$\tilde{p} = \eta - \tilde{M}\cos\phi + \sqrt{(\eta - \tilde{M}\cos\phi)^2 + 2\tilde{\mu}}, \quad (\text{D.3})$$

となる。この解のふるまいについて理解するためには以下の場合分けを行う必要がある。[X] $\tilde{M} < 1$, (X1) $\delta\mu > 0$, (X2) $\delta\mu < 0$, [Y] $\tilde{M} > 1$, (Y1) $\delta\mu > 0$, (Y2) $\delta\mu < 0$ 。それぞれ詳しく見ていく。

$$[\text{X}] \tilde{M} < 1$$

$$(\text{X1}) \delta\mu > 0$$

$$\tilde{p} = \eta - \tilde{M}\cos\phi + \sqrt{(\eta - \tilde{M}\cos\phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}. \quad (\text{D.4})$$

このときは、 $\eta = \pm 1$ がそれぞれ一枚のフェルミ面を作る。

$$(\text{X2}) \delta\mu < 0$$

$$\tilde{p} = 1 - \tilde{M}\cos\phi + \zeta\sqrt{(1 - \tilde{M}\cos\phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}. \quad (\text{D.5})$$

このときは、 $\eta = +1$ が二枚のフェルミ面 $\zeta = \pm 1$ を作る。

$$[\text{Y}] \tilde{M} > 1$$

$$(\text{Y1}) \delta\mu > 0$$

$$\tilde{p} = \eta - \tilde{M}\cos\phi + \sqrt{(\eta - \tilde{M}\cos\phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}. \quad (\text{D.6})$$

このときは、 $\eta = \pm 1$ がそれぞれ一枚のフェルミ面を作る。

$$(Y2) \delta\mu < 0$$

$$\tilde{p} = \eta - \tilde{M}\cos\phi + \zeta\sqrt{(\eta - \tilde{M}\cos\phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}. \quad (D.7)$$

この場合には、 $(\eta - \tilde{M}\cos\phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu} < 0$ 、 $\eta - \tilde{M}\cos\phi > 0$ となる場合が解になる。 $\eta = \pm 1$, $\zeta = \pm 1$ の中でどれが条件を満たすかは ϕ の値に依存する。

D.2 ダンピング

この節では、前節で求めたフェルミ波数をもとに、 $\tilde{M} < 1$ の場合にダンピングのディラック点付近での表式を求め。特にラシユバ系の場合には、ディラック点の上下で大きく性質が異なる。まず、ダンピングはバンド表示で以下のように表せる。

$$\Gamma^0 = \gamma \left\langle \frac{p_s |g_{0s}|}{|Y_s|} \right\rangle_{\phi_p}, \quad (D.8)$$

$$\Gamma = \gamma \left\langle \text{sgn}(g_0) \frac{p_s g_s}{|Y_s|} \right\rangle_{\phi_p}. \quad (D.9)$$

ここで、

$$\langle \dots \rangle_{\phi_p} = \int \frac{d\phi_p}{2\pi} \dots, \quad (D.10)$$

$$Y_s = -\frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{D}}{\partial \tilde{p}_s} = (\tilde{p}_s + \tilde{M}\cos\phi)g_{0s} + \tilde{p}_s, \quad (D.11)$$

であり、 s は $\eta = \pm 1$, $\zeta = \pm 1$ の中でフェルミ波数の条件に合うものを表すものとする。

$$(X1)$$

この場合には、 $s = \eta$ であり、

$$g_0 = -\eta p, \quad (D.12)$$

$$Y_\eta = -\eta p \sqrt{(\eta - \tilde{M}\cos\phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}, \quad (D.13)$$

となる。よって

$$\Gamma^0 = \gamma \left\langle \frac{|g_{0\eta}|}{\sqrt{(\eta - \tilde{M}\cos\phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} \right\rangle_{\phi_p}, \quad (D.14)$$

$$= \gamma \left\langle \frac{\eta - \tilde{M}\cos\phi + \sqrt{(\eta - \tilde{M}\cos\phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}}{\sqrt{(\eta - \tilde{M}\cos\phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} \right\rangle_{\phi_p}, \quad (D.15)$$

$$= \gamma \left\langle \frac{\eta - \tilde{M}\cos\phi}{\sqrt{(\eta - \tilde{M}\cos\phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} + 1 \right\rangle_{\phi_p}, \quad (D.16)$$

となる。ディラック系の場合には、 $\eta = -1$ を選び、ラシユバ系の場合には $\eta = -1$ と $\eta = +1$ で和をとる。ラシユバ系の場合には、 $\eta = -1$ の場合に $\phi \rightarrow \phi + \pi$ とすると第一項は η の奇関数の和になりゼロとなる。よって、磁化にも化

学ポテンシャルにも依存しない定数となる以下のようなダンピングが得られる。

$$\Gamma^0 = 2\gamma, \quad (\text{D.17})$$

また、

$$\gamma = \gamma \left\langle \eta \hat{\mathbf{p}} \frac{\eta - \tilde{M} \cos \phi + \sqrt{(\eta - \tilde{M} \cos \phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}}{\sqrt{(\eta - \tilde{M} \cos \phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} \right\rangle_{\phi_p}, \quad (\text{D.18})$$

$$= \gamma \left\langle \eta \hat{\mathbf{p}} \frac{\eta - \tilde{M} \cos \phi}{\sqrt{(\eta - \tilde{M} \cos \phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} + \eta \hat{\mathbf{p}} \right\rangle_{\phi_p}, \quad (\text{D.19})$$

$$= \gamma \left\langle \eta \hat{\mathbf{p}} \frac{\eta - \tilde{M} \cos \phi}{\sqrt{(\eta - \tilde{M} \cos \phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} \right\rangle_{\phi_p}, \quad (\text{D.20})$$

となり、ラシユバ系の場合には

$$\mathbf{\Gamma} = 0, \quad (\text{D.21})$$

となる。

(X2)

この場合には、 $s = \zeta$ で、

$$g_0 = -p, \quad (\text{D.22})$$

$$Y_\zeta = -\zeta p \sqrt{(1 - \tilde{M} \cos \phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}, \quad (\text{D.23})$$

となり、

$$\Gamma^0 = \gamma \left\langle \frac{1 - \tilde{M} \cos \phi}{\sqrt{(1 - \tilde{M} \cos \phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} \right\rangle_{\phi_p}, \quad (\text{D.24})$$

$$= \gamma \left\langle \frac{1 - \tilde{M} \cos \phi}{\sqrt{(1 - \tilde{M} \cos \phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} + \zeta \right\rangle_{\phi_p}, \quad (\text{D.25})$$

となる。また、

$$\mathbf{\Gamma} = \gamma \left\langle \hat{\mathbf{p}} \frac{1 - \tilde{M} \cos \phi}{\sqrt{(1 - \tilde{M} \cos \phi)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} \right\rangle_{\phi_p}, \quad (\text{D.26})$$

$$= \gamma \hat{\mathbf{M}} \left\langle \cos \phi_p \frac{1 - \tilde{M} \cos \phi_p}{\sqrt{(1 - \tilde{M} \cos \phi_p)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} \right\rangle_{\phi_p}, \quad (\text{D.27})$$

となる。 $\delta\tilde{\mu}$ の最低次を求めると、(X1) の場合、ラシユバ系では

$$\Gamma_0 = 2\gamma, \quad (\text{D.28})$$

$$\mathbf{\Gamma} = 0, \quad (\text{D.29})$$

となり、ディラック系では、

$$\Gamma_0 = \gamma \frac{\delta\tilde{\mu}}{(1 - \tilde{M}^2)^{3/2}}, \quad (\text{D.30})$$

$$\mathbf{\Gamma} = \gamma \frac{\delta\tilde{\mu}}{(1 - \tilde{M}^2)^{3/2}} \hat{\mathbf{M}}, \quad (\text{D.31})$$

となる。(X2) の場合、ラシュバ系では

$$\Gamma_0 = 2\gamma \left\{ 1 - \frac{\delta\tilde{\mu}}{(1 - \tilde{M}^2)^{3/2}} \right\}, \quad (\text{D.32})$$

$$\Gamma = -2\gamma \frac{\delta\tilde{\mu}}{(1 - \tilde{M}^2)^{3/2}} \hat{M}, \quad (\text{D.33})$$

となり、ディラック系では、

$$\Gamma_0 = -\gamma \frac{\delta\tilde{\mu}}{(1 - \tilde{M}^2)^{3/2}}, \quad (\text{D.34})$$

$$\Gamma = -\gamma \frac{\delta\tilde{\mu}}{(1 - \tilde{M}^2)^{3/2}} \hat{M}, \quad (\text{D.35})$$

となる。

D.3 ディラック系の面内 SOT の異方性

数値計算の結果では、磁化が面内の場合に、面内 SOT の異方性 (χ_{yx}^{\cos}) の符号がディラック点で変化した。この節では、この結果をディラック点付近の摂動計算から確かめる。まず、ダンピングは以下のようにまとまる。

$$\Gamma_0 = \gamma_0 |\delta\tilde{\mu}| \left[1 - \frac{3(1 + \frac{1}{4}\tilde{M}^2)}{4(1 - \tilde{M}^2)^2} \delta\tilde{\mu} \right] \equiv \gamma_0 |\delta\tilde{\mu}| (1 + a\delta\tilde{\mu}), \quad (\text{D.36})$$

$$\Gamma_{\parallel} = \gamma_0 |\delta\tilde{\mu}| \tilde{M} \left[1 - \frac{3(1 + \frac{3}{2}\tilde{M}^2)}{8(1 - \tilde{M}^2)^2} \delta\tilde{\mu} \right] \equiv \gamma_0 |\delta\tilde{\mu}| \tilde{M} (1 + b\delta\tilde{\mu}). \quad (\text{D.37})$$

さらに、

$$\chi_{yx}^{\cos} = \frac{|\delta\tilde{\mu}| \delta\tilde{\mu}}{2\Gamma_0} \cos 2\phi_M (J_1 + J_2 + J_3 + J_4), \quad (\text{D.38})$$

$$2\pi J_1 = -\frac{1}{2} \int d\phi_g \frac{\cos 2\phi_g}{(1 - \tilde{M} \cos \phi_g)(1 + \tilde{M} \cos \phi_g)^3}, \quad (\text{D.39})$$

$$2\pi J_2 = \frac{1}{2} \int d\phi_g \frac{a \cos 2\phi_g - b \tilde{M}^2 \cos^2 \phi_g}{[1 - (\tilde{M} \cos \phi_g)^2]^2}, \quad (\text{D.40})$$

$$2\pi J_3 = \frac{1}{2} \int \phi_g \frac{\cos 2\phi_g + \tilde{M} \cos \phi_g}{(1 - \tilde{M} \cos \phi_g)(1 + \tilde{M} \cos \phi_g)^4}, \quad (\text{D.41})$$

$$2\pi J_4 = \frac{1}{2} 2\pi J_3, \quad (\text{D.42})$$

となる。ここで、 J_1 は異常速度とスピン運動量ロッキングの符号変化に由来する項、 J_2 はダンピングの摂動展開に由来する項、 J_3, J_4 はグリーン関数の分母の波数微分に由来する項である。積分を実行すると以下のようにまとまる。

$$J_1 = -\frac{1}{8} \frac{\tilde{M}^2 (4 - \tilde{M}^2)}{(1 - \tilde{M}^2)^{5/2}}, \quad (\text{D.43})$$

$$J_2 = -\frac{3}{32} \frac{\tilde{M}^2}{(1 - \tilde{M}^2)^{1/2}}, \quad (\text{D.44})$$

$$J_3 = \frac{1}{8} \frac{\tilde{M}^2}{(1 - \tilde{M}^2)^{5/2}}, \quad (\text{D.45})$$

$$J_4 = \frac{1}{16} \frac{\tilde{M}^2}{(1 - \tilde{M}^2)^{5/2}}. \quad (\text{D.46})$$

最もドミナントなのは J_1 であり、スピン運動量ロッキングの符号変化と異常速度の組み合わせの寄与が、面内 SOT の化学ポテンシャルにおける符号変化の主要な原因であるといえる。

D.4 ラシュバ系の面直 SOT の不連続性

ラシュバ系において、磁化が面内の場合には、面直 SOT (χ_{zx}^{cos}) がディラック点で不連続になっている。ディラック点より上からディラック点に化学ポテンシャルを近づけると、Fermi surface term、Fermi sea term はともにゼロとなる。ディラック点より下からディラック点に化学ポテンシャルを近づけた場合を考えると、まず、ダンピングは以下のようにまとまる。

$$\Gamma^0 = 2\gamma \left\langle \frac{1 - \tilde{M}\cos\phi_p}{\sqrt{(1 - \tilde{M}\cos\phi_p)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} \right\rangle_{\phi_p}, \quad (\text{D.47})$$

$$\Gamma = 2\gamma\hat{M} \left\langle \frac{(1 - \tilde{M}\cos\phi_p)\cos\phi_p}{\sqrt{(1 - \tilde{M}\cos\phi_p)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} \right\rangle_{\phi_p} \equiv \Gamma_1\hat{M}. \quad (\text{D.48})$$

さらに、 χ_{zx}^{surf} , χ_{zx}^{sea} は以下ようになる。

$$\chi_{zx}^{\text{surf}} = \cos\phi_M \left\langle \frac{(\Gamma_1 + \Gamma_0\cos\phi_p) - \Gamma_1(1 - \tilde{M}\cos\phi_p)\sin^2\phi_p}{|\Gamma_0 + \Gamma_1\cos\phi_p|\sqrt{(1 - \tilde{M}\cos\phi_p)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} \right\rangle_{\phi_p}, \quad (\text{D.49})$$

$$\chi_{zx}^{\text{sea}} = -\cos\phi_M \left\langle \frac{(1 - \tilde{M}\cos\phi_p)\cos\phi_p + \tilde{M}}{\sqrt{(1 - \tilde{M}\cos\phi_p)^2 + 2\delta\tilde{\mu}}} \right\rangle_{\phi_p}. \quad (\text{D.50})$$

ディラック点では、 $\Gamma_1 = 0$ となり、

$$\chi_{zx}^{\text{surf}} = \cos\phi_M \frac{1}{\tilde{M}} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \tilde{M}^2}} - 1 \right), \quad (\text{D.51})$$

$$\chi_{zx}^{\text{sea}} = -\cos\phi_M \frac{\tilde{M}}{\sqrt{1 - \tilde{M}^2}}, \quad (\text{D.52})$$

となる。足し合わせると以下のようにまとまる。

$$\chi_{zx} = -\cos\phi_M \frac{1}{\tilde{M}} (1 - \sqrt{1 - \tilde{M}^2}). \quad (\text{D.53})$$

磁化の一次で展開すると、

$$\chi_{zx} \simeq -\frac{1}{2}\tilde{M}\cos\phi_M, \quad (\text{D.54})$$

となる。

付録 E

ラシュバ系における摂動計算の数学的構造

$\theta_M\pi/2$ の場合を考える。まず、以下の成分を定義する。

$$\int d\mu f = \pi \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \delta(g_0^2 - g^2) \text{sgn}(g_0). \quad (\text{E.1})$$

このとき、

$$\int d\mu \tilde{g}_0^n, \quad (\text{E.2})$$

は μ と M^2 の $\text{floor}[(n-1)/2]$ 次の多項式を生み出す。 $\text{floor}(x)$ は、 x 以下の最大の整数を表す関数である。

例えば、

$$\int d\mu \tilde{g}_0 = 2, \quad (\text{E.3})$$

$$\int d\mu \tilde{g}_0^2 = -4, \quad (\text{E.4})$$

$$\int d\mu \tilde{g}_0^3 = 8 + 4\tilde{\mu} + 2\tilde{M}^2, \quad (\text{E.5})$$

$$\int d\mu \tilde{g}_0^4 = -16 - 16\tilde{\mu} - 16\tilde{M}^2, \quad (\text{E.6})$$

$$\int d\mu \tilde{g}_0^5 = 32 + 48\tilde{\mu} + 72\tilde{M}^2 + 8\tilde{\mu}^2 + 16\tilde{\mu}\tilde{M}^2 + 2\tilde{M}^4, \quad (\text{E.7})$$

$$\int d\mu \tilde{g}_0^6 = -64 - 128\tilde{\mu} - 256\tilde{M}^2 + 48\tilde{\mu}^2 - 144\tilde{\mu}\tilde{M}^2 - 36\tilde{M}^4, \quad (\text{E.8})$$

$$\int d\mu \tilde{g}_0^7 = 128 + 320\tilde{\mu} + 800\tilde{M}^2 + 192\tilde{\mu}^2 + 768\tilde{\mu}\tilde{M}^2 + 288\tilde{M}^4 + 16\tilde{\mu}^3 + 72\tilde{\mu}^2\tilde{M}^2 + 36\tilde{\mu}\tilde{M}^4 + 2\tilde{M}^6, \quad (\text{E.9})$$

$$\int d\mu \tilde{g}_0^8 = -256 - 768\tilde{\mu} - 2304\tilde{M}^2 - 640\tilde{\mu}^2 - 3200\tilde{\mu}\tilde{M}^2 - 1600\tilde{M}^4 - 128\tilde{\mu}^3 - 768\tilde{\mu}^2\tilde{M}^2 - 576\tilde{\mu}\tilde{M}^4 - 64\tilde{M}^6, \quad (\text{E.10})$$

である。

$M = 0$ とすると、これらの多項式は、カツツ・ムーディ・フィボナッチ数列 [103] と呼ばれる数列の密度とその変形によって表されること以下で示す

まず n が偶数 $2m$ の場合を考える。このとき

$$\int d\mu \tilde{g}_0^{2m} = (2\tilde{\mu})^m \sum_{k=1}^m \mathfrak{X}_{m,k} \tilde{\mu}^{-k}, \quad (\text{E.11})$$

とすると、 $\sum_{k=1}^m \mathfrak{X}_{m,k} = \sum_{k=1}^m m+k-1 C_{2k-1} 2^k$ は、カツツ・ムーディ・フィボナッチ数列の一つである $X_2(2,3)$ を 2 倍したものになる。

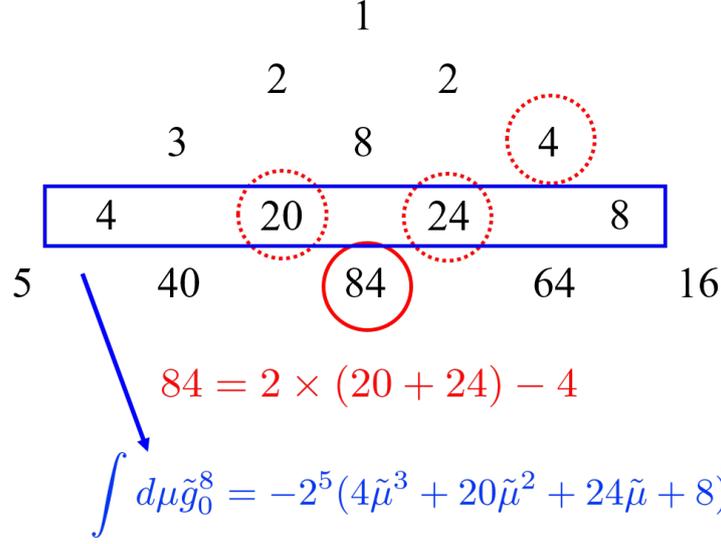


図 E.1: $\mathfrak{X}_{m,k}/2$ によって作られる三角形。 n 行目の和の二倍は、 $X_2(2,3)$ に等しい。 $\mathfrak{X}_{m,k}$ は漸化式 $\mathfrak{X}_{m,k} = 2(\mathfrak{X}_{m-1,k-1} + \mathfrak{X}_{m-1,k}) - \mathfrak{X}_{m-2,k}$ を満たす (赤部分)。 $\int d\mu \tilde{g}_0^{2m}$ における $\tilde{\mu}^{m-k}$ の係数は m 行 k 列目の要素の -2^{m+1} 倍で与えられる (青部分)。

カツツ・ムーディ・フィボナッチ数列は、二次元一般化カルタン行列によるワイル群の単純ルートへの作用によって作られる格子点を特徴づけるために導入された数列である。

$$\begin{pmatrix} 2 & -a \\ -b & 2 \end{pmatrix}. \quad (\text{E.12})$$

ここで a, b はカルタン整数と呼ばれる。4種類のカツツ・ムーディ・フィボナッチ数列が導入されており、それらは以下のようなフィボナッチ数列の類似物である。

$$X_1(a, b) : x_{1,2m} = (ab - 2)x_{1,2m-2} - x_{1,2m-4}, x_{1,0} = 1, x_{1,2} = ab - 1, \quad (\text{E.13})$$

$$Y_1(a, b) : y_{1,2m} = (ab - 2)y_{1,2m-2} - y_{1,2m-4}, y_{1,0} = 0, y_{1,2} = b, \quad (\text{E.14})$$

$$X_2(a, b) : x_{2,2m} = (ab - 2)x_{2,2m-2} - x_{2,2m-4}, x_{2,0} = 0, x_{2,2} = a, \quad (\text{E.15})$$

$$Y_2(a, b) : y_{2,2m} = (ab - 2)y_{2,2m-2} - y_{2,2m-4}, y_{2,0} = 1, y_{2,2} = ab - 1. \quad (\text{E.16})$$

フィボナッチ数列の連続する二項の比は、 $n \rightarrow \infty$ で黄金比になるが、これらの数列も、 $\Psi(ab) = [(ab - 2) + \sqrt{ab(ab - 4)}]/2$ という比に近づくことが示せる。 $X_2(2,3)$ は数列 $x_{2,2m} = 4x_{2,2(m-1)} - x_{2,2(m-2)}$ 、 $x_{2,0} = 0$ 、 $x_{2,1} = 2$ を表し、対応する比は $2 + \sqrt{3}$ である。

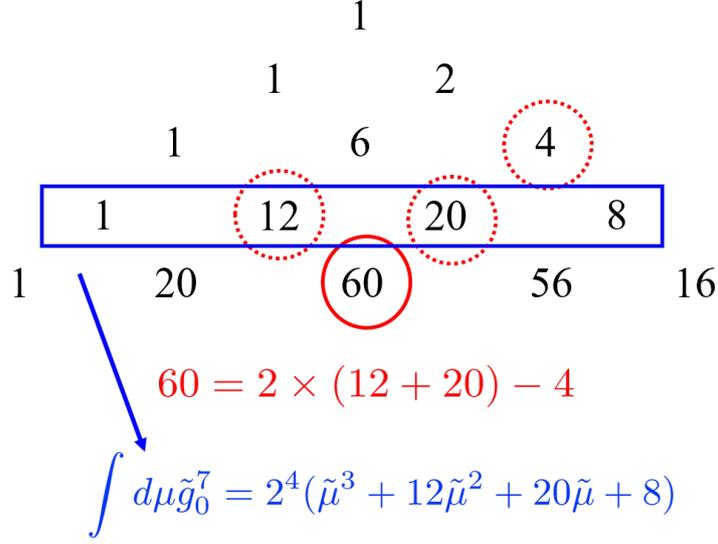
また、 $\mathfrak{X}_{m,k} = {}_{m+k-1}C_{2k-1} 2^k$ は $2|U_m(1-x)|[x^{k-1}]$ (第二種チエビシエフ多項式 $U_m(1-x)$ の x^{k-1} の係数の絶対値の二倍) と等しい。 U_m は

$$U_m(\cos\theta) = \frac{\sin((n+1)\theta)}{\sin\theta}, \quad (\text{E.17})$$

であり、 $U_{m+1}(y) = 2yU_m(y) - U_{m-1}(y)$ を満たす。これらの数列はパスカルの三角形のような図で表すことが出来る (図 E.1)。

次に、 n が奇数 $2m - 1$ の場合を考える。このとき、

$$\int d\mu \tilde{g}_0^{2m+1} = \frac{(2\tilde{\mu})^m}{2} \sum_{k=0}^m \mathfrak{X}'_{m,k} \tilde{\mu}^{-k}, \quad (\text{E.18})$$



謝辞

博士課程での研究は、指導教授である河野浩先生をはじめ、山影先生、研究室の先輩である仲澤さん、山口さん、同期の船戸君と中根君、後輩のみなさんとの議論と穏やかな日常生活によって支えられて進めることが出来ました。特に、最終年度は COVID-19 の影響で研究室に入れなくなる時期があり、現地開催の学会への参加も出来なくなり、また就職活動も難しい状況にあり、そして何より非日常的なことが連続する中で研究を続けることが困難な時期もありましたが、多くの方に支えられて研究を続ことが出来ました。博士課程全体としては、国内外の多くの学会へ参加して様々な研究者と議論することが出来、物理という学問の一端を知る大きな経験となりました。最後に、様々な状況で私を支えてくれた田中伸明、Sid C. Dellby と、そして家族に感謝をします。

参考文献

- [1] L. D. Landau, *Phys. Z. Sowjetunion* **11**, 26, 542 (1937).
- [2] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952).
- [3] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **110**, 827 (1958).
- [4] Y. Nambu, *ibid. Phys. Rev.* **117**, 648 (1960).
- [5] J. Goldstone, A. Salam, S. Weinberg, *Phys. Rev.* **127**, 965 (1962).
- [6] P.W. Anderson, *Science* **177**, 393 (1972).
- [7] X. -L. Qi and S. -C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83** (2011).
- [8] K. von Kiltzing, G. Dorda, and M. Pepper *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- [9] B. Laughlin, *Phys. Rev. B* **23**, 5632 (1981).
- [10] D. J. Thouless *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
- [11] M. Kohmoto, *Ann. of Phys.* **160**, 343, (1985).
- [12] C. M. Kane and E. J. Male, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
- [13] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. -C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
- [14] M. König, S. Wiedmann¹, C. Brüne¹, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp¹, X. -L. Qi, S. -C. Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
- [15] J. E. Moore and L. Balents, *Phys. Rev. B* **75**, 121306(R) (2007).
- [16] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **76**, 045302 (2007).
- [17] X. -L. Qi, T. L. Hughes, and S. -C. Zhang, *Phys. Rev. B* **78**, 195424 (2008).
- [18] H.-J. Zhang, C. -X. Liu, X. -L. Qi, X. -Y. Deng, X. Dai, S. -C. Zhang, and Z. Fang, *Phys. Rev. B* **80**, 085307 (2009).
- [19] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan, *Nat. (London)* **452**, 970 (2008).
- [20] H.-J. Zhang, C. -X. Liu, X. -L. Qi, X. Dai, Z. Fang and S. -C. Zhang, *Nat. Phys.* **5**, 438 (2009).
- [21] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain and Z.-X. Shen, *Science* **325**, 178 (2009).
- [22] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, F. Meier, J. H. Dil, J. Osterwalder, L. Patthey, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 146401 (2009).
- [23] Y. L. Chen, Z. K. Liu, J. G. Analytis, J.-H. Chu, H. J. Zhang, B. H. Yan, S.-K. Mo, R. G. Moore, D. H. Lu, I. R. Fisher, S. C. Zhang, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 266401 (2010).
- [24] T. Sato, K. Segawa, H. Guo, K. Sugawara, S. Souma, T. Takahashi, and Y. Ando. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 136802 (2010).
- [25] S. -Y. Xu, L. A. Wray, Y. Xia, R. Shankar, A. Petersen, A. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, Y. S. Hor, D. Grauer, R. J. Cava, M. Z. Hasan *et al.*, arXiv:1007.5111.
- [26] H. Jin, J. -H. Song, A. J. Freeman, and M. G. Kanatzidis, *Phys. Rev. B* **83**, 041202(R) (2011).

- [27] C. Brüne, C. X. Liu, E. G. Novik, E. M. Hankiewicz, H. Buhmann, Y. L. Chen, X. L. Qi, Z. X. Shen, S. C. Zhang, and L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 126803 (2011).
- [28] J. N. Hancock, J. L. M. van Mechelen, A. B. Kuzmenko, D. van der Marel, C. Brüne, E. G. Novik, G. V. Astakhov, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 136803 (2011).
- [29] G. Yang, Junwei Liu, Liang Fu, Wenhui Duan, and Chaoxing Liu, *Phys. Rev. B* **89**, 085312 (2014).
- [30] R. Noguchi, T. Takahashi, K. Kuroda, M. Ochi, T. Shirasawa, M. Sakano, C. Bareille, M. Nakayama, M. D. Watson, K. Yaji, A. Harasawa, H. Iwasawa, P. Dudin, T. K. Kim, M. Hoesch, V. Kandyba, A. Giampietri, A. Barinov, S. Shin, R. Arita, T. Sasagawa and Takeshi Kondo, *Nat.* **566**, 518 (2019).
- [31] Y. Ando, *Introduction to Topological Insulators*, Tokyo, Kodansha, 2014.
- [32] C. H. Li, O. M. J. van 't Erve, J. T. Robinson, Y. Liu, L. Li and B. T. Jonker, *Nat. Nanotech.* **9**218 (2014).
- [33] A. R. Mellnik, J. S. Lee, A. Richardella, J. L. Grab, P. J. Mintun, M. H. Fischer, A. Vaezi, A. Manchon, E.-A. Kim, N. Samarth and D. C. Ralph, *Nat.* **511**, 449 (2014).
- [34] Y. Shiomi, K. Nomura, Y. Kajiwara, K. Eto, M. Novak, Kouji Segawa, Yoichi Ando, and E. Saitoh, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 196601 (2014).
- [35] Y. Ando, T. Hamasaki, T. Kurokawa, K. Ichiba, F. Yang, M. Novak, S. Sasaki, K. Segawa, Y. Ando, and M. Shiraishi, *Nano Lett.* **14**, 6226 (2014).
- [36] L. Fu, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 266801 (2009).
- [37] M. Nomura, S. Souma, A. Takayama, T. Sato, T. Takahashi, K. Eto, K. Segawa, and Y. Ando, *Phys. Rev. B* **89**, 045134 (2014).
- [38] E.I. Rashba, *Fiz. Tverd. Tela* **1**, 407 (1959) [*Sov. Phys.–Solid State* **1**, 368 (1959)].
- [39] E. I. Rashba and V. I. Sheka, *Fiz. Tverd. Tela – Collected Papers (Leningrad)*, v.II, 162 (1959).
- [40] Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, *Sov. Phys. - JETP Lett.* **39**, 78 (1984).
- [41] A. Kitaev, *AIP Conf. Proc.* **1134**, 22 (2009).
- [42] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. B* **78**, 195125 (2008).
- [43] S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *New J. Phys.* **12**, 065010 (2010).
- [44] K. Shiozaki and M. Sato, *Phys. Rev. B* **90**, 165114 (2014).
- [45] F. Schindler *et al.*, *Sci. Adv.* **4** (6), eaat0346 (2018).
- [46] C. -Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L. -L. Wang, Z. -Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S. -C. Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X. -C. Ma and Q. -K. Xu, *Science* **340**, 167 (2013).
- [47] N. A. Sinitsyn, J. E. Hill, H. Min, J. Sinova, and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 106804 (2006).
- [48] K. Garello, C. O. Avci, I. M. Miron, M. Baumgartner, A. Ghosh, S. Auffret, O. Boulle, G. Gaudin, and P. Gambardella, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 212402 (2014).
- [49] B. A. Bernevig and O. Vafek, *Phys. Rev. B* **72**, 033203 (2005).
- [50] A. Manchon and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **78**, 212405 (2008); **79**, 094422 (2009).
- [51] A. Matos-Abiague and R. L. Rodríguez-Suárez, *Phys. Rev. B* **80**, 094424 (2009).
- [52] I. Garate and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. B* **80**, 134403 (2009).
- [53] X. Wang and A. Manchon, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 117201 (2012).
- [54] K. -W. Kim, S. -M. Seo, J. Ryu, K. -J. Lee, and H. -W. Lee, *Phys. Rev. B* **85**, 180404(R) (2012).
- [55] D. A. Pesin and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. B* **86**, 014416 (2012).
- [56] J. Železný, H. Gao, K. Výborný, J. Zemen, J. Mašek, A. Manchon, J. Wunderlich, J. Sinova, and T. Jungwirth, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 157201 (2014).

- [57] H. Li, H. Gao, L. P. Žárbo, K. Výborný, X. Wang, I. Garate, F. Dogan, A. Čejchan, J. Sinova, T. Jungwirth, and A. Manchon, *Phys. Rev. B* **91**, 134402 (2015).
- [58] P. Wadley, B. Howells, J. Železný, C. Andrews, V. Hills, R. P. Campion, V. Novák, K. Olejník, F. Maccherozzi, S. S. Dhesi, S. Y. Martin, T. Wagner, J. Wunderlich, F. Freimuth, Y. Mokrousov, J. Kuneš, J. S. Chauhan, M. J. Grzybowski, A. W. Rushforth, K. W. Edmonds, B. L. Gallagher, and T. Jungwirth, *Science* **351**, 587 (2016).
- [59] S. Emori, U. Bauer, S. M. Ahn, E. Martinez, and G. S. Beach, *Nat. Mater.* **12**, 611 (2013).
- [60] K. S. Ryu, L. Thomas, S. H. Yang, and S. Parkin, *Nat. Nanotechnol.* **8**, 527 (2013).
- [61] A. Chernyshov, M. Overby, X. Liu, J. K. Furdyna, Y. LyandaGeller, and L. P. Rokhinson, *et al.*, *Nat. Phys.* **5**, 656 (2009).
- [62] I. M. Miron, T. Moore, H. Szambolics, L. D. Buda-Prejbeanu, S. Auffret, B. Rodmacq, S. Pizzini, J. Vogel, M. Bonfim, A. Schuhl, and G. Gaudin, *Nat. Mater.* **10**, 419 (2011).
- [63] A. V. Khvalkovskiy, V. Cros, D. Apalkov, V. Nikitin, M. Krounbi, K. A. Zvezdin, A. Anane, J. Grollier, and A. Fert, *Phys. Rev. B* **87**, 020402(R) (2013).
- [64] K. Litziuss, I. Lemesh, B. Kruger, P. Bassirian, L. Caretta, K. Richter, F. Buttner, K. Sato, O. A. Tretiakov, J. Förster, R. M. Reeve, M. Weigand, I. Bykova, H. Stoll, G. Schutz, G. S. D. Beach, and M. Kläui, *Nat. Phys.* **13**, 170 (2017).
- [65] I. M. Miron, G. Gaudin, S. Auffret, B. Rodmacq, A. Schuhl, S. Pizzini, J. Vogel, and P. Gambardella, *Nat. Mater.* **9**, 230 (2010).
- [66] I. M. Miron, K. Garello, G. Gaudin, P.-J. Zermatten, M. V. Costache, S. Auffret, S. Bandiera, B. Rodmacq, A. Schuhl, and P. Gambardella, *Nature (London)* **476**, 189 (2011).
- [67] K. Garello, I. M. Miron, C. O. Avci, F. Freimuth, Y. Mokrousov, S. Blugel, S. Auffret, O. Boulle, G. Gaudin, and P. Gambardella, *Nat. Nanotechnol.* **8**, 587 (2013).
- [68] L. Q. Liu, C. F. Pai, Y. Li, H. W. Tseng, D. C. Ralph, and R. A. Buhrman, *Science* **336**, 555 (2012).
- [69] J.-H. Park *Phys. Rev. B* **87**, 041301(R) (2013).
- [70] R. Tomasello, E. Martinez, R. Zivieri, L. Torres, M. Carpentieri, and G. Finocchio, *Sci. Rep.* **4**, 6784 (2014).
- [71] J. Linder, *Phys. Rev. B* **87**, 054434 (2013).
- [72] P. Gambardella and I. M. Miron, *Philos. Trans. R. Soc. London A* **369**, 3175 (2011).
- [73] A. Brataas and K. M. D. Hals, *Nat. Nanotechnol.* **9**, 86 (2014).
- [74] K. M. D. Hals and A. Brataas, *Phys. Rev. B* **88**, 085423 (2013).
- [75] W. Jiang, P. Upadhyaya, W. Zhang, G. Yu, M. B. Jungfleisch, F. Y. Fradin, J. E. Pearson, Y. Tserkovnyak, K. L. Wang, O. Heinonen, S. G. E. te Velthuis, and A. Hoffmann *Science* **349**, 283 (2015).
- [76] W. Jiang, X. Zhang, G. Yu, W. Zhang, X. Wang, M. B. Jungfleisch, J. E. Pearson, X. Cheng, O. Heinonen, K. L. Wang, Y. Zhou, A. Hoffmann, and S. G. E. te Velthuis, *Nat. Phys.* **13**, 162 (2017).
- [77] S. Woo, K. Litzius, B. Kruger, M.-Y. Im, L. Caretta, K. Richter, M. Mann, A. Krone, R. M. Reeve, M. Weigand, P. Agrawal, I. Lemesh, M.-A. Mawass, P. Fischer, M. Kläui, and G. S. D. Beach, *Nat. Mater.* **15**, 501 (2016).
- [78] F. Jonietz, S. Muhlbauer, C. Pfleiderer, A. Neubauer, W. Munzer, A. Bauer, T. Adams, R. Georgii, P. Boni, R. A. Duine, K. Everschor, M. Garst, and A. Rosch, *Science* **330**, 1648 (2010).
- [79] A. Hoffmann and S.D.Bader, *Phys.Rev.App.* **4**, 047001 (2015).
- [80] G. Tatara, H. Kohno, and J. Shibata, *Phys. Rep.* **468**, 213 (2008).
- [81] T. Jungwirth, Jairo Sinova, J. Mašek, J. Kučera, and A. H. MacDonald, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 809 (2006).

- [82] K. Yasuda, R. Wakatsuki, T. Morimoto, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. S. Takahashi, M. Ezawa, M. Kawasaki, N. Nagaosa, Y. Tokura, *Nat. Phys.* **12**, 555 (2016).
- [83] C. Liu, Y. Zang, W. Ruan, Y. Gong, K. He, X. Ma, Q. - K. Xue, Y. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 176809 (2017).
- [84] Q. L. He, G. Yin, A. J. Grutter, L. Pan, X. Che, G. Yu, D. A. Gilbert, S. M. Disseler, Y. Liu, P. Shafer, B. Zhang, Y. Wu, B. J. Kirby, E. Arenholz, R. K. Lake, X. Han, K. L. Wang, *Nat. Commun.* **9**, 2767 (2018).
- [85] J. Chen, L. Wang, M. Zhang, L. Zhou, R. Zhang, L. Jin, X. Wang, H. Qin, Y. Qiu, J. Mei, F. Ye, B. Xi, H. He, B. Li, G. Wang, *Nano Lett.* **19**, 6144 (2019).
- [86] V. K. Dugaev, M. Inglot, E. Ya. Sherman, J. Berakdar, and J. Barnaś, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 206601 (2012).
- [87] H. Wu, F. Groß, B. Dai, D. Lujan, S. A. Razavi, P. Zhang, Y. Liu, K. Sobotkiewich, J. Förster, M. Weigand, G. Schütz, X. Li, J. Gräfe, K. L. Wang, *Adv. Mat.* **32**, 2003380 (2020).
- [88] A. Sakai and H. Kohno, *Phys. Rev. B* **89**, 165307 (2014).
- [89] C. M. Wang and F. J. Yu, *Phys. Rev. B* **84**, 155440 (2011).
- [90] C. M. Wang and X. L. Lei, *Phys. Rev. B* **89**, 045415 (2014).
- [91] J. -Y. Li, R. -Q. Wang, M. -X. Deng, and M. Yang, *Phys. Rev. B* **99**, 155139 (2019).
- [92] R. S. Akzhanov and A. L. Rakhmanov, *Phys. Rev. B* **97**, 075421 (2018).
- [93] R. S. Akzhanov and A. L. Rakhmanov, *Phys. Rev. B* **99**, 045436 (2019).
- [94] S. -H. Zheng, H. -J. Duan, J. -K. Wang, J. -Y. Li, M. -X. Deng, and R. -Q. Wang, *Phys. Rev. B* **101**, 041408(R) (2020).
- [95] D. Kurebayashi, N. Nagaosa, *Phys. Rev. B* **100**, 134407 (2019).
- [96] T. S. Nunner, N. A. Sinitsyn, M. F. Borunda, V. K. Dugaev, A. A. Kovalev, Ar. Abanov, C. Timm, T. Jungwirth, J. -i. Inoue, A. H. MacDonald, and J. Sinova, *Phys. Rev. B* **76**, 235312 (2007).
- [97] I. A. Ado, I. A. Dmitriev, P. M. Ostrovsky, and M. Titov, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 046601 (2016).
- [98] I. A. Ado, Oleg A. Tretiakov, and M. Titov, *Phys. Rev. B* **95**, 094401 (2017).
- [99] T. Kato, Y. Ishikawa, H. Itoh, and J.-i. Inoue, *Phys. Rev. B* **77**, 233404 (2008).
- [100] J. Fujimoto, PhD thesis (Osaka University, 2015).
- [101] R. Wakatsuki, M. Ezawa, and N. Nagaosa, *Sci. Rep* **5**, 13638 (2015).
- [102] M. Horio, C. E. Matt, K. Kramer, D. Sutter, A. M. Cook, Y. Sassa, K. Hauser, M. Månsson, N. C. Plumb, M. Shi, O. J. Lipscombe, S. M. Hayden, T. Neupert and J. Chang, *Nat. Com.* **9**, 3252 (2018).
- [103] K. Andersen, L. Carbone, and D. Penta, *Journal of Combinatorics and Number Theory.* **2**, 245 (2010).
- [104] R. Wakatsuki, M. Ezawa, and N. Nagaosa, *Sci. Rep* **5**, 13638 (2015).