

フラストレーションのある強磁性体における異常ホール効果

東京大学 工学部 物理工学科 村上 修一¹, 大串 研也, 永長 直人

絶対零度に近付くと、異常ホール効果については各種の散乱機構が効かなくなってきたかわりにカイラリティによる寄与が顕著になると予想される。これによって、 $R_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ ($R=\text{Nd, Sm, Gd}$) での、低温で増大する異常ホール効果を説明できる。こうしたカイラリティによる異常ホール効果は、幾何学的フラストレーションのある系に特徴的に見られると考えられる。

1 異常ホール効果 – 従来の理論と実験 –

異常ホール効果とは、強磁性体の場合のホール抵抗に $\rho_{xy} = R_0 B + R_s M$ のように磁化 M に比例する項が現れることであり、この R_s を異常ホール係数と呼ぶ。異常ホール効果についてはさまざまな理論があるが [1]、共通しているのはスピン軌道相互作用と、何らかの散乱機構の2つの要因が必要であることである。ここで言う散乱機構とは、フォノン、スピンゆらぎ、不純物などであるが、これらの寄与はみな $T=0$ に向かって減少していくと考えられ、これは多くの強磁性体で実際に確かめられている。

ところが金属である $R_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ ($R=\text{Nd, Sm, Gd}$) でみられているのは、 $T=0$ に向けて R_s が成長していき、有限の値にとどまるということであり [2, 3]、これは異常ホール効果の従来の理論の限界を示している。

2 カイラリティによる interatomic 機構と異常ホール効果

2.1 カイラリティによるホール効果 – かごめ格子の場合 –

この $R_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ の異常ホール伝導度を説明するためには、新しい散乱機構がホール効果を生み出していると考えねばならず、本論文ではカイラリティこそがこの新しい機構となりうることを主張する [4, 5]。 $R_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ はパイロクロア構造をなしており、その格子構造からくる幾何学的フラストレーションはカイラリティを生み出しうる。このカイラリティによる異常ホール効果への寄与を考えるため、ここでは2重交換相互作用の模型

$$H = \sum_{\text{n.n.}} t_{ij} \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{j\sigma} - J_H \sum_{i,\alpha,\beta} \psi_{i\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{S}_i \psi_{i\beta}, \quad (1)$$

を考える。これは局在スピン $\vec{S}_i$ と伝導電子系が強い Hund 結合 J_H で結合している模型であり、マンガン酸化物の議論でよく使われている。ここでもし Hund 結合 J_H が非常に強く、また局在

¹ E-mail: murakami@appi.t.u-tokyo.ac.jp

スピンの古典的であると近似すれば、伝導電子のスピンはホッピングの際、古典スピンと同じ向きに強制的に向けられてしまう。そのため伝導電子の有効的なホッピングは元の値 t から変化し

$$t_{ij}^{\text{eff.}} = te^{i(-b_i+b_j)} \left[\cos \frac{\theta_i}{2} \cos \frac{\theta_j}{2} + e^{i(-\phi_i+\phi_j)} \sin \frac{\theta_i}{2} \sin \frac{\theta_j}{2} \right] = te^{ia_{ij}} \cos \frac{\theta_{ij}}{2}, \quad (2)$$

となる。ここで θ_{ij} は $\vec{S}_i$ と $\vec{S}_j$ とのなす角、 (θ_i, ϕ_i) , (θ_j, ϕ_j) はそれぞれ $\vec{S}_i$, $\vec{S}_j$ の極表示である。である。このようにホッピングの振幅が減少すると同時に位相 a_{ij} が付く。あるプラケットを電子が1周したときに得るこの位相 a_{ij} の総和は仮想的な磁束とみなせて、これがゼロでなければ、電子の運動に Aharonov-Bohm 効果をもたらすことになる。3 角形のプラケットの場合、この位相の総和は3つの局在スピンの張る立体角の半分になるため、カイラリティを持つようなスピン構造が実現している場合はこの位相が nonzero になる。即ちカイラリティが仮想的な磁場として電子の運動に影響を及ぼす。逆に coplanar なスピン構造ではこの位相はゼロになる。

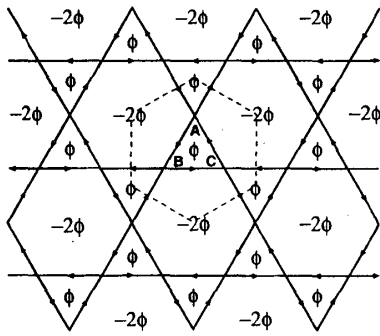


図1: かごめ格子。点線は Wigner-Seitz 単位胞を示し、A,B,C の3つのサイトを含む。ボンド上の矢印はホッピング t_{ij} の位相を示す。

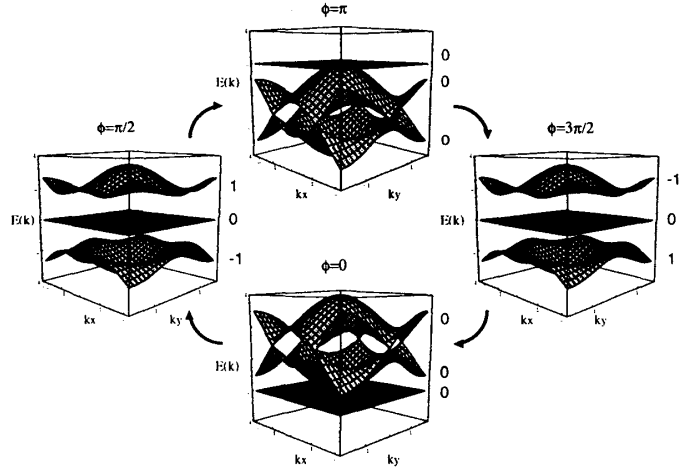


図2: 磁束 ϕ の変化による各バンドの Chern number(各図右側に示す) の変化

この位相によるホール伝導度を、相互作用のない tight-binding の電子系について計算をしてみよう。簡単のため、3次元のパイクロア格子の代わりに2次元のかごめ格子を例にとりて、上図1のようなカイラリティがある場合を考えよう。これは単位胞内の3サイト A,B,C でスピンのそれぞれ異なる方向を向いている時に実現される。ハミルトニアンを $H = \sum_{n,n.} t_{ij}^{\text{eff.}} \psi_i^\dagger \psi_j$ と表すと、 $t_{ij}^{\text{eff.}}$ は(2)で与えられ、各3角形のプラケットを貫く仮想的磁束 ϕ は $e^{i\phi} = e^{i(a_{AB}+a_{BC}+a_{CA})}$ を満たす。6角形のプラケットについては磁束は -2ϕ となり、単位胞全体では磁束を合計するとゼロとなる。このハミルトニアンを対角化すると3枚のバンドが出て来るが、これらの3つのバンド同士の間には $\phi \neq 0, \pi$ の場合にはギャップができて、ギャップ内にフェルミエネルギーがある場合にはバンド絶縁体となる。こうしたバンド絶縁体の場合を考えることにすると、Hall 伝導度 σ_{xy} はフェルミエネルギー以下の各バンドからの寄与の和 $\sigma_{xy} = \sum_{E_i \leq E_F} \sigma_{xy}^i$ で与えられ、 e^2/h

の整数倍に量子化される [6]。\$i\$ 番目のバンドの寄与は

$$\sigma_{xy}^i = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{BZ}} d^2k \hat{z} \cdot \nabla_{\vec{k}} \times \vec{A}_i(\vec{k}) = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\text{BZ boundary}} d\vec{k} \cdot \vec{A}_i(\vec{k}) = \frac{e^2}{h} C_i, \quad (3)$$

となる。ここで \$\vec{A}_i(\vec{k})\$ は Bloch 関数 \$|\Psi_i(\vec{k})\rangle\$ から定義されるベクトルポテンシャル \$\vec{A}_i(\vec{k}) = \langle \Psi_i(\vec{k}) | \nabla_{\vec{k}} | \Psi_i(\vec{k}) \rangle\$ である。\$C_i\$ は first Chern number と呼ばれる整数となり、かごめ格子の場合に計算すると、\$C_{\text{lower}} = -\text{sgn}(\sin \phi)\$, \$C_{\text{middle}} = 0\$, \$C_{\text{upper}} = \text{sgn}(\sin \phi)\$ となる。つまり単位胞内の全磁束がゼロの量子ホール効果が実現されていることになる [7](図 2 参照)。大雑把に述べれば、単位胞内の全磁束がたとえゼロであっても、複数のバンドがある場合はバンドによってどのブラケットを重点的に回っているかが異なるため、実質的に感じるブラケット内の磁束はゼロではなく、ホール効果が出るといえる。単一バンドの場合はそのバンドが単位胞内の全磁束 (= 0) を感じるため、ホール効果は出ないと解釈される。

なお、金属の場合には (3) でのブリルアン帯の境界での線積分が、Fermi sea の境界での線積分となり、定量的な計算は困難である。この場合にはカイラリティによるホール伝導度は、量子化はしないけれども有限に残ると予想される。

ここで述べたカイラリティによるホール効果は、ゼロ磁場下で起きていると言う意味で異常ホール効果といえるが、従来よく知られている異常ホール効果とはかなり違っている。ホール抵抗の \$\rho_{xy} = R_0 B + R_s M\$ という式から分かるように、従来知られている異常ホール効果は磁化それ自身から生じ、その寄与は磁化に比例するのに対し、本論文での異常ホール効果はカイラリティに起因するため、磁化には必ずしも比例しない。

2.2 \$R_2\text{Mo}_2\text{O}_7\$ の実験結果との比較

\$R_2\text{Mo}_2\text{O}_7\$ については実験的にスピン構造がまだ分かっておらず、また金属であるため、上記のかごめ格子のような計算は現状では困難である。ただし上述のように、\$R_s\$ がカイラリティによって起きているとすれば、\$R_s\$ はカイラリティの変化を通じて磁場 \$B\$ に依存するはずであり、実際 \$R_2\text{Mo}_2\text{O}_7\$ の場合、\$R_0\$, \$R_s\$ が \$B\$ によらないと仮定すると実験結果とはうまく合わない。実験結果から \$\rho_{xy} = R_0 B + R_s M\$ の第 1 項・第 2 項を分離して正常項・異常項を評価するためには、中性子散乱によるスピン構造解析やホール抵抗 \$\rho_{xy}\$, 磁化 \$M\$ の詳細な測定などの今後の実験が待たれる。

2.3 interatomic 機構

ここまで述べてきた異常ホール効果の新しい機構では、カイラリティによって仮想的な磁場をつくるというものである。この磁場は数十ないし数百テスラにも相当し、異常ホール効果に大きな寄与を与える。こうした仮想的磁場をつくる機構として、カイラリティの他に原子間のスピン軌道相互作用もありうる。即ちスピン軌道相互作用は \$H_{SO} = \frac{e\hbar}{2m^2c^2} (\vec{s} \times \nabla V) \cdot \vec{p} = (e/mc) \vec{A}_{SO} \cdot \vec{p}\$ と表され (\$V\$ は周期ポテンシャル)、強磁性状態ではベクトルポテンシャル \$A_{SO} = (\hbar/mc)(\vec{s} \times \nabla V)\$ が非一様な仮想的磁場 \$\vec{B}_{SO} = \nabla \times \vec{A}_{SO}\$ を生じる。

これらの機構(カイラリティ・原子間スピン軌道相互作用)によって生じる磁場は、単位胞内で平均するとゼロであるという特徴がある。ここでの単位胞とはスピン構造についての磁氣的単位胞であり、これはスピンが超周期構造を形成している場合には通常の単位胞よりも大きくなる。例えば、正方格子などの単位胞に1つしか格子点がない格子構造では、バンドは1枚になりカイラリティによる異常ホール効果は出ないが、スピン構造が自発的に超周期構造をつくることによって単位胞を拡大すれば、マルチバンドになり異常ホール効果を出す可能性がでてくる。これに対して、パイロクロアやかごめ格子などの幾何学的フラストレーションのある格子構造では、単位胞に複数のプラケットがあって最初からマルチバンドであるため、カイラリティにより異常ホール効果を生み出しやすい。

これらの機構は原子間のホッピングによって生じる位相によるものであり、interatomic mechanism とでも呼べるものである。他方従来の理論は同一原子内でのスピン軌道相互作用が重要な役割を演じる点で intraatomic mechanism と呼ぶことができ、 $T = 0$ に注目することにより、interatomic mechanism の寄与のみ取り出して解析できるということになる。

3 まとめ

こうして見て来たように、カイラリティもしくは原子間のスピン軌道相互作用により電子系には仮想的な交番磁場が働き、それが異常ホール効果をもたらす。これは $R_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ でみられる、低温で増大する異常ホール効果を説明しうると考えられる。

謝辞

本研究は文部省・特定領域研究および COE 形成基礎研究費からの補助を受けています。

参考文献

- [1] C. M. Hurd, *The Hall Effect in Metals and Alloys* (Plenum Press, New York, 1972).
- [2] Y. Taguchi and Y. Tokura, Phys. Rev. **B60** (1999), 10280.
- [3] T. Katsufuji, H. Y. Hwang, and S.-W. Cheong, Phys. Rev. Lett. **84** (2000), 1998.
- [4] K. Ohgushi, S. Murakami and N. Nagaosa, Phys. Rev. **B62** No.9 (2000), in press
- [5] Jinwu Ye *et al.*, Phys. Rev. Lett. **83** (1999), 3737.
- [6] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49** (1982), 405; M. Kohmoto, Ann. Phys. (N.Y.) **160** (1985), 343.
- [7] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61** (1988), 2015.