

固体の量子伝導の理解に向けて

東北大学大学院理学研究科 大串 研也

1 はじめに

輸送現象は、固体物性の華である。超伝導体におけるゼロ抵抗や量子 Hall 系における量子化した Hall 係数ほど、人を魅了する物理現象も少ないのではないかと思う。一方で、輸送現象は、とても解釈の難しい現象でもある。それは何故だろうか？輸送現象とは、準粒子が外場に駆動され電気や熱を運ぶ現象であり、一般にその過程においてエネルギーの散逸がある。そのため、非平衡系を扱う必要があり、ここに難しさの一因がある。実は、超伝導体と量子 Hall 系の輸送現象はその例外であり、それぞれゲージ対称性の破れとトポロジカル秩序が生じているため、非散逸性の反磁性電流を考慮すれば良い。このため、(一見すると難しくも感じられるが)、場の理論の範疇で論理的に輸送現象を理解することができる。しかしながら、超伝導体や量子 Hall 系などの例外を除いた多くの物質群では、エネルギーの散逸に正面から向き合う必要がある。

輸送現象をいくつかの観点から分類してみよう。

1. 外場：電場・磁場・熱勾配・化学ポテンシャル勾配
2. 流れ：電流・熱流・質量流
3. 準粒子：電荷・フォノン・マグノン
4. 散乱機構：不純物・フォノン・マグノン・電子間相互作用

これらの項目の組み合わせとして、固体の輸送現象には様々なパターンがある。ここにも難しさの一因がある。例えば、電気伝導率は電荷の流れ易さに相当するが、電荷の散乱機構には不純物・格子欠陥・フォノン・磁気揺らぎなど様々な可能性がある。従って、データの解釈にあたっては、どの機構が主要なのかを見極める必要がある。また、熱伝導率は電荷・フォノン・マグノンの流れ易さに相当するが、一般に電荷・フォノン・マグノンの寄与は異なる温度変化を示す。従って、系の特徴的なエネルギースケールを知ったうえで、着目している温度領域において、どの寄与が主要であるかを熟慮する必要がある。さらに、電場と温度勾配の比例係数である Seebeck 係数においては、電流と熱流が交差している現象であるため、より一層、状況が複雑となっている。このように輸送現象は多種多様なものであり、自分が何を観測しているのかについて十分な認識が必要となる。

輸送現象は難しいと言ってきたが、測定の観点から言えば比較的容易な側面もある。絶縁体の電気抵抗はテスターを当ててやればあっという間に測定することができし、金属の電気抵抗も四端子法で比較的簡単に測定できる。実際、電気抵抗計測は合成した物質をキャラクタライズする常套手段である。本稿には、こうした状況を踏まえた上で、輸送現象のデータを解析したり解釈したりする際に、心に留めておくことを記してみたい。

固体における輸送現象としては、近藤効果や磁気秩序近傍の量子臨界現象が有名であり、これらの多体効果に起因する輸送現象に興味を持っている方も多いと思う。また、熱流の関与した輸送現象は、熱電変換への応用という観点からも興味深い。しかしながら、本稿ではあえてこうした現象に触れず、疑似的に一体問題として扱える比較的単純な電気伝導を取り上げることにした。具体的には、Pauli 常磁性体の電気抵抗、強磁性体の異常 Hall 効果という二つの地味なトピックスである。これらの具体的な問題を通して、輸送現象の考え方の基本を身に付け、研究の現場で応用して頂きたい。

物理の理解にあたっては数式に基づくことが重要であると考えため、本稿ではあえて理論的な側面に踏み込んだ。筆者が勉強するときに、書籍や論文に一足飛びに記されている数式に躓いた経験を踏まえて、計算の詳細を自力で追えるように、丁寧に記述したつもりである。しかしながら、記号の定義を省略した部分も多いし、なにより色々と間違いがあると思う。読者の方には、文献 [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9] にあたりながら自分で適宜補って頂けたら幸いである。

2 金属の電気抵抗

Pauli 常磁性を示す金属の電気抵抗を考えよう。磁気秩序への不安定性はないものとし、電子間相互作用は無視できるものとする。具体的な物質としては、例えば単体の K や Cu が該当する。

2.1 Drude 理論

電気抵抗を求める最も簡単な理論は、Drude 理論である。これは完全な古典論である。Drude 理論は、等方的な空間にある自由電子を対象としており、電子は古典的な運動方程式 $\frac{dp_x}{dt} = -\frac{p_x}{\tau} - eE_x$ に従うものとする。ここで、緩和時間 τ の間に電子が散乱されるとしているのが緩和時間近似であり、これにより有限の電気抵抗が生じる。注意したいのは、電子の散乱機構の詳細には触れていない点であり、現象論的に散乱の効果が取り込まれている。電流に関して、 $j_x = -nev_x = \frac{ne^2\tau}{m} E_x$ であることから、電気伝導度は、 $\sigma_{xx} = \frac{ne^2\tau}{m}$ と求まる。Drude 理論は、本来は量子力学に従う電子を古典的に扱っている点に根本的な問題があり、実際、バンド絶縁体の存在を説明できない。

2.2 輸送現象の半古典的な理論

電子の運動を量子力学的に正確に扱うためには、Schrödinger 方程式を解けばよい。電子は結晶中の周期ポテンシャル $U(\vec{r})$ と外場 $\vec{E} = -\text{grad}V(\vec{r})$, $\vec{H} = \text{rot}\vec{A}$ の影響を受けているとして、Hamiltonian は、

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - eV(\vec{r}) - eU(\vec{r}) \quad (1)$$

である。ここで、簡単のために、周期ポテンシャルは量子力学的に扱うものの、外場を古典力学の範疇で扱うことにする。これを、半古典近似と呼ぶ。半古典近似の最初のステップは、外場を無視して、周期ポテンシャル中の電子に対する Schrödinger 方程式を解くことである。これにより、Bloch の定理 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$, $(u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}))$ を満たす波動関数が求められる。固有値は波数の関数であり、これによりエネルギーバンドが形成される。電子の速度は、

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{k}} \quad (2)$$

で表される。

半古典近似の次のステップは、外場に対する電子の運動を古典的に扱うことである。この際、単一の波数における波動関数を扱わず、波数 $\vec{k}_c$ 近傍で波動関数を重ね合わせて波束を作る (図 1)。中心位置 $\vec{r}_c$ 、中心波数 $\vec{k}_c$ の波束は、

$$W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} w_{\vec{k}-\vec{k}_c} \exp \left(-ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c - i\vec{k} \cdot \vec{r}_c \right) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3)$$

で定義される。ここで、 $w_{\vec{k}-\vec{k}_c}$ は、 $|\vec{k} - \vec{k}_c| > \Delta k$ の領域で $w_{\vec{k}-\vec{k}_c} \sim 0$ となる複素数の値である。このように波数空間において分布を持たせることで、Heisenberg の不確定性関係 $\delta k \delta r \sim \hbar$ に抵触せずに、実空間における位置も同時に指定することができる。波束の運動は、実空間と逆格子空間の両方で同時に追跡することが許される。波束を表す波動関数には、位相項が存在する。 $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_c}$ の項は通常の Bloch 電子の位相であり、 $e^{-ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c}$ の項は外部磁場に関する Berry 位相の項である。

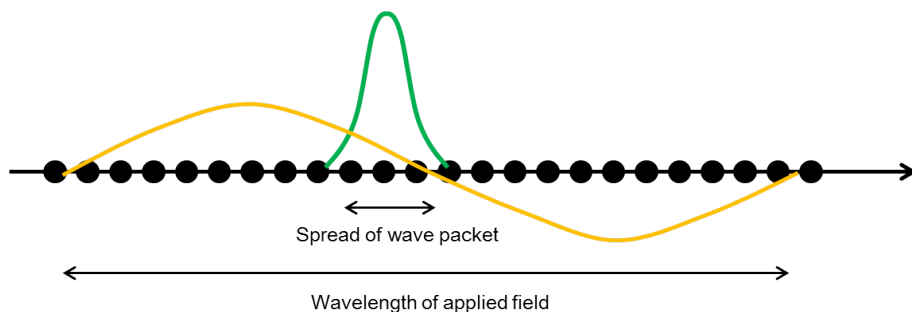


図 1: Bloch 電子の重ね合わせにより作られた波束。

さて、問題は波束の運動を記述する運動方程式であるが、自由電子に対する古典論からの類推で、

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{H} \right) \quad (4)$$

と書けると考える。この半古典的な運動方程式は、多数の初等的な固体物理の教科書に記されているが、実はその基礎づけは簡単ではなく触れられていないことが多い。例えば、Ashcroft and Mermin の *Solid State Physics* には、To find a really compelling set of arguments, however, it is necessary to delve rather deeply into the literature on the subject. と書かれている。その正確な導出は、よりモダンな専門書 [8] に記されており、本稿で後に紹介する。半古典的な取扱い、外場の波長が格子定数に比べて十分に長い場合、また電場や磁場がバンドの形状を変化させるほど大きくない場合に妥当となる。後者の条件が崩れた系として、例えば量子 Hall 系が存在する。

2.3 Boltzmann 方程式

半古典的な運動方程式で電子の運動が記述できるのなら、直ちに輸送現象が理解できるような気がする。しかし、電気抵抗のような散逸に関わる輸送現象においては、電子の散乱の効果を適切に取り込む必要がある。それを可能にするのが、Boltzmann 方程式である。その導出をおさらいしよう。本稿では電流の関与する輸送現象しか考えないが、ここでは熱流の関与する輸送現象に対しても応用できる一般的な形で扱う。

図2のような $\vec{r}, \vec{k}$ で張られる 6 次元の位相空間における、波束の分布関数 $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ を考察する。分布関数 $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ は、外場のない局所平衡状態において、Fermi-Dirac 分布関数 $f(\vec{r}, \vec{k}) = 1 / \left(e^{(\varepsilon(\vec{k}) - \mu(\vec{r})) / (k_B T(\vec{r}))} + 1 \right)$ で表すことができるものとする。粒子間に衝突の無い場合、Liouville の定理により、流れに沿って体積要素を追跡すると分布関数は保存される。式で表すと、 $f(\vec{r} + d\vec{r}, \vec{k} + d\vec{k}, t + dt) - f(\vec{r}, \vec{k}, t) = 0$ である。粒子間に衝突がある場合に拡張するためには、衝突による分布関数の変化を表す衝突項を導入すれば良い。式で表すと、

$$f(\vec{r} + d\vec{r}, \vec{k} + d\vec{k}, t + dt) - f(\vec{r}, \vec{k}, t) = dt \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (5)$$

である。これから得られる、

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) + \frac{d\vec{r}}{dt} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \nabla_{\vec{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (6)$$

が Boltzmann 方程式である。左辺の第一項である分布関数の時間変化が、その他の三つの項の足し合わせで表されると理解すれば良い。Boltzmann 方程式における左辺の第二項は拡散項と呼ばれ、

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{diff} = \frac{d\vec{r}}{dt} \cdot \nabla_{\vec{r}} f \quad (7)$$

$$= \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f \quad (8)$$

$$= \vec{v}(\vec{k}) \cdot \left(\nabla_{\vec{r}} T \frac{\partial f}{\partial T} + \nabla_{\vec{r}} \mu \frac{\partial f}{\partial \mu} \right)$$

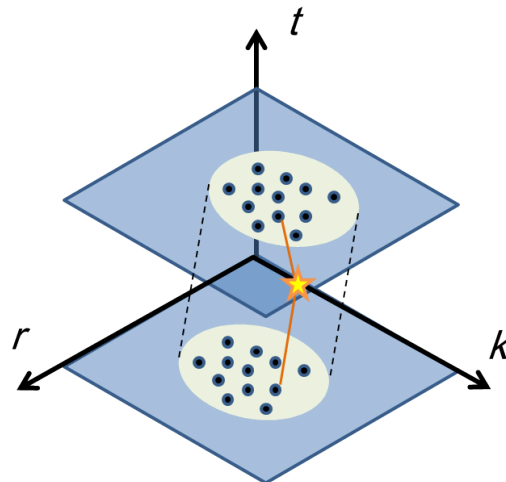


図 2: 位相空間における電子の分布関数の時間発展。

$$= -\vec{v}(\vec{k}) \cdot \left(\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu(\vec{r})}{T} \nabla_{\vec{r}} T(\vec{r}) + \nabla_{\vec{r}} \mu(\vec{r}) \right) \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \varepsilon(\vec{k})} \quad (9)$$

である。波束が速度を持っていて、時々刻々その位置を変化させることに対応している。Boltzmann 方程式における左辺の第三項はドリフト項と呼ばれ、

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{drift}} = \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \nabla_{\vec{k}} f \quad (10)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{e}{\hbar} \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{H} \right) \cdot \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \varepsilon(\vec{k})} \\ &= -e \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{H} \right) \cdot \vec{v}(\vec{k}) \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \varepsilon(\vec{k})} \end{aligned} \quad (11)$$

である。波束が運動方程式に従い、時間発展する様を表している。Boltzmann 方程式における右辺は衝突項であり、粒子が他物体と衝突することによる分布関数の変化を意味している。ここでは、2体の衝突のみを考えると、衝突項は、状態 $\vec{k}$ から状態 $\vec{k}'$ への散乱確率 $W(\vec{k}, \vec{k}')$ を用いて、

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \sum_{\vec{k}} \left(W(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}') (1 - f(\vec{r}, \vec{k})) - W(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{r}, \vec{k}) (1 - f(\vec{r}, \vec{k}')) \right) \quad (12)$$

と書ける。この式は、分布関数 $f(\vec{r}, \vec{k})$ に関して非線形である点に注意されたい。線形化するために、大胆な仮定として緩和時間近似、 $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = -\frac{f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0}{\tau(\vec{k})}$ を採用することが多い。この式を Boltzmann 方程式に代入し拡散項とドリフト項を無視して分布関数を解くと、 $f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0 = (f(\vec{r}, \vec{k}, 0) - f_0) e^{-t/\tau(\vec{k})}$ となることから、系が非平衡状態にあるときに、分布関数は平衡状態に指数関数的に緩和するという近似に相当していることが分かる。

ここまで、電流と熱流を同時に扱うことのできる一般的な形で議論を進めてきたが、本稿で議論する電気伝導に焦点を絞り、分布関数の具体的な表式を求めよう。Boltzmann 方程式に、定常状態の条件 $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) = 0$ 、実空間において一様であるとする条件 $\nabla_{\vec{r}} f = 0$ ($\nabla_{\vec{r}} \mu = \nabla_{\vec{r}} T = 0$)、運動方程式 $\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar} \vec{E}$ 、緩和時間近似の式 $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = -\frac{f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0}{\tau(\vec{k})}$ を代入すると、

$$-\frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial \varepsilon(\vec{k})} = -\frac{f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0}{\tau(\vec{k})} \quad (13)$$

が得られる。これを解くと、

$$f(\vec{k}) = f_0 + e\tau(\vec{k}) \vec{E} \cdot \vec{v} \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial \varepsilon(\vec{k})} \quad (14)$$

が得られる。 f_0 は電場を印加していない平衡状態における分布関数であり、電場印加により分布関数は $\vec{k}$ 空間で電場印加方向にシフトしていることが分かる。電流は、 $j_i = -e \sum_{\vec{k}} v_i f(\vec{k}) = e^2 \sum_{\vec{k}} \tau(\vec{k}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) v_i v_j E_j$ と表されることから、電気伝導度は、

$$\sigma_{ij} = e^2 \sum_{\vec{k}} \tau(\vec{k}) \delta(\varepsilon - \varepsilon(\vec{k})) v_i(\vec{k}) v_j(\vec{k}) \quad (15)$$

となる。電気伝導度は、速度と緩和時間に依存していることが分かる。この式の物理的意味を考えるために、ごく簡単な例を調べてみよう。等方的な電子構造を有しており、Bloch 電子のエネルギーが、 $\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ と書けるのであれば、上式から Drude の式 $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \frac{ne^2\tau}{m}$ が再現される。一方で、 k_x 方向に大きなバンド分散を有する一次元的な電子構造を有していれば、 $v_x > v_y, v_z$ であるため、 $\sigma_{xx} > \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$ となることも分かる。

電気抵抗を理解する上で、速度の部分はバンド分散そのもののものだから比較的容易に理解できる一方で、緩和時間の微視的な起源が問題となることが多い。固体の中には、不純物・格子欠陥・フォノン・磁気揺らぎ・電子間相互作用などの様々な散乱機構があり、これらのうちどの寄与が支配的であるのかを見極めることが電気伝導を理解する上での鍵である。次節では、様々な散乱機構の中から、不純物散乱について少し詳しく紹介する。

Boltzmann 方程式に基づいた電気伝導度の表式は、異方的な Fermi 流体の電気抵抗を理解する上での基礎となっており、実際、銅酸化物高温超伝導のノーマル相における電気抵抗や Hall 係数を議論する際の礎となっている [10]。電気伝導度は速度と緩和時間に依存しており、これらは準粒子の自己エネルギーの実部と虚部に関連した物理量である。従って、光電子分光実験から電気抵抗を理解するというような野心的な試みも可能であり、実際、銅酸化物超伝導でそのような研究が進んでいる [11]。

2.4 不純物による散乱

2.4.1 不純物ポテンシャル

単一種類の不純物が存在する場合の電気抵抗を考察する [4, 5]。不純物間の距離は十分に離れており、それぞれが独立に振る舞うと仮定する。このとき、散乱確率は個々の不純物による散乱確率に不純物濃度 n_i をかけたものになる。従って、しばらくは単一の不純物による散乱を議論する。不純物は十分に重いため動くことはないものとし、また励起状態に遷移することもないものとする。このとき、電子の散乱は弾性的であり、 $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$ である。個々の不純物ポテンシャル $V(\vec{r})$ は、球対称であるものとする。例えば、クーロン・湯川型・剛体球ポテンシャルを考えている。また、前節では Bloch 電子を扱ったが、ここでは結晶格子に起因する周期ポテンシャルの影響は無視できるものとする。つまり、電子は散乱体から遠い位置においては、等方的な空間における自由電子として振る舞うことになる。

2.4.2 散乱理論

本節では、後の計算に必要な散乱理論を要約する [12]。量子力学の散乱理論によると、図 3 に表すような単一の不純物が存在する系の波動関数は、

$$\psi^+(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vec{k}', \vec{k}) \quad (16)$$

と書ける。右辺第一項は入射波を、右辺第二項は散乱体から外向きに伝播する球面波を意味している。散乱振幅は、

$$T = V + V \frac{1}{E - \vec{p}^2/(2m) + i\epsilon} T \quad (17)$$

で定義される T 行列を使って、

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle \quad (18)$$

と表すことができる¹。 T 行列は、

$$\begin{aligned} T = & V + V \frac{1}{E - \vec{p}^2/(2m) + i\epsilon} V + V \frac{1}{E - \vec{p}^2/(2m) + i\epsilon} V \frac{1}{E - \vec{p}^2/(2m) + i\epsilon} V \\ & + V \frac{1}{E - \vec{p}^2/(2m) + i\epsilon} V \frac{1}{E - \vec{p}^2/(2m) + i\epsilon} V \frac{1}{E - \vec{p}^2/(2m) + i\epsilon} V + \dots \end{aligned} \quad (19)$$

と展開することができ、右辺の第一項を使って散乱確率を求める近似を Born 近似と呼ぶ。このような近似手法に頼ることもできるが、不純物ポテンシャルが球対称の場合には、部分波展開を用いて一般的な議論を進める方が見通しが良い。散乱振幅は、

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (20)$$

と、Legendre 関数 P_l を用いて展開できる。散乱振幅は $\vec{k}$ と $\vec{k}'$ のなす角 θ に依存するが、球対称ポテンシャルを仮定しているので角度 ϕ には依存しない。 δ_l は位相のずれであり、散乱ポテンシャルの詳細に依存する。例えば、 $V(r) = \infty$ ($r < R$)、

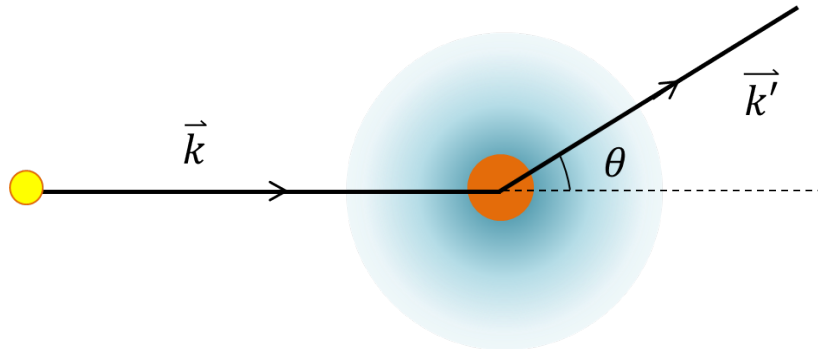


図 3: 自由電子の不純物による散乱.

¹散乱振幅 $f(\vec{k}', \vec{k})$ は、微分断面積と $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k}', \vec{k})|^2$ なる関係がある。

$V(r) = 0$ ($r > R$) なる剛体球ポテンシャルを考えると、 $\tan \delta_l = j_l(kR)/n_l(kR)$ (j_l は Bessel 関数、 n_l は Neumann 関数) である。散乱確率は Fermi の黄金律により、

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}) \quad (21)$$

である。 $W(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k}', \vec{k})$ の関係があることが分かる。

2.4.3 Boltzmann 方程式の衝突項

弾性散乱の場合、 $W(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k}', \vec{k})$ の関係が成立することから、Boltzmann 方程式の衝突項は、

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}', \vec{k}) \left(f(\vec{k}') - f(\vec{k}) \right) \quad (22)$$

と簡単に書くことができる。緩和時間近似が成立するとして（これは実際に理論が自己矛盾なく閉じることから正しいことが分かる）、Boltzmann 方程式から導かれる分布関数 $f(\vec{k}) = f_0 + \frac{e\hbar}{m} \tau(\vec{k}) \vec{E} \cdot \vec{k} \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial \varepsilon(\vec{k})}$ を代入すると、

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} &= \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}', \vec{k}) \frac{e\hbar}{m} \left(\tau(\vec{k}') \vec{E} \cdot \vec{k}' \frac{\partial f(\vec{k}')}{\partial \varepsilon(\vec{k}')} - \tau(\vec{k}) \vec{E} \cdot \vec{k} \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial \varepsilon(\vec{k})} \right) \\ &\simeq \frac{e\hbar}{m} \tau(\vec{k}) \vec{E} \cdot \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}', \vec{k}) (\vec{k}' - \vec{k}) \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial \varepsilon(\vec{k})} \end{aligned} \quad (23)$$

である。衝突項は、

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = -\frac{f(\vec{k}) - f_0}{\tau(\vec{k})} = -\frac{1}{\tau(\vec{k})} \frac{e\hbar}{m} \tau(\vec{k}) \vec{E} \cdot \vec{k} \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial \varepsilon(\vec{k})} \quad (24)$$

とも書けることから、両式を比較することで、

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} \vec{k} = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}', \vec{k}) (\vec{k} - \vec{k}') \quad (25)$$

である。 $\vec{k}$ と内積をとることで、

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}', \vec{k}) (1 - \cos \theta) \quad (26)$$

を得る。電気抵抗における緩和時間の特徴は、通常の散乱確率 $W(\vec{k}', \vec{k})$ に $(1 - \cos \theta)$ の重みがかかっている点にある。電気抵抗には、 $\theta \sim \pi$ の後方散乱が大きな寄与をし、 $\theta \sim 0$ の前方散乱が小さな寄与することを意味している。こうした重みがついていることにより、光電子分光スペクトルから求めた準粒子の寿命を、そのままの形で電気抵抗の計算に用いることができない [11]。

2.4.4 緩和時間

ここまでで、電気抵抗を計算する準備が整った。いよいよ、 $W(\vec{k}', \vec{k})$ へ部分波展開した散乱ポテンシャルの具体的な表式を代入して、緩和時間を計算しよう。本稿での取り扱いは、Mahan の教科書 [5] に依っている。

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau(\vec{k})} &= \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}', \vec{k}) (1 - \cos \theta) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}'} |\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}) (1 - \cos \theta) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \sum_{\vec{k}'} |f(\vec{k}', \vec{k})|^2 \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}) (1 - \cos \theta) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \sum_{\vec{k}'} \left| \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \right|^2 \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}) (1 - \cos \theta) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk' \frac{k'^2}{k^2} \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}) \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \right|^2 (1 - \cos \theta) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \frac{1}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^\infty d\varepsilon_{k'} \left(\frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{2m\varepsilon_{k'}/\hbar^2}} \right) \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}) \int_0^\pi d\theta \sin\theta \left| \sum_{l=0} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \right|^2 (1 - \cos\theta) \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \frac{1}{(2\pi)^3} 2\pi \frac{m}{\hbar^2 k_F} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \left| \sum_{l=0} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \right|^2 \\
&= \frac{2\pi\hbar}{mk_F} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \left| \sum_{l=0} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \right|^2 (1 - \cos\theta) \\
&= \frac{2\pi\hbar}{mk_F} \int_{-1}^1 dx \sum_{l=0, l'=0} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} P_l(x) P_{l'}(x) (1-x) \\
&= \frac{2\pi\hbar}{mk_F} \left(\sum_{l=0, l'=0} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} \frac{2}{2l+1} \delta_{l, l'} \right. \\
&\quad \left. - \int_{-1}^1 dx \sum_{l=0, l'=0} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} x P_l(x) P_{l'}(x) \right) \\
&= \frac{2\pi\hbar}{mk_F} \left(\sum_{l=0} 2(2l+1) \sin^2\delta_l - \int_{-1}^1 dx \sum_{l=0, l'=0} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} \frac{1}{2l+1} ((l+1)P_{l+1}(x) + lP_{l-1}(x)) P_{l'}(x) \right) \\
&= \frac{2\pi\hbar}{mk_F} \left(\sum_{l=0} 2(2l+1) \sin^2\delta_l - \int_{-1}^1 dx \sum_{l=0, l'=0} (2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} \left((l+1) \frac{2}{2l'+1} \delta_{l+1, l'} + l \frac{2}{2l'+1} \delta_{l-1, l'} \right) \right) \\
&= \frac{2\pi\hbar}{mk_F} \left(\sum_{l=0} 2(2l+1) \sin^2\delta_l - \sum_{l=0} \left(e^{i(\delta_l - \delta_{l+1})} \sin\delta_l \sin\delta_{l+1} 2(l+1) + e^{i(\delta_l - \delta_{l-1})} \sin\delta_l \sin\delta_{l-1} 2l \right) \right) \\
&= \frac{2\pi\hbar}{mk_F} \left(\sum_{l=0} 2(2l+1) \sin^2\delta_l - \sum_{l=0} 2(l+1) \left(e^{i(\delta_l - \delta_{l+1})} + e^{-i(\delta_l - \delta_{l+1})} \right) \sin\delta_l \sin\delta_{l+1} \right) \\
&= \frac{4\pi\hbar}{mk_F} \left(\sum_{l=0} (2l+1) \sin^2\delta_l - \sum_{l=0} 2(l+1) (\sin\delta_l \cos\delta_l \sin\delta_{l+1} \cos\delta_{l+1} + \sin^2\delta_l \sin^2\delta_{l+1}) \right) \\
&= \frac{4\pi\hbar}{mk_F} \sum_{l=0} ((l+1) \sin^2\delta_l + l \sin^2\delta_l - (l+1)(2 \sin\delta_l \cos\delta_l \sin\delta_{l+1} \cos\delta_{l+1} + (1 - \cos^2\delta_l) \sin^2\delta_{l+1} + \sin^2\delta_l (1 - \cos^2\delta_{l+1}))) \\
&= \frac{4\pi\hbar}{mk_F} \sum_{l=0} (l \sin^2\delta_l - (l+1)(2 \sin\delta_l \cos\delta_l \sin\delta_{l+1} \cos\delta_{l+1} - \cos^2\delta_l \sin^2\delta_{l+1} - \sin^2\delta_l \cos^2\delta_{l+1}) - (l+1) \sin^2\delta_{l+1}) \\
&= \frac{4\pi\hbar}{mk_F} \sum_{l=0} (l \sin^2\delta_l - (l+1) \sin^2\delta_{l+1} + (l+1) \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1})) \\
&= \frac{4\pi\hbar}{mk_F} \sum_{l=0} (l+1) \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1}) \tag{27}
\end{aligned}$$

ここで、Legendre 関数に関する積分公式 $\int_{-1}^1 dx P_l(x) P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1} \delta_{l, l'}$ と、漸化式 $x P_l(x) = \frac{1}{2l+1} ((l+1) P_{l+1}(x) + l P_{l-1}(x))$ を使った。

2.4.5 不純物の電気抵抗

前節まで単一の不純物を扱ってきたが、固体における電気抵抗扱うために不純物濃度 n_i を掛け合わせると、

$$\frac{1}{\tau} = \frac{4\pi\hbar n_i}{mk_F} \sum_{l=0} (l+1) \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1}) \sim \frac{\hbar n_i}{mk_F} \tag{28}$$

である。第2式から第3式への変換では、位相のずれは、不純物ポテンシャルの詳細に依存しているものの、 $O(1)$ の量を与えることを使った。この値を、 $\rho \sim \frac{m}{ne^2\tau}$ に代入したものが、求めたかった不純物由来の電気抵抗である。不純物散乱による緩和時間は温度に依存しないため、従って $T = 0$ K の残留抵抗に不純物散乱からの寄与が顕著に観測される。

最後に、Kondo 効果に言及しておこう。本稿では非磁性不純物による散乱を議論してきたが、それを拡張して磁性不純物による散乱を考察するのは自然な発想であろう。研究の当初は、本節で紹介したような散乱理論に基づき理論が構築され、その結果、Born 近似を超えた摂動項が重要であることが判明した [13]。磁性不純物は、低温で $\frac{1}{\tau} \propto \ln T$ の寄与を与える。これが Kondo 効果であり、その発見はその後の重い電子系研究の出発点の一つとなっている。また、Kondo は、同様の枠組みで異常 Hall 効果の研究にも取り組んでいることも付記しよう [14]。

2.5 フォノンによる散乱

前節では、不純物による散乱を扱ったが、もう一つの散乱機構の例として、フォノンによる散乱を議論したい。本稿では、雰囲気 sketches をすることにするので、詳細は文献 [2, 6, 7] にあたってほしい。

フォノンには、Brillouin ゾーンの Γ 点から線形で立ち上がる音響フォノンと、分散の小さい光学フォノンがあり、それぞれが電気抵抗に寄与する。音響フォノンは、結晶格子の歪みを引き起こし、変形ポテンシャル散乱を引き起こす。超伝導の BCS 理論で引力の起源となったのも、音響フォノンである。一方で、光学フォノンは一般に分極を伴っており、極性散乱を引き起こす。分極と電荷を有する電子との結合は強いため、光学フォノンによる極性散乱が電気抵抗の主要な要因となりそうなおところである。しかし、光学フォノンの数は、 $\exp(-\omega/T)$ (フォノン周波数 ω は、100 – 1000 K のオーダー) に比例していることから、我々が興味を持っている低温 (< 100 K) では主要な寄与とはならない。従って、以下では音響フォノンを考察することにする²。

音響フォノンのうち縦波のコンポーネントが、電子と結合している。ウムクラップ散乱 (Brillouin ゾーンを跨いだ散乱) を無視した場合の電子格子相互作用のハミルトニアンは、

$$H_{e-ph} = \sum_{\vec{q}, \vec{k}} M_{\vec{q}, \vec{k}} c_{\vec{q}+\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} (a_{\vec{q}} + a_{\vec{q}}^\dagger) \quad (29)$$

である。ここで、 $c_{\vec{k}}^\dagger$, $c_{\vec{k}}$ は電子の生成、消滅演算子であり、 $a_{\vec{k}}^\dagger$, $a_{\vec{k}}$ はフォノンの生成、消滅演算子である。結合定数は、 $M_{\vec{q}, \vec{k}} = -i\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_q}}(\vec{q})V_{ei}(\vec{q})$ である。この Hamiltonian は、フォノンの吸収と放出を記述しており、この過程により電子は有限の寿命を持つことになる。散乱確率は、Fermi の黄金律により計算することができる。

電気抵抗に寄与する散乱過程は図 4 に表したようなものである。その和として、Boltzmann 方程式の衝突項は、

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} &= \sum_q \left((W_{k+q \rightarrow k}^{e,q} - W_{k \rightarrow k+q}^{a,q}) - (W_{k \rightarrow k+q}^{e,-q} - W_{k+q \rightarrow k}^{a,-q}) \right) \\ &= \sum_q W_q^0 ((1-f(k))f(k+q)(g(q)+1)\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q} + \hbar\omega_q)) \\ &\quad - \sum_q W_q^0 ((1-f(k+q))f(k)g(q)\delta(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - \hbar\omega_q)) \\ &\quad + \sum_q W_q^0 ((1-f(k))f(k+q)g(-q)\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q} - \hbar\omega_q)) \\ &\quad - \sum_q W_q^0 ((1-f(k+q))f(k)(g(-q)+1)\delta(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k + \hbar\omega_q)) \end{aligned} \quad (30)$$

のように書ける。ここで、 $W_{k+q \rightarrow k}^{e,q}$ と $W_{k \rightarrow k+q}^{e,-q}$ の項はフォノンの放出過程を、 $W_{k \rightarrow k+q}^{a,q}$ と $W_{k+q \rightarrow k}^{a,-q}$ で表される項はフォノンの吸収過程を記述している。また、フォノンの分布関数 g は Bose-Einstein 分布で表される。以下、複雑な計算を行

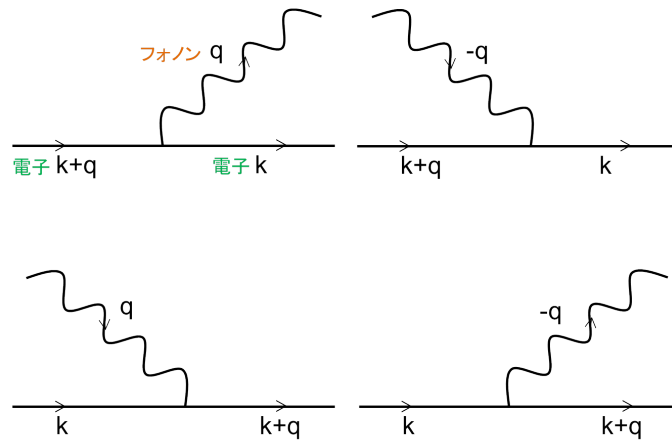


図 4: 電子格子相互作用の電気抵抗に寄与する過程。

²電子格子相互作用から、 $1/\tau \propto T^2$ の電気抵抗も生じうる。詳しくは文献 [15] の Chapter. 4 をご参照頂きたい。

散乱機構	温度依存性	
非磁性不純物	$1/\tau \propto \text{const.}$	
磁性不純物	$1/\tau \propto \ln T$	
音響フォノン	$1/\tau \propto T^5$	
光学フォノン	$1/\tau \propto \exp(-\omega/T)$	
電子間相互作用	$1/\tau \propto T^2$	
磁気揺らぎ	2次元強磁性	$1/\tau \propto T^{4/3}$
	3次元強磁性	$1/\tau \propto T^{5/3}$
	2次元反強磁性	$1/\tau \propto T$
	3次元反強磁性	$1/\tau \propto T^{3/2}$

表 1: 散乱機構と緩和時間の温度依存性.

うと緩和時間 τ を計算することができ、その結果、電気抵抗に関する Bloch-Grüneisen の式、

$$\rho = \frac{3\pi m^2 A^2}{ne^2 \rho_0 \hbar k_B \theta_D} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^5 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^5 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \quad (31)$$

が得られる。ここで、 θ_D は Debye 温度、 A は変形ポテンシャル定数である。この式を二つの極限で、評価しよう。初めに、 $T > \theta_D$ を満たす十分に温度の高い領域では、 $(e^x - 1) \sim x$ 、 $(1 - e^{-x}) \sim x$ より被積分関数が $\sim x^3$ となり、従って $\rho \propto T$ である。これは、フォノンの数が、 $\frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \sim \frac{k_B T}{\hbar \omega}$ と温度に比例していることに対応している。一方で、 $T < \theta_D$ を満たす十分に温度の低い領域では、積分範囲が $0 - \infty$ となり積分値が一定となるので、 $\rho \propto T^5$ である。これは、フォノンの数が T^3 に比例していること（フェルミ面の面積が $\propto q \times q$ でありエネルギー幅が $\hbar \omega \propto q$ であるため、散乱に寄与するフォノンの数は $\propto q^3 \sim T^3$ となる）と、前方散乱因子が $(1 - \cos \theta) \propto q^2 \propto T^2$ であることが相乗した結果である。

2.6 電気抵抗の温度変化

ここまで、不純物とフォノンによる散乱を調べてきた。この他にも様々な散乱機構があり、表 1 に示すように、電気抵抗はそれに応じた特徴的な温度変化を示すことが知られている。例えば、電子間相互作用はフェルミ液体の特徴である $1/\tau \propto T^2$ を、磁気揺らぎは 2 次元反強磁性揺らぎの場合には $1/\tau \propto T$ を [16, 17]、磁性不純物は近藤効果として $1/\tau \propto \ln T$ を与える。では、複数の散乱機構が存在する場合には、それぞれの寄与をどのように足し合わせればいいのか？その答えは、散乱過程が独立な場合には、緩和時間の逆数を足し合わせなさいというものであり、これを Matthiessen 則と呼ぶ。例えば、不純物とフォノンの二つの寄与がある場合には、

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{\text{imp}}} + \frac{1}{\tau_{\text{ph}}} \quad (32)$$

である。

電気抵抗に関する議論を締めくくるにあたり、実験で得られたデータを解析・議論する際の留意点を列挙しよう。

1. 電気抵抗の室温における値と絶対零度における値の比を、RRR (Residual Resistance Ratio) と呼ぶ。不純物と音響フォノンによる寄与を考えている限り、これは不純物濃度 n_i に反比例しているはずである。従って、同一物質で比較する限り、RRR の高い結晶ほど良質の試料だと言える。
2. 合金系として、 $\text{Cu}_{1-x}\text{Au}_x$ の残留抵抗を考えよう。このとき、 $x \sim 0$ では Cu のなかに Au が不純物として混入していると見做せ、 $x \sim 1$ では Au のなかに Cu が不純物として混入していると見做せる。こうした場合の電気抵抗は、 $\rho \propto x(1-x)$ として振る舞うことが知られ、これを Nordheim 則と呼ぶ。Nordheim 則は、合金系 $\text{Cu}_{1-x}\text{Au}_x$ [2]、重い電子系 $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ [18]、鉄系超伝導体 $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ [19] など幅広い物質群で観測されている。物質開拓の一環として固溶体を作製する際には、乱れの影響が増していることに注意しなければならない。
3. しばしば、(非) Fermi 液体の判別に電気抵抗の温度変化が $\propto T^2$ から逸脱しているか否かが議論される。この議論が妥当であるためには、十分に低温で音響フォノンによる寄与が $\propto T^5$ で減衰し無視できる必要がある。従って、Debye 温度の低い物質では、こうした議論には十分な注意が必要である。例えば、構造相転移近傍でソフトフォノンが存在する物質、ラットリングフォノンが存在する物質では、それらのフォノンからの散乱に関する十分な検討が必要である [20]。

4. Bloch-Grüneisen の式は、音響フォノンによる変形ポテンシャル散乱から導かれた。仮に、系の空間反転対称性が失われている場合には、音響フォノンは光学フォノンと同様に分極を有することが可能である。この場合、音響フォノンによる極性散乱が働くこととなり、この散乱をピエゾ電気散乱と呼ぶ。ピエゾ電気散乱は、GaAs などの反転対称性の失われた半導体で観測されている [3]。
5. Matthiessen 則が成立するのは、散乱機構が独立に働く場合である。従って、例えば不純物濃度が高く、不純物がフォノン分散に大きな影響を与えているような場合には、不純物とフォノンによる散乱の寄与を単純に足し合わせることはできない。また、磁気揺らぎは微視的には電子相関効果に起因しており、従って Fermi 液体における T^2 依存性と両立することはできない。
6. 一般に、金属はマルチバンドであり、電気抵抗は各バンドからの寄与の和として表される。各バンドが異なる散乱機構を有している可能性もある。従って、電気抵抗の解釈にあたっては、バンド計算・光電子分光・量子振動などの結果を援用することが望ましい。
7. 強磁場環境や少数キャリア系では、半古典的な近似の前提が満たされていない可能性がある。そのような状況下においては、電子系と外場の両者を同時に量子力学的に扱って初めて説明可能な現象が発現する。その典型例は、量子 Hall 効果と Shubnikov de Haas 効果である。量子振動は、輸送現象の中でも最も美しい側面であり、数々の研究者を虜にしてきた。

以上に述べたように、単なる電気抵抗のデータ一つをとっても、様々な事柄に思いを巡らすことが可能である。逆に言えば、輸送現象には多くの情報が詰まっているわけであり、輸送現象を専門としない実験家あるいは理論家にも、知恵を絞ってデータを見て頂きたい。

3 強磁性体の異常 Hall 効果

強相関電子系では、しばしば対称性の破れやトポロジカル秩序で特徴付けられる新たな量子相が出現する。その代表例の一つが遍歴強磁性である。本節では、遍歴強磁性体における異常 Hall 効果を考察しよう。異常 Hall 効果とは、強磁性体において磁場を印加していないにも関わらず有限となる Hall 効果のことである [21]。序章において、輸送現象の難しさの一因として散逸の問題があると述べたが、Hall 効果は非散逸性の反磁性電流により生み出されている。従って、多体問題に正面から取り組まなくても、現象の本質を捉えることができる。

3.1 対称性に基づいた現象論

微視的な観点から調べる前に、現象論的な観点から異常 Hall 効果を議論しよう。物性物理においては対称性の概念が重要であり、これによりテンソルとしての物理量に制約を与えることができる。これは、Neumann の原理として知られていて、より正確には「巨視的な物理的性質は、(磁気) 点群の対称性を有している」と表すことができる。重要な点は、(磁気) 空間群を扱う必要はなく、そこから並進対称操作を除いた (磁気) 点群を考察すれば良い点である。Neumann の原理を輸送現象に適用する際に問題となるのは、空間に関する対称操作から成る点群を扱うのか、空間と時間に関する対称操作から成る磁気点群を扱うか、である。磁気点群を用いればより一般的であるように感じられるが、一般には電子が輸送される場合に散逸の影響を受けるため、時間軸に関する対称性は既に失われていると考えなくてはならない。従って、点群に基づき議論すれば良い。

具体例として立方晶の強磁性体を、Birss の総説に基づき考察しよう [22]。電流を $(\beta_x, \beta_y, \beta_z)$ 方向に流し、 $(\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z)$ 方向の電圧信号を読み取る状況を考える。このときの一般化した電気抵抗 (電圧を電流で割ったもの) を、磁化の方向 $(\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ に関して展開することを考える。磁化に関する偶の項は、

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\rho}{\rho} &= \rho_0 A + \rho_{2a} B + \rho_{2b} C + \rho_{4a} D + \rho_{4b} E + \rho_{4c} F + \cdots \\ A &= 1 \\ B &= \alpha_1^2 \beta_1 \gamma_1 + \alpha_2^2 \beta_2 \gamma_2 + \alpha_3^2 \beta_3 \gamma_3 \\ C &= \alpha_1 \alpha_2 (\beta_1 \gamma_2 + \beta_2 \gamma_1) + \alpha_2 \alpha_3 (\beta_2 \gamma_3 + \beta_3 \gamma_2) + \alpha_3 \alpha_1 (\beta_3 \gamma_1 + \beta_1 \gamma_3) \\ D &= \alpha_1^4 \beta_1 \gamma_1 + \alpha_2^4 \beta_2 \gamma_2 + \alpha_3^4 \beta_3 \gamma_3 \\ E &= (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) (\beta_1 \gamma_1 + \beta_2 \gamma_2 + \beta_3 \gamma_3) \\ F &= \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3^2 (\beta_1 \gamma_2 + \beta_2 \gamma_1) + \alpha_1^2 \alpha_2 \alpha_3 (\beta_2 \gamma_3 + \beta_3 \gamma_2) + \alpha_1 \alpha_2^2 \alpha_3 (\beta_3 \gamma_1 + \beta_1 \gamma_3) \end{aligned} \quad (33)$$

のように書ける。A の項は、磁化の方向に依存しない磁気抵抗効果を意味しており、例えばスピン散乱の抑制による負の磁気抵抗効果を含んでいる。B 以下の高次項は磁化の方向に依存する磁気抵抗効果を意味しており、異方的磁気抵抗効果と呼ばれる。異方的磁気抵抗効果は、微視的にはスピン軌道相互作用に起因している。

一方で、磁化に関する奇の項は、

$$\begin{aligned} \rho_H &= \rho_1 A' + \rho_3 B' + \cdots \\ &= \rho_1 \varepsilon_{ijk} \alpha_i \beta_j \gamma_k + \rho_3 \varepsilon_{ijk} \alpha_i^3 \beta_j \gamma_k + \cdots \end{aligned} \quad (34)$$

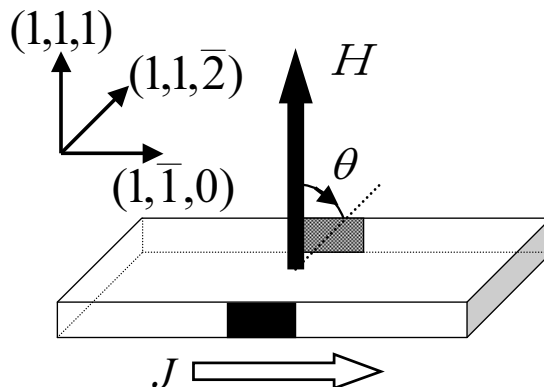


図 5: 立方晶の遍歴強磁性体における Hall 抵抗を測定するための幾何学的配置の一つ。

のように書ける。これらの項が、異常 Hall 効果に対応しており、微視的にはやはりスピン軌道相互作用に起因している。

右辺に現れた項の物理的意味を考察するために、具体例として磁化容易軸が (100) である強磁性体を考える。図 5 に示すような、電流端子を (110) に、電圧端子を電流端子と垂直な (112) に取った幾何学的配置を考える。磁場を (111) 方向に印加し、弱磁場から強磁場に掃引していく。 $H = +0$ の時、磁化は磁化容易軸 (100), (010), (001) のいずれかを向くが、その時の Hall 抵抗は $\rho_H = \frac{1}{\sqrt{3}}\rho_1 + \frac{1}{\sqrt{3}}\rho_3 + \dots$ となる。一方 $H = +\infty$ の時、磁化は (111) 方向を向き、 $\rho_H = \rho_1 + \frac{1}{3}\rho_3 + \dots$ となる。つまり、 A' 項のみ存在する場合は、強磁場極限と弱磁場極限の Hall 抵抗の比は、強磁場極限と弱磁場極限の磁化の大きさの比 $\sqrt{3}:1$ と同一になる。しかし、もし B' 項が存在すると、強磁場極限と弱磁場極限の Hall 抵抗の比は、 $\sqrt{3}:1$ からずれることになる。これが一つ目の解釈である。次に同様の幾何学的配置で $H = +\infty$ とし、磁場を図 5 に示すような方向に角度 θ だけ回転させることを考える。強磁場極限では磁気異方性の効果は無視でき、磁化は磁場を印加した方向に追従すると考えられる。従って、

$$\rho_H = \rho_1 \cos \theta + \rho_3 \left(\frac{1}{3} \cos^3 \theta + \cos \theta \sin^2 \theta - \frac{\sqrt{2}}{6} \sin^3 \theta \right) + \dots \quad (35)$$

となる。 A' 項のみ存在する場合は、Hall 抵抗は $\cos \theta$ の角度依存性を示し、これは磁化の成分の内、電流と電極を含む平面に対して垂直な成分のみ異常 Hall 効果に寄与すると理解される。 B' 項は、そうした単純な描像から逸脱することを意味している。これが二つ目の解釈である。これらの二つの解釈をまとめると、異常 Hall 効果には磁化と対応した等方的な成分 (A' 項) に加えて、異方的な成分 (B' 項) がある。異方的な異常ホール効果は、 FeCr_2S_4 において観測されており、本稿でも後に議論する [23]。

3.2 古典的な理論

異常ホール効果を微視的な観点から理解するための第一歩は、系を古典的に扱うことである。強磁性体においては自発磁化が有限となっており、時間反転対称性が破れている。従って、なにがしかの内部磁場が発生していると仮定するのはそう悪くないだろう。これを内部磁場 $\vec{H}_{int}$ として扱うと、磁場中の自由電子に対する Drude 理論を適用することができる。運動方程式は、

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} - e \left(\vec{E} + \frac{1}{mc} \vec{p} \times \vec{H}_{int} \right) \quad (36)$$

であり、ホール抵抗は $\rho_H = \rho_{yx} = -\frac{H_{int}}{nec}$ となる。勿論、これで分かったような気になれるはずもなく、内部磁場 $\vec{H}_{int}$ は何者なのかという疑問が残る。

3.3 半古典的な理論

3.3.1 波束の構成

内部磁場は何なのかという疑問に部分的に答えてくれるのが、半古典論である [24]。本稿では、Marder の素晴らしい教科書 [8] に従い、半古典論の基礎を学ぶ³。中心位置 $\vec{r}_c$ 、中心波数 $\vec{k}_c$ の波束は既に式 (3) で導入したが、それをスピン軌道相互作用などで波動関数に捻じれが生じた場合にも扱えるように一般化しよう。波束は、

$$W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} w_{\vec{k}-\vec{k}_c} \exp \left(-ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r}/\hbar c - i\vec{k} \cdot \vec{r}_c \right) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (37)$$

であることに変わりはない。ここで、 $w_{\vec{k}-\vec{k}_c}$ は $|\vec{k} - \vec{k}_c| > \Delta k$ の領域では $w_{\vec{k}-\vec{k}_c} \sim 0$ となるものとする。波束を表す波動関数には、位相項が存在する。 $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_c}$ の項は通常の Bloch 電子の位相であり、 $e^{-ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r}/\hbar c}$ の項は外部磁場に関する Berry 位相の項である。これらの項に加えて、 $w_{\vec{k}-\vec{k}_c}$ の位相項が存在することが 1999 年に Sundaram, Niu により明らかにされ [24]、それは $w_{\vec{k}-\vec{k}_c} = |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}| \exp \left(i(\vec{k} - \vec{k}_c) \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c} \right)$ と表すことができる。この位相項において、

$$\vec{R}_{\vec{k}_c} = i \int_{\Omega} d\vec{r} u_{\vec{k}_c}^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial \vec{k}_c} u_{\vec{k}_c}(\vec{r}) \quad (38)$$

であり、波動関数の捻じれに起因する Berry 位相に相当していることが分かる (積分範囲の Ω は 1 ユニットセルあたりの積分を意味している)。このような形の位相項を導入することは、上記のようにして導入した波束の中心位置が実

³その他の文献として、[25, 26] を挙げる。

際に $\vec{r}_c$ であるとの要請に依っている。まずは、これをチェックしよう。求めたいのは、 $\langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | \vec{r} | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle = \vec{r}_c$ であるが、計算を見通しよく行うために、 $\langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | \vec{r} - \vec{r}_c | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle = \langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | \vec{r} | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle - \vec{r}_c \langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle = \langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | \vec{r} | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle - \vec{r}_c = 0$ を示す。

$$\begin{aligned}
& \langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | \vec{r} - \vec{r}_c | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle \\
&= \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} e^{ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c + i\vec{k} \cdot \vec{r}_c} e^{-ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c - i\vec{k}' \cdot \vec{r}_c} \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) (\vec{r} - \vec{r}_c) \\
&= \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}'}(\vec{r}) (\vec{r} - \vec{r}_c) \\
&= \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}'}(\vec{r}) \frac{\partial \left(e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} \right)}{\partial(i\vec{k}')} \\
&= -\frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} \frac{\partial \left(w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) \right)}{\partial(i\vec{k}')} \\
& \quad [\vec{k}' \text{ に関する和を積分に直して、部分積分を実行した後、和に戻した。 }] \\
&= - \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \frac{\partial \left(w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) \right)}{\partial(i\vec{k}')} \\
& \quad [f(\vec{r}) \text{ を格子に関する周期関数としたとき、} \frac{1}{N} \int d\vec{r} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}} f(\vec{r}) = \int_{\Omega} d\vec{r} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} f(\vec{r}) \text{ であることを用いた。} \\
& \quad \int_{\Omega} d\vec{r} \text{ は単位格子内の積分を意味する。} u(\vec{r}) \text{ は、格子に関する周期関数であることに注意。}] \\
&= - \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \frac{\partial \left(w_{\vec{k}-\vec{k}_c} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \right)}{\partial(i\vec{k})} \\
&= - \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}} \left| w_{\vec{k}-\vec{k}_c} \right|^2 u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \frac{1}{w_{\vec{k}-\vec{k}_c}} \left(w_{\vec{k}-\vec{k}_c} \frac{\partial u_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial(i\vec{k})} + u_{\vec{k}}(\vec{r}) \frac{\partial w_{\vec{k}-\vec{k}_c}}{\partial(i\vec{k})} \right) \\
&= - \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}} \left| w_{\vec{k}-\vec{k}_c} \right|^2 \left(u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \frac{\partial u_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial(i\vec{k})} + |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 \frac{\partial \ln w_{\vec{k}-\vec{k}_c}}{\partial(i\vec{k})} \right) \\
&= - \int_{\Omega} d\vec{r} \delta_{\vec{k}, \vec{k}_c} \left(u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \frac{\partial u_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial(i\vec{k})} + |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 \frac{\partial \ln w_{\vec{k}-\vec{k}_c}}{\partial(i\vec{k})} \right) \\
& \quad [\sum_{\vec{k}} \left| w_{\vec{k}-\vec{k}_c} \right|^2 \sim \sum_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}, \vec{k}_c} \text{ のように扱う。 }] \\
&= i \int_{\Omega} d\vec{r} u_{\vec{k}_c}^*(\vec{r}) \frac{\partial u_{\vec{k}_c}(\vec{r})}{\partial \vec{k}_c} - \int_{\Omega} d\vec{r} |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 \frac{\partial \ln w_{\vec{k}-\vec{k}_c}}{\partial(i\vec{k})} \Bigg|_{\vec{k}=\vec{k}_c} \\
&= i \int_{\Omega} d\vec{r} u_{\vec{k}_c}^*(\vec{r}) \frac{\partial u_{\vec{k}_c}(\vec{r})}{\partial \vec{k}_c} - \frac{\partial \ln w_{\vec{k}-\vec{k}_c}}{\partial(i\vec{k})} \Bigg|_{\vec{k}=\vec{k}_c} \\
& \quad [\int_{\Omega} d\vec{r} |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 = 1 \text{ を使った。 }] \\
&= i \int_{\Omega} d\vec{r} u_{\vec{k}_c}^*(\vec{r}) \frac{\partial u_{\vec{k}_c}(\vec{r})}{\partial \vec{k}_c} - \frac{\partial \ln |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|}{\partial(i\vec{k})} \Bigg|_{\vec{k}=\vec{k}_c} - \frac{\partial \left(i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c} \right)}{\partial(i\vec{k})} \Bigg|_{\vec{k}=\vec{k}_c} \\
&= \vec{R}_{\vec{k}_c} - \vec{R}_{\vec{k}_c} \\
& \quad [\vec{k} = \vec{k}_c \text{ で波束の振幅は一定であるので、} \frac{\partial \ln |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|}{\partial(i\vec{k})} \Bigg|_{\vec{k}=\vec{k}_c} = 0 \text{ である。 }] \\
&= 0
\end{aligned} \tag{39}$$

以上の計算により、 $\langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | \vec{r} | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle = \vec{r}_c$ が示されたことになり、波束の中心位置が実際に $\vec{r}_c$ であることが分かった。この式の導出には、波束の振幅の位相項が、 $w_{\vec{k}-\vec{k}_c} = |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}| \exp \left(i(\vec{k} - \vec{k}_c) \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c} \right)$, $\left(\vec{R}_{\vec{k}_c} = i \int_{\Omega} d\vec{r} u_{\vec{k}_c}^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial \vec{k}_c} u_{\vec{k}_c}(\vec{r}) \right)$ であることが重要であった。つまり、波束を構成する段階で、Berry 位相項の存在が不可欠だったわけである。

3.3.2 運動方程式の導出

さて、Berry 位相の項は、波束の運動にどのような影響を与えるのであろうか？このことを理解するために、運動方程式を導くことにしよう。計算は、少々やっかいなので、まずは結果を示すことにする。運動方程式は、

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} - \frac{d\vec{k}}{dt} \times \vec{\Omega}(\vec{k}) \quad (40)$$

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{H} \right) \quad (41)$$

である。ただし、エネルギー $\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}$ 、軌道磁気モーメント $\vec{m}_{\vec{k}}$ 、Berry 曲率 $\vec{\Omega}(\vec{k})$ は、

$$\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} - \vec{H} \cdot \vec{m}_{\vec{k}} \quad (42)$$

$$\vec{m}_{\vec{k}} = -\frac{e\hbar}{4mc} \int_{\Omega} d\vec{r} \left(\frac{\partial u_{\vec{k}}^*}{\partial i\vec{k}} - \vec{R}_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^* \right) \times \left(\frac{\partial}{\partial i\vec{r}} + \vec{k} \right) u_{\vec{k}} + c.c. \quad (43)$$

$$\vec{\Omega}(\vec{k}) = \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \times \vec{R}(\vec{k}) \quad (44)$$

で定義される。エネルギーに軌道磁気モーメントからの寄与 $-\vec{H} \cdot \vec{m}_{\vec{k}}$ が加わったこと、速度 $\frac{d\vec{r}}{dt}$ に Berry 曲率 $\vec{\Omega}(\vec{k})$ の関与する異常速度項 $-\frac{d\vec{k}}{dt} \times \vec{\Omega}(\vec{k})$ が生じたことが、波動関数の捻じれていない単純な Pauli 常磁性体における運動方程式と比較して新しい点である。Berry 曲率に関する式、 $\vec{\Omega}(\vec{k}) = \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \times \vec{R}(\vec{k})$ を通常の電磁場に関する式、 $\vec{H} = \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \times \vec{A}$ と比較すると、 $\vec{\Omega}(\vec{k})$ が波数空間における磁場を、 $\vec{R}(\vec{k})$ が波数空間におけるベクトルポテンシャルを意味することが分かる。

それでは、運動方程式を実際に導出することに移ろう。初めに系の Lagrangian、

$$L = \langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle - \langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | (H - eV(\vec{r})) | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle \quad (45)$$

を各項に分けて計算する。

$$\begin{aligned} & \langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* e^{ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c + i\vec{k} \cdot \vec{r}_c} \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} e^{-ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c - i\vec{k}' \cdot \vec{r}_c} \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) \right) \\ &= \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* e^{ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c + i\vec{k} \cdot \vec{r}_c} \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) i\hbar \\ & \quad \left(\frac{\partial w_{\vec{k}'-\vec{k}_c}}{\partial t} e^{-ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c - i\vec{k}' \cdot \vec{r}_c} + w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} \frac{\partial (-ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c - i\vec{k}' \cdot \vec{r}_c)}{\partial t} e^{-ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c - i\vec{k}' \cdot \vec{r}_c} \right) \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) \\ &= \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_c} \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) i\hbar \left(\frac{\partial w_{\vec{k}'-\vec{k}_c}}{\partial t} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_c} + w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} \frac{\partial (-ie\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c - i\vec{k}' \cdot \vec{r}_c)}{\partial t} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_c} \right) \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) \\ &= \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_c} \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) i\hbar \left(\frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \frac{\partial w_{\vec{k}'-\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_c} + w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} \left(-ie \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial t} \cdot \vec{r} / \hbar c - i \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k}' \right) e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_c} \right) \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) \end{aligned}$$

[波束の時間 t に関する発展は、 $\vec{r}_c(t)$, $\vec{k}_c(t)$ を通じて行われることから、 $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_c} + \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}_c}$ と書けることを用いた。]

$$\begin{aligned} &= i\hbar \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_c} \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \frac{\partial w_{\vec{k}'-\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c} \\ & \quad + i\hbar \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_c} \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) \left(-ie \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial t} \cdot \vec{r}_c / \hbar c - i \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k}' \right) \end{aligned}$$

[$\langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | \vec{r} | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle = \vec{r}_c$ を用いて、 $\frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial t}$ の後ろの $\vec{r}$ を $\vec{r}_c$ で置き換えた。]

$$= i\hbar \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}'}(\vec{r}) \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \frac{\partial w_{\vec{k}'-\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c}$$

$$\begin{aligned}
& + i\hbar \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}'}(\vec{r}) \left(-ie \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial t} \cdot \vec{r}_c / \hbar c - i \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k}' \right) \\
& [\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \text{ を代入した。}] \\
& = i\hbar \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}'}(\vec{r}) \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \frac{\partial w_{\vec{k}'-\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c} \\
& + i\hbar \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}'}(\vec{r}) \left(-ie \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial t} \cdot \vec{r}_c / \hbar c - i \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k}' \right) \\
& [f(\vec{r}) \text{ を格子に関する周期関数としたとき、} \frac{1}{N} \int d\vec{r} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}} f(\vec{r}) = \int_{\Omega} d\vec{r} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} f(\vec{r}) \text{ であることを用いた。}] \\
& = i\hbar \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \frac{\partial w_{\vec{k}-\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c} + i\hbar \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}} |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|^2 |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 \left(-ie \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial t} \cdot \vec{r}_c / \hbar c - i \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k} \right) \\
& = i\hbar \sum_{\vec{k}} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \frac{\partial w_{\vec{k}-\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c} + i\hbar \sum_{\vec{k}} |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|^2 \left(-ie \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial t} \cdot \vec{r}_c / \hbar c - i \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k} \right) \\
& [\int_{\Omega} d\vec{r} |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 = 1 \text{ を使った。}] \\
& = i\hbar \sum_{\vec{k}} |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|^2 \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \frac{\partial \ln w_{\vec{k}-\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c} + i\hbar \sum_{\vec{k}} |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|^2 \left(-ie \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial t} \cdot \vec{r}_c / \hbar c - i \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k} \right) \\
& = i\hbar \sum_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}, \vec{k}_c} \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \frac{\partial \ln w_{\vec{k}-\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c} + i\hbar \sum_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}, \vec{k}_c} \left(-ie \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial t} \cdot \vec{r}_c / \hbar c - i \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k} \right) \\
& [\sum_{\vec{k}} |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|^2 \sim \sum_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}, \vec{k}_c} \text{ のように扱う。}] \\
& = i\hbar \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \left(\left. \frac{\partial \ln |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|}{\partial \vec{k}_c} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_c} + \frac{\partial (i(\vec{k}-\vec{k}_c) \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c})}{\partial \vec{k}_c} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_c} \Bigg) + \frac{e}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial t} \cdot \vec{r}_c + \hbar \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k}_c \\
& = \hbar \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c} + \frac{e}{c} \frac{d\vec{A}(\vec{r}_c)}{dt} \cdot \vec{r}_c + \hbar \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k}_c \tag{46} \\
& [\vec{k} = \vec{k}_c \text{ で波束の振幅は一定であるので、} \left. \frac{\partial \ln |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|}{\partial \vec{k}_c} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_c} = 0 \text{ である。}] \\
& \text{また、} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial t} = \frac{d\vec{A}(\vec{r}_c)}{dt} \text{ と記した。時間発展は、} \vec{r}_c(t) \text{ を通じてなされる。}]
\end{aligned}$$

次に Lagrangian の第二項の計算に移ろう。Hamiltonian としては、 $H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + U(\vec{r})$, ($U(\vec{r})$ は結晶の周期ポテンシャル) を考える。

$$\begin{aligned}
& \langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | (H - eV(\vec{r})) | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle \\
& = \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* e^{i\vec{e}\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c + i\vec{k} \cdot \vec{r}_c} \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + U(\vec{r}) - eV(\vec{r}) \right) w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} e^{-i\vec{e}\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r} / \hbar c - i\vec{k}' \cdot \vec{r}_c} \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) \\
& = \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k}' + \frac{e}{c} (\vec{A}(\vec{r}) - \vec{A}(\vec{r}_c)) \right)^2 + U(\vec{r}) - eV(\vec{r}) \right) w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) \\
& = \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k}' \right)^2 + U(\vec{r}) - eV(\vec{r}) \right) w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) \\
& + \left(\frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} \frac{e}{2mc} (\vec{A}(\vec{r}) - \vec{A}(\vec{r}_c)) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \hbar \vec{k}' \right) w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) + c.c. \right) + O(\vec{A}(\vec{r})^2) \\
& = \varepsilon_{\vec{k}_c} - eV(\vec{r}_c) + \left(\frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{A}(\vec{r}) - \vec{A}(\vec{r}_c)) \cdot \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k}' \right) w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) + c.c. \right)
\end{aligned}$$

[外場や波動関数の捻じれの効果の入っていない時のエネルギーとして、 $\varepsilon_{\vec{k}_c}$ を導入した。]

$O(\vec{A}(\vec{r})^2)$ の項は、小さいものとして無視した。]

$$= \varepsilon_{\vec{k}_c} - eV(\vec{r}_c) + \left(\frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} \frac{e\hbar}{4mc} \vec{B} \times (\vec{r} - \vec{r}_c) \cdot \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k}' \right) w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) + c.c. \right)$$

[一様磁場が印可されている場合のベクトルポテンシャルの具体形として、対称ゲージ $\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$ を採用した。]

$$= \varepsilon_{\vec{k}_c} - eV(\vec{r}_c) + \left(\frac{e\hbar}{4mc} \vec{B} \cdot \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} (\vec{r} - \vec{r}_c) \times \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k}' \right) w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) + c.c. \right)$$

$$= \varepsilon_{\vec{k}_c} - eV(\vec{r}_c) + \left(\frac{e\hbar}{4mc} \vec{B} \cdot \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \left(-\frac{\partial e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})}}{\partial(i\vec{k})} \right) \times \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k}' \right) w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) + c.c. \right)$$

$$= \varepsilon_{\vec{k}_c} - eV(\vec{r}_c) + \left(\frac{e\hbar}{4mc} \vec{B} \cdot \frac{1}{N} \int d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{\partial (w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}))}{\partial(i\vec{k})} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_c - \vec{r})} \times \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k}' \right) w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) + c.c. \right)$$

$[\vec{k}']$ に関する和を積分に直して、部分積分を実行した後、和に戻した。]

$$= \varepsilon_{\vec{k}_c} - eV(\vec{r}_c) + \left(\frac{e\hbar}{4mc} \vec{B} \cdot \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{\partial (w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^* u_{\vec{k}}^*(\vec{r}))}{\partial(i\vec{k})} \times \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k}' \right) w_{\vec{k}'-\vec{k}_c} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) + c.c. \right)$$

$[f(\vec{r})$ を格子に関する周期関数としたとき、 $\frac{1}{N} \int d\vec{r} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}} f(\vec{r}) = \int_{\Omega} d\vec{r} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} f(\vec{r})$ であることを用いた。]

$$= \varepsilon_{\vec{k}_c} - eV(\vec{r}_c) + \left(\frac{e\hbar}{4mc} \vec{B} \cdot \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}} |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|^2 \left(\frac{\partial (\ln w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^*)}{\partial(i\vec{k})} u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) + \frac{\partial u_{\vec{k}-\vec{k}_c}^*}{\partial(i\vec{k})} \right) \times \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k} \right) u_{\vec{k}}(\vec{r}) + c.c. \right)$$

$$= \varepsilon_{\vec{k}_c} - eV(\vec{r}_c) + \left(\frac{e\hbar}{4mc} \vec{B} \cdot \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}, \vec{k}_c} \left(\frac{\partial \ln w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^*}{\partial(i\vec{k})} u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) + \frac{\partial u_{\vec{k}}^*}{\partial(i\vec{k})} \right) \times \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k} \right) u_{\vec{k}}(\vec{r}) + c.c. \right)$$

$[\sum_{\vec{k}} |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|^2 \sim \sum_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}, \vec{k}_c}$ のように扱う。]

$$= \varepsilon_{\vec{k}_c} - eV(\vec{r}_c) + \left(\frac{e\hbar}{4mc} \vec{B} \cdot \int_{\Omega} d\vec{r} \left(\left(\frac{\partial \ln |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}^*|}{\partial(i\vec{k})} \right) \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_c} - \vec{R}_{\vec{k}_c} \right) u_{\vec{k}_c}^*(\vec{r}) + \frac{\partial u_{\vec{k}_c}^*}{\partial(i\vec{k}_c)} \times \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k}_c \right) u_{\vec{k}_c}(\vec{r}) + c.c. \right)$$

$$= \varepsilon_{\vec{k}_c} - eV(\vec{r}_c) + \left(\frac{e\hbar}{4mc} \vec{B} \cdot \int_{\Omega} d\vec{r} \left(\frac{\partial u_{\vec{k}_c}^*}{\partial(i\vec{k}_c)} - \vec{R}_{\vec{k}_c} u_{\vec{k}_c}^*(\vec{r}) \right) \times \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{k}_c \right) u_{\vec{k}_c}(\vec{r}) + c.c. \right)$$

$[\vec{k} = \vec{k}_c$ で波束の振幅は一定であるので、 $\frac{\partial \ln |w_{\vec{k}-\vec{k}_c}|}{\partial \vec{k}_c} \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_c} = 0$ である。]

$$= \varepsilon_{\vec{k}_c} - eV(\vec{r}_c) - \vec{B} \cdot \vec{m}_{\vec{k}_c} \quad (47)$$

[軌道磁気モーメントを、 $\vec{m}_{\vec{k}_c} = -\frac{e\hbar}{4mc} \int_{\Omega} d\vec{r} \left(\frac{\partial u_{\vec{k}_c}^*}{\partial i\vec{k}_c} - \vec{R}_{\vec{k}_c} u_{\vec{k}_c}^* \right) \times \left(\frac{\partial}{\partial i\vec{r}} + \vec{k}_c \right) u_{\vec{k}_c} + c.c.$ で導入した。]

長々と計算してきたが、結局、Lagrangian は、

$$\begin{aligned} L &= \langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle - \langle W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) | (H - eV(\vec{r})) | W_{\vec{r}_c \vec{k}_c}(\vec{r}) \rangle \\ &= \hbar \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c} + \frac{e}{c} \frac{d\vec{A}(\vec{r}_c)}{dt} \cdot \vec{r}_c + \hbar \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k}_c - \varepsilon_{\vec{k}_c} + eV(\vec{r}_c) + \vec{B} \cdot \vec{m}_{\vec{k}_c} \end{aligned} \quad (48)$$

と計算された。Lagrangian に任意の関数の時間微分を足しても Euler-Lagrange 方程式には影響がないことを念頭に、 $L \rightarrow L - \frac{e}{c} \frac{d(\vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \vec{r})}{dt}$ とすると、Lagrangian は、

$$L = \hbar \frac{d\vec{k}_c}{dt} \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_c) \cdot \frac{d\vec{r}_c}{dt} + \hbar \frac{d\vec{r}_c}{dt} \cdot \vec{k}_c - \varepsilon_{\vec{k}_c} + eV(\vec{r}_c) + \vec{B} \cdot \vec{m}_{\vec{k}_c} \quad (49)$$

となる。この Lagrangian に対して、Euler-Lagrange 方程式を書き下そう。まず、 $\frac{\partial L}{\partial \vec{r}_c} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_c} \right)$ について、

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \vec{r}_c} &= -\frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\dot{\vec{r}}_c \cdot \vec{A}(\vec{r}) \right) + e \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial \vec{r}_c} \\ &= -\frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\dot{\vec{r}}_c \cdot \vec{A}(\vec{r}) \right) - e \vec{E} \end{aligned} \quad (50)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_c} \right) &= \frac{d}{dt} \left(-\frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_c) + \hbar \vec{k}_c \right) \\
&= -\frac{e}{c} \dot{\vec{r}}_c \cdot \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_c)}{\partial \vec{r}} + \hbar \dot{\vec{k}}_c \\
&= \frac{e}{c} \dot{\vec{r}}_c \times \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \times \vec{A}(\vec{r}) \right) - \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\dot{\vec{r}}_c \cdot \vec{A}(\vec{r}) \right) + \hbar \dot{\vec{k}}_c \\
&\quad [\text{ここで、恒等式 } \dot{\vec{r}}_c \times \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \times \vec{A}(\vec{r}) \right) = \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\dot{\vec{r}}_c \cdot \vec{A}(\vec{r}) \right) - \left(\dot{\vec{r}}_c \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right) \vec{A}(\vec{r}) \text{ を使った。}] \\
&= \frac{e}{c} \dot{\vec{r}}_c \times \vec{B} - \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\dot{\vec{r}}_c \cdot \vec{A}(\vec{r}) \right) + \hbar \dot{\vec{k}}_c
\end{aligned} \tag{51}$$

なので、

$$\hbar \dot{\vec{k}}_c = -e \vec{E} - \frac{e}{c} \dot{\vec{r}}_c \times \vec{B} \tag{52}$$

が得られた。次に、 $\frac{\partial L}{\partial \vec{k}_c} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{k}}_c} \right)$ について、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial \vec{k}_c} &= \hbar \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \left(\dot{\vec{k}}_c \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c} \right) + \hbar \dot{\vec{r}}_c - \frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c} + \frac{\partial}{\partial \vec{k}_c} \left(\vec{B} \cdot \vec{m}_{\vec{k}_c} \right) \\
&= \hbar \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \left(\dot{\vec{k}}_c \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c} \right) + \hbar \dot{\vec{r}}_c - \frac{\partial \tilde{\varepsilon}_{\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c} \\
&\quad [\text{ここで、} \tilde{\varepsilon}_{\vec{k}_c} = \varepsilon_{\vec{k}_c} - \vec{B} \cdot \vec{m}_{\vec{k}_c} \text{ を導入した。}]
\end{aligned} \tag{53}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{k}}_c} \right) &= \hbar \frac{d \vec{R}_{\vec{k}_c}}{dt} \\
&= \hbar \dot{\vec{k}}_c \cdot \frac{\partial \vec{R}_{\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c} \\
&= \hbar \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \left(\dot{\vec{k}}_c \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c} \right) - \hbar \dot{\vec{k}}_c \times \left(\frac{\partial}{\partial \vec{k}} \times \vec{R}_{\vec{k}_c} \right) \\
&\quad [\text{ここで、恒等式 } \dot{\vec{k}}_c \times \left(\frac{\partial}{\partial \vec{k}} \times \vec{R}_{\vec{k}_c} \right) = \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \left(\dot{\vec{k}}_c \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c} \right) - \left(\dot{\vec{k}}_c \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \right) \vec{R}_{\vec{k}_c} \text{ を使った。}] \\
&= \hbar \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \left(\dot{\vec{k}}_c \cdot \vec{R}_{\vec{k}_c} \right) - \hbar \dot{\vec{k}}_c \times \vec{\Omega}(\vec{k}_c) \\
&\quad [\text{Berry 曲率 } \vec{\Omega}(\vec{k}) = \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \times \vec{R}(\vec{k}) \text{ を導入した。}]
\end{aligned} \tag{54}$$

なので、

$$\dot{\vec{r}}_c = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}_{\vec{k}_c}}{\partial \vec{k}_c} - \dot{\vec{k}}_c \times \vec{\Omega}(\vec{k}_c) \tag{55}$$

が得られた。

波束の中心位置を表す下付文字 c を除いて表記することになると、式 (52) と式 (55) は、

$$\dot{\vec{r}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} - \dot{\vec{k}} \times \vec{\Omega}(\vec{k}) \tag{56}$$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -e \vec{E} - \frac{e}{c} \dot{\vec{r}} \times \vec{B} \tag{57}$$

となる。これが、先に式 (40, 41) に示した半古典的な運動方程式の最終形である。

3.3.3 異常 Hall 効果

さて、半古典的な扱いの範囲で、異常 Hall 効果を議論しよう。外部から印可する磁場がゼロの場合には、運動方程式は、

$$\dot{\vec{r}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} - \dot{\vec{k}} \times \vec{\Omega}(\vec{k}) \tag{58}$$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -e \vec{E} \tag{59}$$

となる。これらを連立させることで、 $\dot{\vec{r}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \times \vec{\Omega}(\vec{k})$ となる。電流密度 $\vec{j}$ は、

$$\vec{j} = -e \sum_{\vec{k}} \frac{d \vec{r}}{dt} = -\frac{e}{\hbar} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \times \vec{\Omega}(\vec{k}) \right) \tag{60}$$

である。右辺の第一項は、伝導度テンソルの対角成分に寄与し電気抵抗を生み出すが、以降では無視することとする。一方で、右辺の第二項は異常速度に由来しており、伝導度テンソルの非対角成分に寄与する。簡単のため2次元系を考え、 $\vec{\Omega}(\vec{k})$ の z 成分のみ有限であるとする、 $\vec{j}_i = \sigma_{ij} E_j$ で定義される伝導度テンソル σ_{ij} に関して、

$$\sigma_{xy}^{\text{AHE}} = -\frac{e^2}{\hbar} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \Omega^z(\vec{k}) \quad (61)$$

となる。異常 Hall 効果は、Berry 曲率と一対一対応が⁴ついており、波動関数の捻じれにより生み出された内部磁場により生み出されていることが分かる。これが、半古典論からの異常 Hall 効果の理解である。なお、実験で実際に観測するのは Hall 抵抗 ρ_H であり、これは $\rho_H = \rho_{yx} = -\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}$ の関係により伝導度テンソルの対角成分（電気抵抗）の詳細に依存することを注意しておく。

本節の末尾に、対称性の観点から Berry 曲率と軌道磁気モーメントを考察しよう。時間反転対称操作に関して、 $\vec{\Omega}(\vec{k}) \rightarrow -\vec{\Omega}(-\vec{k})$ 、 $\vec{m}_{\vec{k}} \rightarrow -\vec{m}_{-\vec{k}}$ である。また、空間反転対称操作に関しては、 $\vec{\Omega}(\vec{k}) \rightarrow \vec{\Omega}(-\vec{k})$ 、 $\vec{m}(\vec{k}) \rightarrow \vec{m}(-\vec{k})$ である。従って、時間反転対称性と空間反転対称性の両者が保たれた物質、例えば反転心のある結晶構造を有する常磁性体では、任意の $\vec{k}$ に関して $\vec{\Omega}(\vec{k}) = 0$ 、 $\vec{m}_{\vec{k}} = 0$ となり、異常速度と軌道磁気モーメントの輸送現象への寄与はない。一方で、時間反転対称性の破れた物質では異常速度は有限となり新奇な輸送現象を誘起することになる。強磁性体における異常 Hall 効果がその一例となっているわけである。また、空間反転対称性の破れた物質でも異常速度は有限となり輸送現象に寄与する。これは最近、Weyl 半金属における chiral magnetic effect として盛んに議論されている [27]。

3.4 Kubo 公式に基づいた量子論

3.4.1 ダイヤモンド格子模型

ここまでの議論により、異常 Hall 効果は波動関数の捻じれ（Berry 接続 $\vec{R}_{\vec{k}}$ ）が誘起する磁場（Berry 曲率 $\vec{\Omega}_{\vec{k}} = \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \times \vec{R}_{\vec{k}}$ ）に起因することが分かったが、それがスピン軌道相互作用からどのような形で微視的に発現するかに関しては不明のままである。そこで、本節では具体的な Hamiltonian に対して、Kubo 公式により Hall 伝導度を計算し、異常 Hall 効果が発現する様子を調べる [23]。

考える模型は、図 6 に示すダイヤモンド格子の強束縛模型である⁴。ダイヤモンド格子は、立方晶 $Fd\bar{3}m$ の対称性を有しており、基本単位格子に A、B 二つのサイトが存在している。各サイトに等方的な s 軌道が存在しているとする。スピンの縮重も考慮に入れると、ハミルトニアンは 4×4 の行列で表される。最近接サイト間のとび移り積分のみが有限である場合の強束縛模型は、

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & fI \\ f^*I & 0 \end{pmatrix} \quad (62)$$

と表される（ I は 2×2 の単位行列）。ここで f は、 $\vec{a}_1 = \frac{1}{4}(-1, -1, -1)$ 、 $\vec{a}_2 = \frac{1}{4}(1, 1, -1)$ 、 $\vec{a}_3 = \frac{1}{4}(1, -1, 1)$ 、 $\vec{a}_4 = \frac{1}{4}(-1, 1, 1)$ として、

$$f = t(e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_3} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_4}) \quad (63)$$

である。固有値を求めるとスピンの関係に二重縮退したバンドが上下に存在し、それが図 7(a) に示す Brillouin ゾーンの端にある線上で、二次元の質量ゼロの Dirac 粒子として接していることが分かる。特に、線の交点においては、一次元の質量ゼロの Dirac 粒子と類似した分散関係となっている。このような Dirac 粒子的な分散があることは、系がトポロジカル異常に関して、ある種の臨界点に位置していることを示唆している。

Hall 伝導度が有限となるためには、内部磁場を生み出す複素数のとび移り積分が必要である。複素数のとび移り積分は、Rashba 相互作用あるいは Dzyaloshinskii-Moriya (D-M) 相互作用と呼ばれるものであり、その有無は局所対称性の観点から判断できる [30]⁵。A 副格子のサイトと最近接の B 副格子のサイトの midpoint の Wyckoff 位置は $16c$ であり、局所対称性は $\bar{3}m$ である。この点群は反転対称性を有しており、従って最近接のとび移り積分には D-M 相互作用の寄与は無い。次に、次近接サイト間の飛び移り積分を考えよう。次近接のリンクは、同一の副格子間の最近接のリンクに対応している。A 副格子のあるサイトと最近接の A 副格子のサイトの midpoint の Wyckoff 位置は $48f$ であり、その局所対称性は $2mm$ であ

⁴この模型は、後に 3 次元系のトポロジカル絶縁体を議論するためにも導入されており、Fu-Kane-Mele 模型と呼ばれる [28]。また、有名な蜂の巣格子上の Haldane 模型を、自然な形で 3 次元に拡張した模型となっている。

⁵異常 Hall 効果を微視的に導出すると言っておきながら、D-M 相互作用を局所対称性から半現象論的に導入するのは適切でないと考える方もいらっしゃるだろう。勿論、D-M 相互作用を微視的に導入することも可能であり、オンサイトのスピン軌道相互作用を取り込んだ多軌道の強束縛模型を最低エネルギー状態に射影することで、 $\vec{D}_{ij} = \frac{\lambda}{2i\Delta E} (t_{ij}^0 \vec{L}_{\alpha 0} + t_{ij}^{\alpha 0} \vec{L}_{0\alpha})$ と書けることが分かる。銅酸化物超伝導体における具体的な導出方法は、文献 [31] を参照して頂きたい。

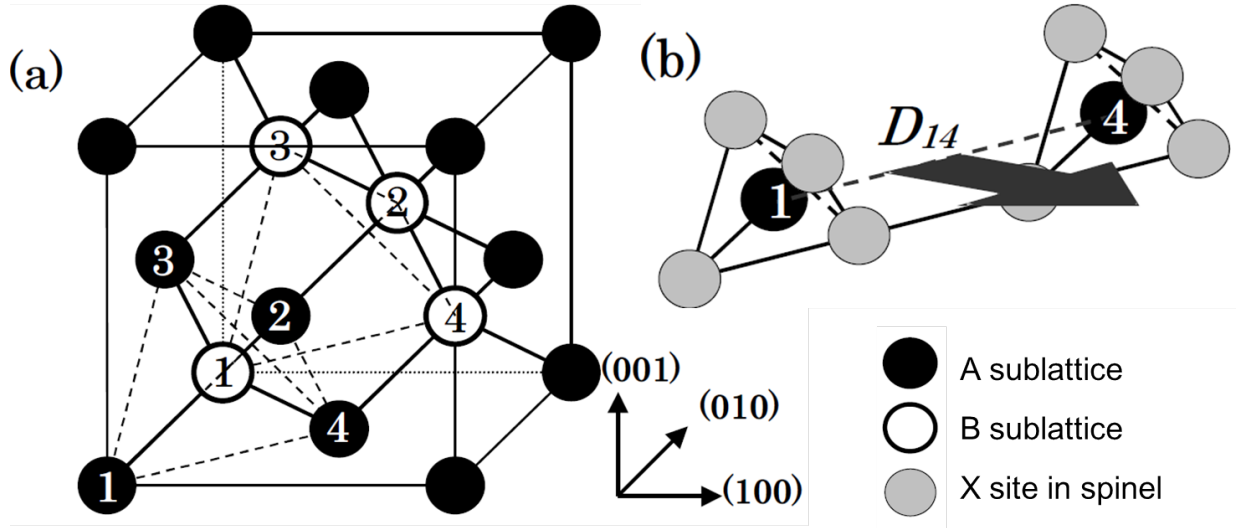


図 6: (a) ダイヤモンド構造. (b) D-M 相互作用. 次近接サイト間に、D-M 相互作用が現れる様子は、同じ空間群を有するスピネル構造を考えると分かり易い.

る。この点群では反転対称性が破れており、従って D-M ベクトル $\vec{D}$ が有限になる。Moriya の法則 [30] を適用すると、ベクトル $\vec{D}$ は $\vec{D}_{14}^A = \lambda(1, -1, 0)$ と書ける。 λ はスピン軌道相互作用に比例した量である。さらに結晶中における様々なサイトの局所対称性を適用することで、 $\vec{D}_{12}^A = \lambda(-1, 0, 1)$, $\vec{D}_{13}^A = \lambda(0, 1, -1)$, $\vec{D}_{23}^A = \lambda(-1, -1, 0)$, $\vec{D}_{24}^A = \lambda(0, 1, 1)$, $\vec{D}_{34}^A = \lambda(-1, 0, -1)$ であることが導ける。B 副格子に関しては、 $(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8})$ における $\bar{1}$ の局所対称性により、 $\vec{D}_{ij}^A = -\vec{D}_{ij}^B$ であることが分かる。つまり、結晶中における全ての D-M ベクトルが唯一つのパラメーター λ で表せ、且つ結晶全体について足し合わせると $\sum_{\alpha} \sum_{ij} \vec{D}_{ij}^{\alpha} = 0$ となりゼロとなっている。平均磁場がゼロであり空間的に変調がかかった内部磁場が印加された状況が実現しているのである。

次近接サイト間の飛び移り積分は、D-M ベクトルに加えて、実の成分 f' も含んでおり、結局、ハミルトニアンは、

$$H = \begin{pmatrix} f'I + f_i \vec{\sigma}_i & fI \\ f^* I & f'I - f_i \vec{\sigma}_i \end{pmatrix} \quad (64)$$

である。ここで f', f_i は、 $\vec{b}_1 = \frac{1}{2}(1, 0, 1)$, $\vec{b}_2 = \frac{1}{2}(1, 1, 0)$, $\vec{b}_3 = \frac{1}{2}(0, 1, 1)$, $\vec{b}_4 = \frac{1}{2}(1, -1, 0)$, $\vec{b}_5 = \frac{1}{2}(-1, 0, 1)$, $\vec{b}_6 = \frac{1}{2}(0, 1, -1)$ として、

$$f' = 2t'(\cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_1) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_2) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_3) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_4) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_5) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_6)) \quad (65)$$

$$f_x = 2\lambda(\sin(-\vec{k} \cdot \vec{b}_1) + \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_2) + \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_4) + \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_5))$$

$$f_y = 2\lambda(\sin(-\vec{k} \cdot \vec{b}_2) + \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_3) + \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_4) + \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_6))$$

$$f_z = 2\lambda(\sin(-\vec{k} \cdot \vec{b}_3) + \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_1) + \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_5) + \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_6))$$

である。固有値を求めると $\lambda \neq 0$ の時、Brillouin ゾーンの X 点 ($\lambda = 0$ の時、一次元 Dirac 粒子だったところ) を除いて上下のバンド間にギャップが生じる⁶。このときに、トポロジカル異常が生じて、波動関数に捻じれが生じ有限のホール伝導度が生じることが想像される。

さて、ここで、スピンの量子化軸を極座標で (α, β) と表される方向に回転させよう。この変換の後にスピンに関して上向きの空間に射影し、模型を 2×2 行列に落とす。これは、 (α, β) 方向にスピンが完全に揃っている状況に対応しており、微視的な起源に踏み込まず、系が強磁性体であることを反映させることに相当している。これにより時間反転対称性の破れた 2×2 の Hamiltonian、

$$H = \begin{pmatrix} f' + g_z & f \\ f^* & f' - g_z \end{pmatrix} \quad (66)$$

が得られる。ただし、

$$g_z = f_x \cos \alpha \sin \beta + f_y \sin \alpha \sin \beta + f_z \cos \beta \quad (67)$$

⁶X 点における分散は (二次元ではなく) 一次元の質量ゼロの Dirac 粒子なので、ギャップレスであるにもかかわらず、後述する Chern 数が定義可能である。

である。磁場は依然として平均ゼロで空間的に変調しており、変調の長さスケールは格子定数と同程度である。従って、半古典的な扱いを適用することはできず、電子と外場（現在の場合は、内部磁場としての D-M 相互作用）を量子力学的に取り扱う必要がある。そこで、Kubo 公式に基づいて Hall 伝導度を計算することにする。

3.4.2 三次元系における Hall 伝導度

二次元系におけるホール伝導度に関しては、有名な TKNN による理論がある [32]。一方で、三次元系における Hall 伝導度のトポロジカルな側面は、Kohmoto-Halperin-Wu により定式化がなされている [33]。その要点を本節にまとめる。

あらかじめ結晶格子に関する諸量を定義する。結晶格子の基本並進ベクトルを $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ とおく。これらは、必ずしも直交しているわけではない。逆格子ベクトル $\vec{G}_a, \vec{G}_b, \vec{G}_c$ を、

$$\vec{G}_a = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad (68)$$

などと定義する。三次元系において、伝導度テンソルの非対角成分を新たなベクトル $\vec{D}$ を導入して、

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{2\pi h} \epsilon_{ijk} D_k \quad (69)$$

と書くことにする。ここで、 ϵ_{ijk} は Eddington の ϵ である。以下では $\vec{D}$ の具体的な表式を求める。

Kubo 公式によると伝導度テンソルは、

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{4\pi^2 i h} \sum_{n \leq E_F} \int_{\vec{k} \in \text{BZ}} d^3 \vec{k} \left(\frac{\partial}{\partial k_i} \langle u_n | \frac{\partial}{\partial k_j} | u_n \rangle - \frac{\partial}{\partial k_j} \langle u_n | \frac{\partial}{\partial k_i} | u_n \rangle \right) \quad (70)$$

である。ここで $|u_n\rangle$ は、系の波動関数である。 $D_i = \frac{\pi h}{e^2} \epsilon_{ijk} \sigma_{jk}$ を使うと、

$$\begin{aligned} \vec{D} \cdot \vec{c} &= \frac{1}{2\pi i} \sum_{n \leq E_F} \int_{\vec{k} \in \text{BZ}} d^3 \vec{k} \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \times \langle u_n | \vec{\nabla} | u_n \rangle \\ &= \frac{1}{i} \sum_{n \leq E_F} \int dS \int_0^1 df_c \frac{\vec{c}}{|\vec{c}|} \cdot \vec{\nabla} \times \langle u_n | \vec{\nabla} | u_n \rangle \\ &= 2\pi \sum_{n \leq E_F} \int_0^1 df_c C_{c,n}(f_c) \\ &= 2\pi \sum_{n \leq E_F} C_{c,n} \\ &= 2\pi C_c \end{aligned} \quad (71)$$

となる。ただし、ここで Brillouin ゾーン内の $\vec{k}$ を $\vec{k} = f_a \vec{G}_a + f_b \vec{G}_b + f_c \vec{G}_c$, ($0 < f_a, f_b, f_c < 1$) と表し、 $\vec{k}$ に関する積分を (f_a, f_b) 平面内の積分と f_c 方向への積分に $d^3 \vec{k} = d\vec{S} \cdot \vec{G}_c df_c = dS \frac{\vec{c}}{|\vec{c}|} \cdot \vec{G}_c df_c = \frac{2\pi}{c} dS df_c$ のように分けた。また $\vec{A}_n = \langle u_n | \vec{\nabla} | u_n \rangle$ なる量を導入し、

$$C_{c,n} = \frac{1}{2\pi i} \int dS \frac{\vec{c}}{|\vec{c}|} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{A}_n \quad (72)$$

を定義した⁷。 $C_{c,n}$ は f_c に依存しないある整数であり、Chern 数と呼ばれる。さらに、Fermi 面以下の $C_{c,n}$ を足し合わせた量 C_c を

$$C_c = \sum_{n < E_F} C_{c,n} \quad (73)$$

により導入した。同様の計算を $\vec{D} \cdot \vec{a}$, $\vec{D} \cdot \vec{b}$ に関しても行うと、 $\vec{D} \cdot \vec{a} = 2\pi C_a$, $\vec{D} \cdot \vec{b} = 2\pi C_b$ が得られ、結局、

$$\vec{D} = C_a \vec{G}_a + C_b \vec{G}_b + C_c \vec{G}_c \quad (74)$$

として、 $\vec{D}$ の具体的な表式が求まった。

⁷前節の半古典論との対応でいえば、 $\vec{R}_k \leftrightarrow \vec{A}$ である。ここでは、原論文で使われている記号を採用した。

3.4.3 ダイヤモンド格子模型における Hall 伝導度

これで、ダイヤモンド格子模型の Hall 伝導度を計算する処方箋が調った。計算を実行する前に、逆格子ベクトルの定義を確認する (図 7(a)(b))。面心立方単位格子の一边の長さを 1 とすると、基本単位格子ベクトルは、 $\vec{a} = \frac{1}{2}(1, 0, 1)$, $\vec{b} = \frac{1}{2}(1, 1, 0)$, $\vec{c} = \frac{1}{2}(0, 1, 1)$ であり、逆格子ベクトルは、 $\vec{G}_a = 2\pi(1, -1, 1)$, $\vec{G}_b = 2\pi(1, 1, -1)$, $\vec{G}_c = 2\pi(-1, 1, 1)$ である。

考えている模型は、 (α, β) 方向に磁化したダイヤモンド格子上の強磁性体であり、ハミルトニアンは式 (66) で与えられる。2×2 行列であるから、二つのエネルギーバンドが存在し、それらをエネルギーの低い方から下側 (lower) バンド、上側 (upper) バンドと呼ぶことにする。それぞれのバンドの Chern 数について $C_{i,lower} + C_{i,upper} = 0$ の関係がある。そこで、以下では下側バンドの Chern 数にのみ着目する。また、 f' 項は以下の計算に本質的でないので $f' = 0$ とおく。

式 (72) に直接 Stokes の定理を適用すると $C_{i,lower} = 0$ の結論が得られる。しかし、実際には $\vec{A}_{lower}$ が Brillouin ゾーンの中で非自明な構造をとっているため有限となる。 $|u_{lower}\rangle$ の第一成分が実となるゲージを gauge-1 と呼び、その時の $\vec{A}_{lower}$ を $\vec{A}_{lower}^1$ とすると、このゲージは $|u_{lower}\rangle$ の第一成分がゼロとなる領域で定義できない。この領域をボルテックスと呼ぶ。ボルテックスの位置は、図 7(c) と表 2 にまとめた。ボルテックスを含んだ領域 Γ では $|u_{lower}\rangle$ の第二成分が実となるゲージ gauge-2 により $\vec{A}_{lower}$ を $\vec{A}_{lower}^2$ と定めることにする。すると、例えば $C_{c,lower}$ に関して、 $|u_{lower}\rangle = (a, be^{-i\xi})$ ($a, b, \xi \in R$) とすると

$$\begin{aligned} C_{c,lower} &= \frac{1}{2\pi i} \int dS \frac{\vec{c}}{|\vec{c}|} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{A}_{lower} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \left(\oint_{\Gamma} d\vec{l} \cdot \vec{A}_{lower}^2 + \oint_{-\Gamma} d\vec{l} \cdot \vec{A}_{lower}^1 \right) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} d\vec{l} \cdot (\vec{A}_{lower}^2 - \vec{A}_{lower}^1) \\ &= \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma} d\vec{l} \cdot \vec{\nabla} \xi \end{aligned} \quad (75)$$

となる。

以下では、 $\text{sgn}(\lambda \cos \alpha \sin \beta) > 0$, $\text{sgn}(\lambda \sin \alpha \sin \beta) > 0$, $\text{sgn}(\lambda \cos \beta) > 0$ の場合について、 $C_{c,lower}$ を具体的に計算する。この時、X-1, Y-1, Z-1 の周りでは gauge-2 を、それ以外では gauge-1 をとれば良い。Y-1 は、 $\vec{k}_{Y-1} = \frac{\vec{G}_a + \vec{G}_b}{2} + s(\vec{G}_b + \vec{G}_c)$, ($0 < s < \frac{1}{2}$) で表せるが、その周りで f を展開する。 $\vec{k} = \vec{k}_{Y-1} + f_a \vec{G}_a + f_b \vec{G}_b + f_c \vec{G}_c$ とし、 f_a, f_b, f_c に関して一次のオーダーで展開すると、

$$f = -2\pi t(\cos \pi s(f_a + f_b - f_c) + i \sin \pi s(f_a - f_b + f_c)) \quad (76)$$

である。Z-1 は、 $\vec{k}_{Z-1} = \frac{\vec{G}_b + \vec{G}_c}{2} + s(\vec{G}_a + \vec{G}_c)$, ($0 < s < \frac{1}{2}$) で表せるが、その周りで f を展開する。 $\vec{k} = \vec{k}_{Z-1} + f_a \vec{G}_a + f_b \vec{G}_b + f_c \vec{G}_c$ とし、 f_a, f_b, f_c に関して一次のオーダーで展開すると、

$$f = -2\pi t(\cos \pi s(-f_a + f_b + f_c) + i \sin \pi s(f_a + f_b - f_c)) \quad (77)$$

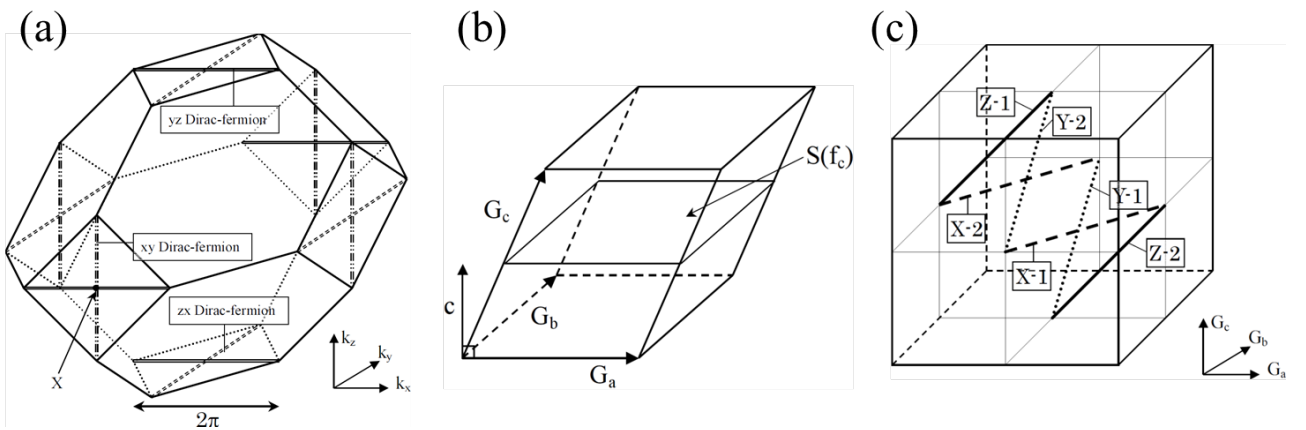


図 7: (a) 立方晶のユニットセルに基づいた Brillouin ゾーン. (b) 基本単位格子に基づいた Brillouin ゾーン. (c) ボルテックスの位置. 実際には $\vec{G}_a, \vec{G}_b, \vec{G}_c$ は直交していない点に注意.

band index	lower band		upper band	
gauge choice	gauge-1	gauge-2	gauge-1	gauge-2
$\text{sgn}(\lambda \cos \alpha \sin \beta) > 0$	X-1	X-2	X-2	X-1
$\text{sgn}(\lambda \cos \alpha \sin \beta) < 0$	X-2	X-1	X-1	X-2
$\text{sgn}(\lambda \sin \alpha \sin \beta) > 0$	Y-1	Y-2	Y-2	Y-1
$\text{sgn}(\lambda \sin \alpha \sin \beta) < 0$	Y-2	Y-1	Y-1	Y-2
$\text{sgn}(\lambda \cos \beta) > 0$	Z-1	Z-2	Z-2	Z-1
$\text{sgn}(\lambda \cos \beta) < 0$	Z-2	Z-1	Z-1	Z-2

表 2: ボルテックスの位置.

$\text{sgn}(\lambda \cos \alpha \sin \beta)$	$\text{sgn}(\lambda \sin \alpha \sin \beta)$	$\text{sgn}(\lambda \cos \beta)$	$C_{a,lower}$	$C_{b,lower}$	$C_{c,lower}$
+	+	+	-1	-1	-1
+	+	-	0	-1	0
+	-	+	-1	0	0
+	-	-	0	0	1
-	+	+	0	0	-1
-	+	-	1	0	0
-	-	+	0	1	0
-	-	-	1	1	1

表 3: 下側バンドの Chern 数.

である。固有関数は $|u_{lower}\rangle \propto (-f, \sqrt{|f|^2 + g_z^2} + g_z) \propto (-\sqrt{|f|^2 + g_z^2} + g_z, f^*)$ で表せるため、 $C_{c,lower}$ は $f = (af_a + bf_b) + i(cf_a + df_b) + \text{const.}$ のとき $C_{c,lower} = \text{sgn}(ad - bc)$ である (ここで、 $\text{sgn}x$ は x の符号に応じて ± 1 の値をとる関数である)。 $0 < f_c < \frac{1}{2}$ の時 Y-1 からの寄与があり、 $\frac{1}{2} < f_c < 1$ の時 Z-1 からの寄与があり、それぞれ -1 なので、 $C_{c,lower} = \int_0^1 df_c C_{c,lower} = -1$ である。

同様の計算を $C_{a,lower}, C_{b,lower}$ に関しても行うことができる。その結果を表 3 に示す。フェルミ面が下側バンドと上側バンドの間にある場合の Hall 伝導度は、簡単に纏めることができ、

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \end{pmatrix} = -\frac{e^2}{h} \begin{pmatrix} \text{sgn}(\lambda \cos \beta) \\ \text{sgn}(\lambda \cos \alpha \sin \beta) \\ \text{sgn}(\lambda \sin \alpha \sin \beta) \end{pmatrix} = -\frac{e^2}{h} \begin{pmatrix} \text{sgn}(\lambda M_z) \\ \text{sgn}(\lambda M_x) \\ \text{sgn}(\lambda M_y) \end{pmatrix} \quad (78)$$

である。ただし、磁化を (M_x, M_y, M_z) と表した。この結果は、Hall 伝導度の符号はスピン軌道相互作用 λ や磁化 M_i の符号を変えると反転することを意味しており、これは直感と合致する。また、下側バンドが完全に占有されている場合に、Hall 伝導度が $\frac{e^2}{ha}$ ($a = 1$ は、面心立方格子の一辺の長さ) のオーダーで量子化することも分かる。

こうして、ゼロ磁場であるにも関わらず、Hall 伝導度が有限となることが分かったわけであるが、その本質はどこにあったのであろうか？ 電子を曲げる磁場としての作用は、微視的には D-M 相互作用に起因している。D-M 相互作用は結晶全体で足し合わせるとゼロとなっているため、一見すると Hall 伝導度に寄与しないようにも感じられるが、副格子の自由度と絡み合っ有限のホール伝導度を与えている。より微視的に考えると、D-M 相互作用は波動関数に捻じれを生み出し、波数空間にボルテックスというトポロジカルなシンギュラリティーが生じさせている。これにより、Berry 曲率 $\vec{\Omega}_{\vec{k}}$ が有限となり、この内部磁場により異常 Hall 効果が発現している⁸。

⁸ ダイヤモンド格子模型に基づき、内部磁場 $\vec{\nabla} \times \vec{A} \sim \vec{\Omega}(\vec{k})$ の大きさを波数空間の関数としてプロットすれば、半古典論との対応も見易くなるだろう。これは、読者の方に取り組んで頂きたい。

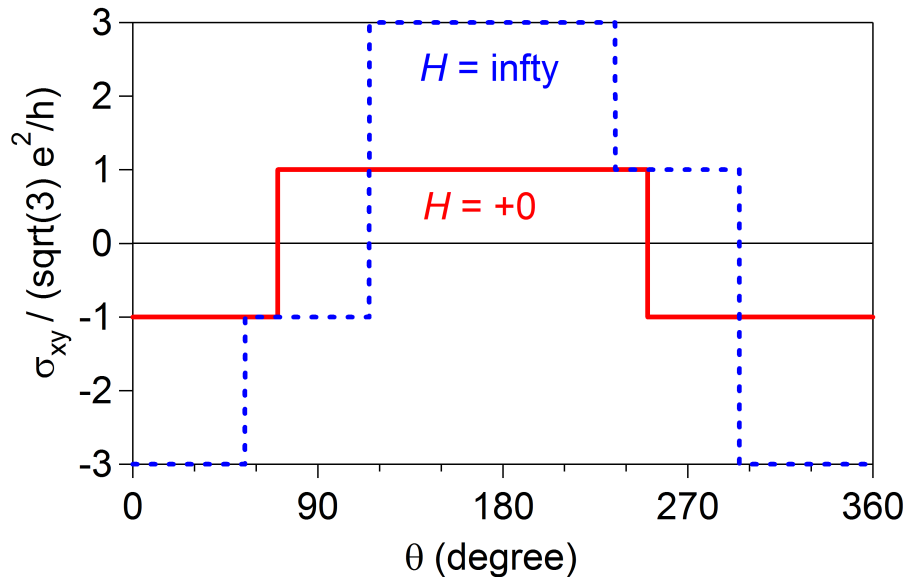


図 8: 図 5 の実験配置で測定したときの、Hall 伝導度の角度依存性. ダイヤモンド模型で、下側バンドのみ占有されている場合を考慮している.

3.4.4 現象論との対応

ここで、Kubo 公式の結果と現象論との対応を明らかにしておこう。対称性に基づき現象論を議論した際に仮定したように、強磁性体の磁化容易軸は (100), (010), (001) であるとする。また、Fermi 面は二枚のバンドの中間に位置しており、Hall 伝導度は量子化しているとする。このとき図 5 のような実験配置を考える。この座標系における Hall 伝導度を、 $\sigma' = R^{-1}\sigma R$ で定義する。すると、実際に測定される Hall 伝導度は、新たな座標系における σ'_{xy} であり、これは、 $\sigma'_{xy} = \frac{1}{\sqrt{3}}(\sigma_{xy} + \sigma_{yz} + \sigma_{zx})$ と書き下すことができる。この実験配置において、磁場を図 5 に示す方向に角度 θ だけ回転させる。弱磁場極限 ($H = +0$) では、磁化は磁化容易軸 (100), (010), (001) のいずれかの方向に揃っている。一方、強磁場極限 ($H = +\infty$) においては磁化は磁場方位そのものに向かう。これらを考慮すると、図 8 のような曲線が描ける。角度依存性はプラトーを示し、 $\cos \theta$ の角度依存性から外れていることが分かる。これは、現象論で議論した B' 項の寄与が存在することを意味している。なお、Hall 伝導度が値を変える所では、上側バンドと下側バンドで Chern 数を受け渡している。これはトポロジカル相転移の一例である。

3.4.5 実験との対応

本節を終えるにあたり、Ag を 6 % ドープした FeCr_2S_4 に対する実験結果を述べておこう。この物質は、図 9 に示すように、 $\cos \theta$ の角度依存性から外れた異常 Hall 効果を示す。これは、現象論における B' 項が顕著に存在することを意味している。一方で、前節で得られた Kubo 公式の結果とも比較したい所であるが、量子 Hall 液体に対する理論を遍歴磁性体 FeCr_2S_4 にそのままの形で適用することはできない。そこで、 $H = \infty$ の (110), (00 $\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}$ 0), (001) における理論曲線の跳びは量子 Hall 液体の仮定に由来することを考慮し、それらの影響を取り除くために結晶の主軸の各点を結ぶという近似を使うことにする。すると、図 9 において $H = \infty$ metal と記した曲線が得られる⁹。

こうして得た理論曲線と実験データを比較すると、実験データの多くの特徴が再現できていることが分かる。第一に、 $\theta = 0^\circ$ において $\frac{\rho(0)}{\rho(7T)} \sim 0.35$ であるという実験事実は、 $\theta = 0^\circ$ における $H = +0$ と $H = \infty$ の ρ_H の比が $1/3$ であることに対応している。第二に、 $H = 7$ T における Hall 抵抗の $\theta \sim 0^\circ$ 付近での先鋭化も理論曲線で再現されている。第三に、 $\theta \sim 70, 250^\circ$ における磁場に依存しない固定点と、そこにおけるキンク構造も理論曲線で再現されている。以上のように、 FeCr_2S_4 における異方的な異常 Hall 効果は、量子力学的な理論に基づき理解できる。

異常 Hall 効果の実験的研究はさらに進んでおり、その量子化は $\text{Cr}_{0.15}(\text{Bi}_{0.1}\text{Sb}_{0.9})_{1.85}\text{Te}_3$ を舞台に観測されるに至っている [34]。これは、トポロジカル絶縁体に遷移金属元素を埋め込み強磁性体にして Hall 効果を計測するという実験であり、本稿で述べた実験アイデアと似ている。

⁹ $H = +0$ の (11 $\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}$ 1) の飛びはスピンフリップに由来するため、取り除く必要が無い。

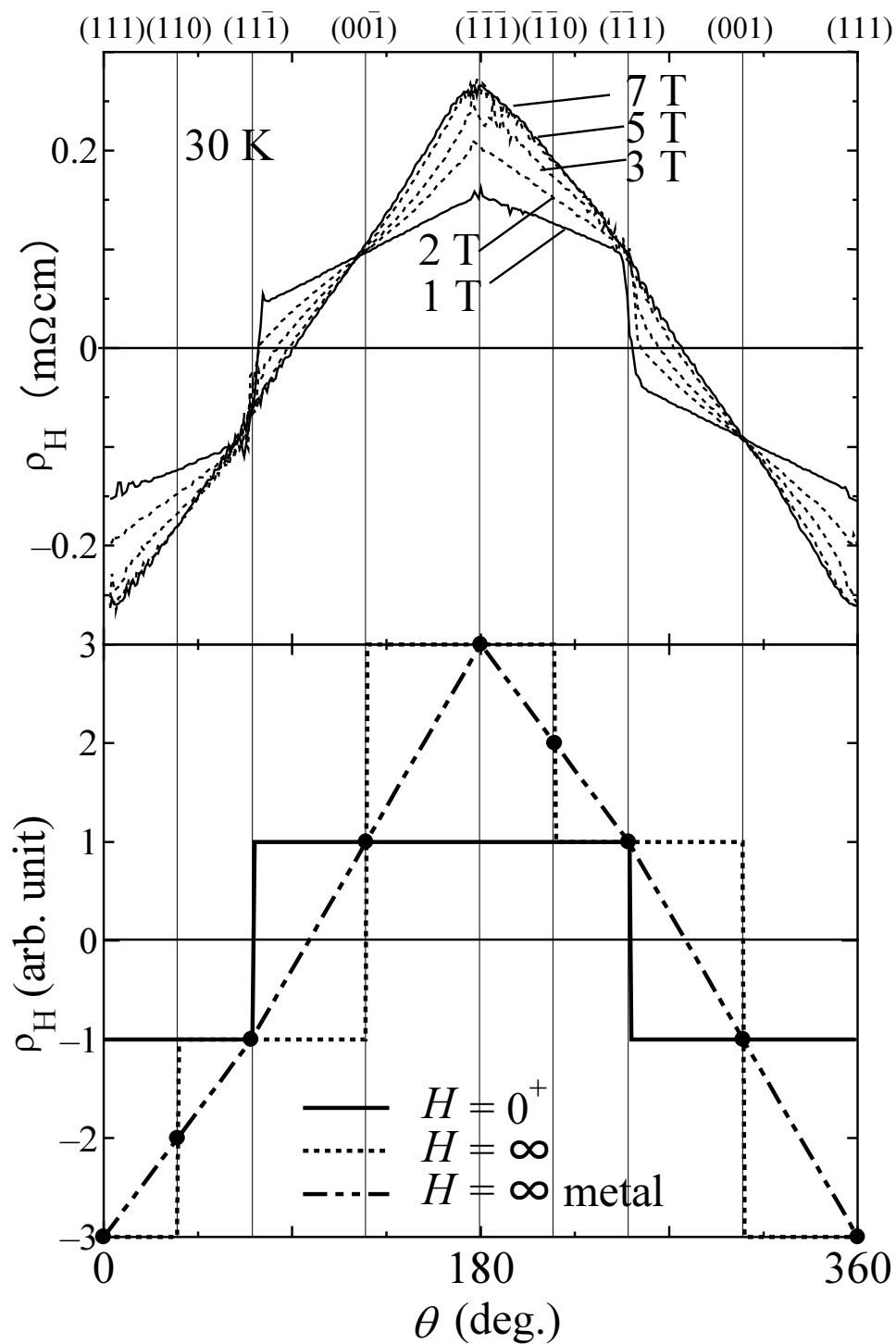


図 9: Ag を 6 % ドープした FeCr_2S_4 の異常 Hall 効果の角度依存性 [23]. (上) 実験, (下) 理論. 図 5 の実験配置に対応している。

4 おわりに

以上、金属における電気抵抗と強磁性体における異常ホール効果を概観した。いずれの現象も、古典論 → 半古典論 → 量子論という順で理解を進めることが可能である。また、量子効果・対称性・トポロジー・散乱問題・散逸性などの様々な物理的概念を総動員して理解が進んでいることも分かって頂けたかと思う。比較的単純な金属と強磁性体の電気伝導ですらこのようなことから、量子臨界点近傍の系や熱伝導の絡む現象ではもっと深い洞察が必要となってくる。このように言うと、やはり輸送現象は難しいという結論に陥ってしまう。しかし、裏を返せば輸送現象には様々な情報が含まれているということであり、観察者の眼が確かであれば、輸送現象ほど物質を理解する有力な実験手段はないだろう。

最後に、このディープな世界において今後発展が期待される問題を私見に基づき紹介したい。本稿では、磁気双極子が強的に揃った状態である強磁性体における量子伝導を扱ったが、これを一般化し、高次多極子が強的に揃った状態における量子伝導という問題設定が可能である。とりわけ興味深いのが、空間反転対称性の喪失した奇パリティ多極子秩序系の量子伝導である。例えば、奇パリティ電気多極子が揃った系においては、対称性から $j \propto E^2$ のような非線形伝導が許容される。半導体における p-n 接合の示す整流特性はこうした現象の一つであるが、バルクの物質における研究はまだ十分に行われていない。非線形伝導は、空間反転対称性の破れた物質に特徴的なバンド構造という観点からも理解できようが、本稿で触れたように音響フォノンが分極を有することで極性散乱を生み出し、それが特異な非線形伝導を生む可能性もあろう。線形伝導の範疇においても、興味深い現象があるだろう。例えば、空間反転対称性の破れた Weyl 半金属における磁気抵抗効果は、本稿で紹介した半古典的な理論の範疇で理解でき、Berry 位相に起因する異常速度に起源があることが明らかにされている [27]。こうした chiral magnetic effect も、奇パリティ電気多極子が揃った系の特異な輸送現象の一つである。

奇パリティ「電気」多極子が揃った系よりも、さらに面白いと思われるのは、奇パリティ「磁気」多極子が揃った系の量子伝導である。こうした系では、結晶点群としては空間反転対称性を保持しているものの、磁気点群としては空間反転対称性が破れているというような状況が実現する。このような場合でも、新奇な量子伝導は発現するのであろうか？本稿で、対称性に基づいた議論を紹介した折に、輸送現象では磁気点群ではなく点群を考えるべきだと述べた。それが正しいなら、結晶点群としては空間反転対称性を保持した奇パリティ磁気多極子秩序系では、新奇な輸送現象の観測は期待できない。しかし、もし非散逸性の量子伝導であるならば、磁気点群を適用して輸送現象を理解することもできそうに感じる。それが本当であるならば、新奇輸送現象の発現が期待できる。この辺りは、非平衡系における輸送現象の根本的な問題と関わっており、実験・理論の双方から発展が期待される。

謝辞

J-Physics 夏の学校で講演させて頂く機会を与えて下さった、播磨 尚朝 先生、野原 実 先生、藤 秀樹 先生に、厚く感謝申し上げます。講義の準備を通して、今後の研究・教育の方向性が見えた感じがします。また、お時間を割いて下さった匿名の査読者の先生にも、感謝申し上げます。高野山で講演を聴いて下さった学生の皆様、今後も研究・勉学に励んで下さい。

参考文献

- [1] Neil W. Ashcroft, N. David Mermin, *Solid State Physics*, (Thomson Learning, 1976).
- [2] J. M. Ziman, *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids*, (Oxford University Press, 2001).
- [3] 家 泰弘: 物性物理 (産業図書, 1997).
- [4] 斯波 弘行: 基礎の固体物理学 (培風館, 2007).
- [5] Gerald D. Mahan, *Many-Particle Physics*, (Springer, 2000).
- [6] Philip Phillips, *Advanced Solid State Physics*, (Cambridge University Press, 2012).
- [7] Joseph Callaway, *Quantum Theory of the Solid State*, (Academic Press, 2013).

- [8] Michael P. Marder, *Condensed Matter Physics*, (Wiley, 2015).
- [9] 阿部 龍蔵: 電気伝導 (培風館, 1969).
- [10] T. Kimura, S. Miyasaka, H. Takagi, K. Tamasaku, H. Eisaki, S. Uchida, K. Kitazawa, M. Hiroi, M. Sera, and N. Kobayashi, *Phys. Rev. B* **53**, 8733 (1996).
- [11] T. Yoshida, X.-J. Zhou, H. Yagi, D. H. Lu, K. Tanaka, A. Fujimori, Z. Hussain, Z.-X. Shen, T. Kakeshita, H. Eisaki, S. Uchida, K. Segawa, A. N. Lavrov, and Y. Ando, *Physica B* **351**, 250 (2004).
- [12] 桜井 純: 現代の量子力学 (吉岡書店, 1989).
- [13] 近藤 淳: 金属電子論－磁性合金を中心として－ (裳華房, 1983).
- [14] J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.* **27**, 772 (1962).
- [15] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, (Dover, 1975).
- [16] Toru Moriya, *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism*, (Springer, 1985).
- [17] 上田 和夫, 大貫 惇睦: 重い電子系の物理 (裳華房, 1989).
- [18] A. Sumiyama, Y. Oda, H. Nagano, Y. Onuki, K. Shibutani, and T. Komatsubara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **55**, 1294 (1986).
- [19] N. Katayama, Y. Kiuchi, Y. Matsushita, and K. Ohgushi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 123702 (2009).
- [20] Zenji Hiroi, Jun-ichi Yamaura, and Kazumasa Hattori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 011012 (2012).
- [21] Naoto Nagaosa, Jairo Sinova, Shigeki Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1539 (2010).
- [22] R. R. Birss, *Symmetry and Magnetism*, edited by E. P. Wohlfarth (North-Holland, 1964).
- [23] K. Ohgushi, S. Miyasaka, and Y. Tokura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 013710 (2006).
- [24] Ganesh Sundaram, and Qian Niu, *Phys. Rev. B* **59**, 14915 (1999).
- [25] Di Xiao, Ming-Che Chang, and Qian Niu, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959 (2010).
- [26] 小野田 勝, 量子輸送現象における幾何学的位相の効果, 第54回物性若手夏の学校, 講義ノート.
- [27] D. T. Son, and B. Z. Spivak, *Phys. Rev. B* **88**, 104412 (2013).
- [28] Liang Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 106803 (2007).
- [29] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988).
- [30] T. Moriya, *Phys. Rev. Lett.* **4**, 228 (1960).
- [31] Wataru Koshibae, Yukinori Ohta, and Sadamichi Maekawa, *Phys. Rev. B* **50**, 3767 (1994).
- [32] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
- [33] M. Kohmoto, B. I. Halperin, and Y. Wu, *Phys. Rev. B* **45**, 13488 (1992).
- [34] Cui-Zu Chang, Jinsong Zhang, Xiao Feng, Jie Shen, Zuocheng Zhang, Minghua Guo, Kang Li, Yunbo Ou, Pang Wei, Li-Li Wang, Zhong-Qing Ji, Yang Feng, Shuaihua Ji, Xi Chen, Jinfeng Jia, Xi Dai, Zhong Fang, Shou-Cheng Zhang, Ke He, Yayu Wang, Li Lu, Xu-Cun Ma, and Qi-Kun Xue, *Science* **340**, 167 (2013).