

論文の内容の要旨

論文題目 **Noncommutative geometry approach to quantum transport phenomena**
(非可換幾何学を用いた量子輸送現象の理論的研究)

氏名 杉本 直之

近年、固体中の波動関数の位相の幾何学的構造から発生するトポロジカルカレントが注目されている。このカレントは、散逸を伴わないことからデバイスの省電力化に貢献すると期待されている。一方で、現実の物質には不純物などの波動関数の位相を乱す散乱体が存在する。このため、トポロジカルカレントが不純物散乱下で生き残るかどうか重要な問題になり、その解決には多バンド系での線形応答計算が必要になる。また、純粋に量子的なトンネル電流も、キャリアの波動性が本質であり、波動のコヒーレンスを乱す散乱効果の研究は応用上も重要である。

既存の応答理論は、久保公式や Boltzmann 方程式が有名であるが、これらの方法で上記の多自由度系の輸送現象の解析を行うことは難しい。なぜならば、電磁場応答の計算にはゲージ対称性を反映する Ward 恒等式を満たすことが要求されるからである。本研究では、計算の各過程で Ward 恒等式が自動的に満たされる、ゲージ共変な応答理論を構築し、多自由度系の非平衡定常系を理論的に研究した(1)。この方法を使って、スピン/異常ホール効果の位相効果と不純物散乱効果の競合(2,3)、及び電場による金属絶縁体転移を理論的に解析した(4)。

(1): ゲージ共変な応答理論

非平衡現象を記述する方法として、Keldysh Green 関数法が知られている。この方法は、1 粒子 Green 関数の時間経路積を拡張することで、基底状態だけでなく励起状態も扱えるようにしたものである。時間経路積の拡張に対応し、1 粒子 Green 関数は 2×2 の Keldysh 空間に拡張され、この空間上では励起状態に対しても Feynman ダイアグラム則が成立する。Langreth は、電場下での Keldysh Green 関数を電場の一次のオーダーで求める Quantum Boltzmann 方程式を導出した[1]。この方程式はポアソン括弧で書かれ、ポアソン構造に電磁場の情報が反映されている。また、方程式はゲージ共変な形に書かれているため、Ward 恒等式が保たれることが保障されている。Quantum Boltzmann 方程式は、ポアソン括弧で書かれるという点で古典的である。量子論と古典論の対応から、このポアソン括弧を交換子に置き換えること(量子化)で一般の電磁場下での Quantum Boltzmann 方程式が得られると予想できる。本研究では変形量子化と呼ばれる方法[2]で Quantum Boltzmann 方程式を一般化した。Quantum Boltzmann 方程式は電磁場に関して線形の範囲でのみ有効であるため、非線形性が強い金属絶縁体転移などの計算は不可能であったが、この一般化によって、電場下での非平衡定常系を記述できるようになった[3,4]。

この一般化は、エネルギー・運動量演算子の非可換化に対応している。よく知られているように、電磁場下ではエネルギー・運動量演算子は電磁場のベクトルポテンシャルが加えられる。このときエネルギー・運動量は非可換になり、非可換性は電磁場テンソルで測られる。電磁場の効果はエネルギー・運動量の積を非可換な積(star 積)に変えることで導入される。このような、非可換積が定義された空間は非可換幾何と呼ばれ、その意味で電場による非平衡現象は空間（エネルギー・運動量空間）の非可換化と同一視できる。この方法は以下の利点がある。

1：グリーン関数の変数がゲージ共変な力学的運動量であるためゲージ普遍性が自明に保たれており、ワード恒等式を考慮する必要がない。

2：ホール系の伝導をフェルミ面からの寄与とフェルミ球全体からの寄与とに分ける Streda 公式の非線形あるいは相互作用下での一般化公式を自然に導出する。

3：非線形への拡張が容易である。積が外場の効果を陽に含む唯一のものであり、この積の電磁場に対する高次の展開が非線形応答を与える。Star 積はある topological open string の経路積分[2]で書けるので、展開が容易であり、これが非線形への拡張の容易さの根拠になっている。また、Star 積は電磁場に対して非摂動的な形でも書けるので、電磁場を非摂動に扱える。これは久保公式に比べ著しく優っている点である。

4：量子効果を損なうことがない。

この公式を使ってスピン/異常ホール効果及び電場誘起金属絶縁体を研究した。

(2): スピンホールカレントの不純物効果の定式化

本研究では内因性スピンホールカレントの不純物効果を研究した。内因性スピンホールカレントとは、磁性体や磁場を用いずに、スピン軌道相互作用と外部電場によって作られる緩和の無いスピンの流れである。近年、2次元 Rashba 模型でスピンホールカレントが、不純物効果で消えることが示されたが、それは特定のモデルに基づいたもので一般的証明は無かった[5]。また、スピン軌道相互作用がスピンの保存則を破るために、スピンカレントの定義が一意的でないという問題もある[6]。

(a) Rashba model

Impurity potential	Born approx.	Definition of spin current	
		$\langle J_s \rangle$	\mathcal{J}_s
$\delta(\mathbf{r})$	1st/higher	0	0
$V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$	1st	0	0
	higher	0	Finite

(b) Cubic Rashba model

Impurity potential	Born approx.	Definition of spin current	
		$\langle J_s \rangle$	\mathcal{J}_s
$\delta(\mathbf{r})$	1st/higher	Finite	0
$V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$	1st	Finite	0
	higher	Finite	Finite

図1：2次元系でのスピ
ンカレントの振る舞い。
スピンの定義欄の左は連
続の方程式を満たさない
conventional current、右
は保存則を満たす
conventional current を
表す。

本研究では、不純物散乱によるスピンの消失がモデルや不純物ポテンシャルの形、スピンの定義にしたがってどのように変化するかを研究した。ホール電流に対するストレーダ公式をスピントに拡張し、ハミルトニアンからスピンホール効果が有限となるかを判定できることを示した。特に、2次元電子系は不純物散乱に弱く、2次元ホール系はスピントの定義によって振る舞いが劇的に変わることを発見した。図1に2次元系のスピントの振る舞いをまとめた[7]。

(3): 異常ホール効果の理論的研究

スピンホールカレントの研究結果を強磁性体における異常ホール効果に応用し、不純物効果とスピン軌道相互作用との競合を研究した。強磁性金属では、磁場を0に近づけても自発磁化にともなう有限のホール効果（異常ホール効果）が観測されている。この現象の起源は不純物散乱による外因性[8]とバンド構造による内因性[9]のものが提案されている。実際の物質でどちらの効果が支配的になるかはその条件はわかっていなかった。

この問題を明らかにするため、スピン軌道相互作用によって交差したバンドがわずかに開く状況を考え、その点の周りを記述する実効的なモデルを立てホール電流の計算を行った。この系では特徴的なエネルギースケールがスピン軌道相互作用、不純物相互作用、フェルミ順位の3つ存在する。これらの大きさによって3つの特徴的な領域が存在することを示した[10]。

フェルミ順位がもっとも大きく、不純物散乱によるエネルギーの不確実性がスピン軌道相互作用より小さい領域では不純物散乱が支配的（外因性領域）となるのに対し、その逆の領域では内因性機構が支配的となる（内因性領域）。フェルミ順位が不純物散乱によるエネルギーの不確実性と同程度のときホール伝導度が縦伝導度の1.6乗に比例するホッピング領域が現れる（図2参照）。この結果は、現存する実験データをよく説明する。また、内因性領域ではホールカレントはバンド構造だけに依存し不純物散乱の詳細にはよらない。このためこの領域では第一原理電子状態計算による予測が可能となり物質設計への道が開けることとなる。

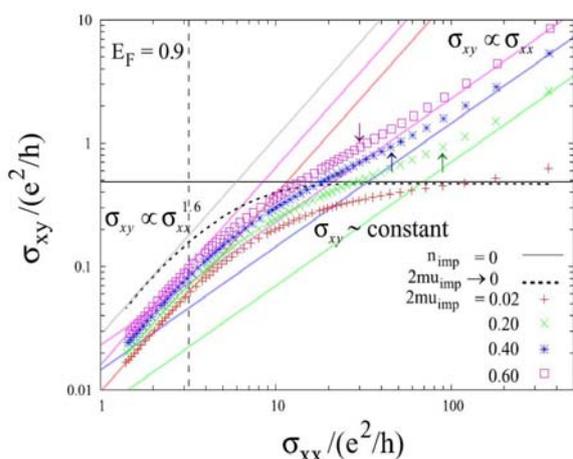


図2：異常ホール伝導v.s.縦伝導。縦軸はホール伝導率、横軸は縦伝導率を表す。縦伝導率は不純物密度に逆比例する。試料のクリーンさに対応して、ホール伝導率が縦伝導率に比例、ほぼ一定、縦伝導率の1.6乗に比例する3つの領域が現れる。

(4): 電場誘起型金属絶縁体転移の理論的研究

近年、電場・電流誘起型の金属絶縁体転移を起こす物質が次々に発見されている。我々
 は中でも強相関物質に着目し、この現象の理論的解明を試みた。この研究では平均場近似
 を採用し、平衡状態で、電子相関によってフェルミ面にバンドギャップが開いているバン
 ド絶縁体を想定し、この系に電場をかけていったときの非平衡電子分布および電流を計算
 した。このとき電子相関によってギャップ自身が電場に依存し、電流下でのギャップの不
 安定性が導かれ、一次の金属絶縁体転移が起こることを示した（図3参照）。非断熱遷移
 を研究する際に使われる Landau-Zener 理論のもつ特徴的な電場スケールより小さな電場
 スケールが、不純物散乱から生じ、この結果 Landau-Zener 理論から予想される相転移の
 敷居値より小さな電場で相転移が起こることが解った[11]。このことは実験と一致する
 [12]。バルク中のトンネル電流は不純物が存在したときに、共鳴的に増大し、空間的な
 “Hot spot”になっていることがわかった。この研究によって、強相関電子系での電場スイ
 ッチング素子の基礎物理が与えられ、実用への手がかりになると思われる。

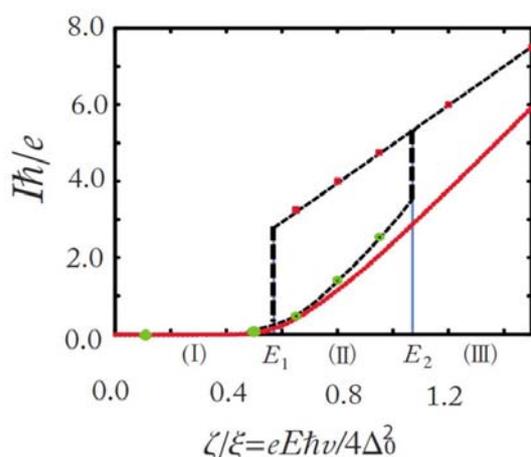


図3：相関電子系の電場-電流特性。縦
 軸が電流、横軸が電場。黒点線は平均場
 近似で電子相関を取り入れた場合。赤線
 は相関を考慮せずにバンドギャップを固
 定した場合。電子相関を考慮すると中間
 電場(II)で準安定状態が現れ、電場-電流
 曲線がヒステリシス曲線になる。

- [1] D. C. Langreth, Phys. Rev. **148**, 707 (1966).
- [2] M Kontsevich, QA/9709040, A. S. Cattaneo and G. Felder, Commun. Math. Phys. **212** 591 (2000).
- [3] S. Onoda, N. Sugimoto and N. Nagaosa, Prog. Theor. Phys. **116**, 61 (2006).
- [4] N. Sugimoto, S. Onoda and N. Nagaosa, Prog. Theor. Phys. **117**, 415 (2007).
- [5] J. I. Inoue, G. E. W. Bauer, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B **70**, 041303(R) (2004).
- [6] J. Shi, P. Zhang, D. Xiao, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **96**, 076604 (2006).
- [7] N. Sugimoto, S. Onoda, S. Murakami and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **73**, 113305 (2006).
- [8] J. Smit, Physica **21**, 877 (1955).
- [9] R. Karplus and J. M. Luttinger, Phys. Rev. **95**, 1154 (1954).
- [10] S. Onoda, N. Sugimoto and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **97**, 126602 (2006).
- [11] N. Sugimoto, S. Onoda and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **78**, 155104 (2008).
- [12] S. Yamanouchi, Y. Taguchi and Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. **83**, 5555 (1999).