

修士論文 (2010 年度)

マグノンの軌道角運動量と熱ホール効果

東京工業大学大学院 理工学研究科 物性物理学専攻
松本 遼

abstract

We theoretically investigate dynamics of the magnon wavepacket, by constructing the semiclassical equation of motion of the magnon wavepacket in insulating ferromagnets and utilizing an analogy of the electron systems. The magnon wavepacket undergoes two types of orbital motions: a self-rotation motion and a motion along the edge of the system, in other words, an edge current of magnon. These motions are attributed to the Berry curvature in momentum space, i.e., these arise from the magnon band structure. In particular, the edge current of magnon is expected to be visible by space- and time- resolved optical experimental method. Moreover, this edge current of magnon brings about the thermal Hall effect of magnon, and we present its intuitive picture. We also consider the thermal Hall effect by the linear response theory, and find correction terms to the previously known result, which are expressed as the orbital angular momentum of magnon. Furthermore, we also show that our theory is applicable to not only the exchange spin wave but also the magnetostatic spin wave. The magnetostatic spin wave has a long wave length and a good coherence in some magnet, e.g., yttrium iron garnet which is a well known material in experiments, and thus it is useful for spintronics devices.

目次

1	序論	581
1.1	スピン波理論	581
1.2	マグノンの応用例: マグノンによる輸送現象	587
1.3	本研究の目的と論文構成	589
2	背景	590
2.1	波束の運動	590
2.2	線形応答理論	592
3	マグノンの軌道角運動量	595
4	マグノンの熱ホール効果	598
4.1	準古典論	598
4.2	先行研究	600
4.3	修正された線形応答理論	601

5	応用例	602
5.1	Lu ₂ V ₂ O ₇ の場合	602
5.2	YIG の場合	605
6	結論	608
A	自転の角運動量の導出	608
B	先行研究における熱ホール伝導率 κ^{xy} の計算	610
C	Boson の場合の熱輸送係数の計算	612
	謝辞	613

1 序論

マグノンとは磁性体中における低エネルギー励起状態であるスピン波を量子化したものであり、Bose 分布関数に従う準粒子である。マグノンは平均自由行程が電子に比べ比較的長く、物質によっては数 mm もの距離を伝播するため、コヒーレンスの良いスピン情報を運ぶ媒体として最近スピントロニクス分野で注目を集めている。特に、絶縁体中のスピン波は電流によるスピン流と異なりジュール熱の散逸が一切無いため、スピントロニクスデバイスへの応用上非常に有用である。

本章ではまずスピン波の一般的なレビューを行い [1, 2], その後スピン波の輸送現象に関する近年の報告として興味深いものをいくつか紹介する。なお、本論文では「スピン波」とそれを準粒子化した「マグノン」という単語が混在している箇所があるが、我々の理論はどちらにも適用可能であるため特にこの区別を意識する必要はない。

また本論文の内容の一部は文献 [3, 4] で発表されているものである。

1.1 スピン波理論

1.1.1 マグノン

歴史的にはスピン波を一番初めに提唱したのは Bloch(1930 年) で、強磁性自発磁化の温度依存性 ($T^{3/2}$ 則) を導く際に用いられた [5]。Bloch のスピン波の導出はスピンの運動方程式が出发点だが、ここではより簡単な方法として Holstein-Primakoff 変換 [6] を用いる。単純な例として次のような強磁性ハイゼンベルグモデルを考える。

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (1)$$

ここで J は交換相互作用のカップリング定数で、和 $\langle i,j \rangle$ は nearest-neighbor 間と取るものとする。この系の基底状態はキュリー温度以下ではスピンの全て揃った状態だが、この基底状態からの励起を考えると、一番単純には一つのサイトのスピンを反転させた状態が考えられる (図

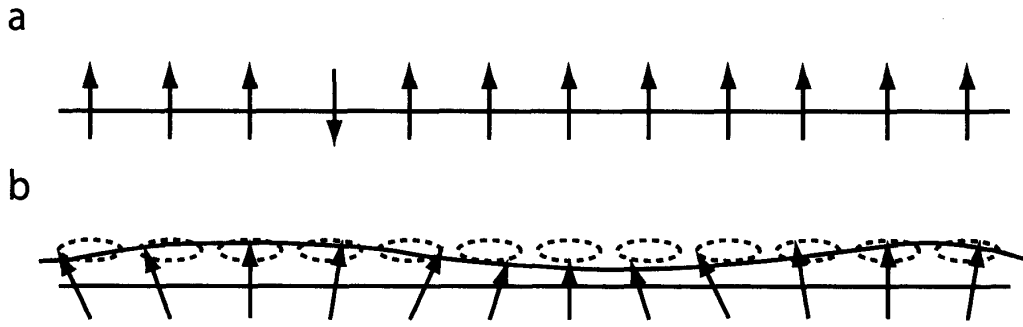


図 1: a: 強磁性体の基底状態 (スピンの全て揃った状態) からあるサイトのスピンの反転した励起状態. b: スピン波モード.

1a). しかし, この励起には交換相互作用 $J \sim 1[\text{eV}] \sim 10^4[\text{K}]$ 程度のエネルギーが必要であり, 大きなギャップが存在する. 一方, 一つのサイトのスピンを反転させる代わりに, 全てのサイトのスピンの少しずつ傾くことにより全体としてスピンの一つだけ減った状態にするような集団的な励起が可能である (図 1b). この励起は基底状態からの揺らぎとして記述されるギャップレスな励起であり, スピン波モードと呼ばれる. このスピン波を準粒子化する手続きが以下のような Holstein-Primakoff 変換と呼ばれる変換である.

$$S^z = S - \hat{n}, \quad (2)$$

$$S^- = \sqrt{2S} a^\dagger \left(1 - \frac{\hat{n}}{2S}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3)$$

$$S^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{\hat{n}}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} a, \quad (4)$$

ここで, S はスピンの大きさ, $S^\pm = S^x \pm iS^y$, $\hat{n} = a^\dagger a$, $a, a^\dagger$ はスピン波の生成消滅演算子である. この生成消滅演算子はスピンの交換関係の要請から Bose 分布に従う. 実際,

$$[S^z, S^-] = \sqrt{2S} [S - \hat{n}, a^\dagger] \left(1 - \frac{\hat{n}}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} = -[a, a^\dagger] S^-, \quad (5)$$

$$[S^z, S^+] = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{\hat{n}}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} [S - \hat{n}, a] = [a, a^\dagger] S^+, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} [S^-, S^+] &= 2S \left\{ a^\dagger \left(1 - \frac{\hat{n}}{2S}\right) a - \left(1 - \frac{\hat{n}}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} a a^\dagger \left(1 - \frac{\hat{n}}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} \right\} \\ &= -2[a, a^\dagger] (S - \hat{n}) = -2[a, a^\dagger] S^z, \end{aligned} \quad (7)$$

であり, スピン演算子の交換関係は $[S^\alpha, S^\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S^\gamma$ ($\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ は完全反対称テンソル) なので

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (8)$$

と言える.

さて, この生成消滅演算子でハミルトニアン (1) 式を書き直そう. スピン S が大きい場合, (3), (4) 式の因子 $\left(1 - \frac{\hat{n}}{2S}\right)^{\frac{1}{2}}$ を $\frac{\hat{n}}{2S}$ について展開すると, ハミルトニアンでは S^{-1} に関する展

開式が得られる. このうち S に比例する項までを残すと, (1) 式は次のようになる.

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left(S^2 - 2Sa_i^\dagger a_i + 2Sa_i^\dagger a_j \right). \quad (9)$$

ここで $a_i, a_i^\dagger$ の Fourier 変換

$$a_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} a_i, \quad (10)$$

$$a_{\mathbf{q}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} a_i^\dagger, \quad (11)$$

を用いるとこのハミルトニアン (9) 式は次のように対角化される.

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}}, \quad (12)$$

$$\omega_{\mathbf{q}} = S (J(\mathbf{q}) - J(\mathbf{0})) \hbar. \quad (13)$$

ここで $J(\mathbf{q})$ は交換相互作用 J_{ij} の Fourier 変換, $E_0 = NJ(\mathbf{0})S^2/2$ は基底状態のエネルギー, $\omega_{\mathbf{q}}$ は波数 $\mathbf{q}$ を持つスピン波の振動数である. スピン波のエネルギー $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ は特に長波長 ($\mathbf{q} \sim 0$) では $\mathbf{q}$ について展開できて, 最低次では強磁性体の場合 $\mathbf{q}^2$ に比例する. (12) 式の意味するところは, スピン波の励起がエネルギー $\omega_{\mathbf{q}}$ の準粒子が一つ励起することと等価である, ということであり, この準粒子をマグノンと呼ぶ. Holstein-Primakoff 変換の長所は (9) 式を導く際により高次の項をとることでマグノン間の相互作用を機械的に取り入れることができる点であり, 物理的な描像も捉えやすい.

上記の他に反強磁性体の場合のスピン波も同様に記述することが可能で, その場合は分散が $|\mathbf{q}|$ について線形になることが知られている. スピン波理論は基底状態からの揺らぎ, すなわち基底状態に近い励起状態を取り扱っているので, 特に低温領域での自発磁化や比熱を取り扱う上で有効な理論的方法である.

1.1.2 静磁波

上記で述べたスピン波には, 実際には交換相互作用のほかに Zeeman エネルギーや異方性エネルギー, および強磁性体の表面に生じた磁荷による反磁場の効果等が加わる. 特にこの反磁場は磁気双極子間の相互作用 (dipole-dipole interaction) により現れ, スピン波の波長が長いとき支配的になる. 磁化の空間変化が極度にゆるやかになるほどスピン波の波長が長くなると, 交換相互作用は双極子相互作用に比べて無視できて, この場合は問題を古典電磁気学で扱うことができる. このような固有振動モードを静磁波 (magnetostatic spin wave) と呼ぶ. この静磁波のモードは反磁場の効果によるものなので試料の形状に大きく依存し, 理論的な取り扱いも形状により分類される. まず球体については Walker[7] により解析され, これはしばしば Walker モードと呼ばれ, フェライトで White と Solt[8] により観測された. またスラブと薄膜については Damon と Eshbach[9] により解析され, こちらは DE (Damon-Eshbach) モードと呼ばれる. DE モードは磁化の方向と伝播方向により 3 つのモードに分類され, magnetostatic backward

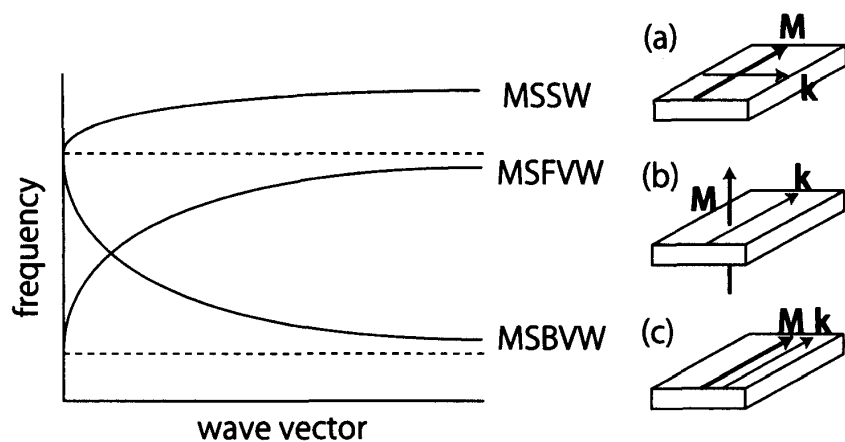


図 2: 3 種類の DE モードの典型的な分散. 磁化を $\mathbf{M}$, 伝播方向を $\mathbf{k}$ としたとき, (a)MSSW: $\mathbf{M}$ が面内かつ (典型的には) $\mathbf{M} \perp \mathbf{k}$, (b)MSFVW: $\mathbf{M}$ が面に垂直, (c)MSBVW: $\mathbf{M}$ が面内かつ $\mathbf{M} \parallel \mathbf{k}$.

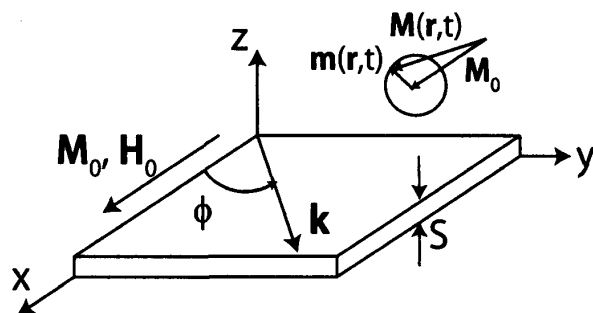


図 3: MSBVW の解析に用いる座標系. 静磁波の伝播方向は一般の方向を考える ($\mathbf{k} = (k \cos \phi, k \sin \phi, 0)$).

volume wave (MSBVW), magnetostatic forward volume wave (MSFVW), magnetostatic surface wave (MSSW) と呼ばれる (図 2 参照).

静磁波モードの導出は古典電磁気学により記述されるが, 計算はやや複雑である. ここでは例として薄膜中の MSBVW モードの導出を示す [10]. いま, xy 平面に強磁性薄膜がある系を考え, 飽和磁化 $\mathbf{M}_0$ と静磁場 $\mathbf{H}_0$ の方向を x 軸方向にとる (図 3). 出発点となるのは磁化の運動方程式, すなわち Landau-Lifshitz 方程式である.

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}, \quad (14)$$

ここで, γ は磁気回転比である. 磁化 $\mathbf{M}$ は x 方向に向いた大きな飽和磁化 $\mathbf{M}_0$ と静磁場 $\mathbf{H}_0$ の周りを回転する小さな運動成分 m_y, m_z に分解できる: $\mathbf{M} = M_0 \mathbf{e}_x + m_y \mathbf{e}_y + m_z \mathbf{e}_z$. 同様に磁場 $\mathbf{H}$ も静磁場 $\mathbf{H}_0$ と動的磁場 h_y, h_z に分解される: $\mathbf{H} = H_0 \mathbf{e}_x + h_y \mathbf{e}_y + h_z \mathbf{e}_z$. 磁化と磁場の運動成分をそれぞれ $\mathbf{m} = (m_y, m_z)^T$, $\mathbf{h} = (h_y, h_z)^T$ とベクトル表記してこれらが周波

数 ω の平面波解をとると仮定すると, (14) 式は次のように書ける.

$$\begin{pmatrix} m_y \\ m_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa & -i\nu \\ i\nu & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_y \\ h_z \end{pmatrix}, \quad (15)$$

ただし,

$$\kappa = \frac{\Omega_H}{\Omega_H^2 - \Omega^2}, \nu = \frac{\Omega}{\Omega_H^2 - \Omega^2}, \quad (16)$$

$$\Omega = \frac{\omega}{\gamma M_0}, \Omega_H = \frac{H_0}{M_0} \quad (17)$$

であり, 本論文では SI 単位系を用いる. 次に, Maxwell 方程式を用いる. いま magnetostatic limit を考えているので, Maxwell 方程式は次のようになる.

$$\nabla \cdot \mathbf{b} = 0, \quad (18)$$

$$\nabla \times \mathbf{h} = 0, \quad (19)$$

ただし, $\mathbf{b} = \mu_0(\mathbf{h} + \mathbf{m})$ は磁束密度, μ_0 は真空の透磁率, $\mathbf{h}$ は動的磁場である. H_0 や M_0 は空間的に一様なので Maxwell 方程式では考慮する必要はない. (19) 式から, 磁場ポテンシャル $\psi(\mathbf{r})$ が導入できて, $\psi(\mathbf{r})$ は磁場 $\mathbf{h}$ と $\mathbf{h}(\mathbf{r}, t) = \nabla\psi(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$ という関係で定義される. この $\psi(\mathbf{r})$ を試料内部と外部でそれぞれ次のようにおく.¹

$$\psi^i(x, y, z) = X(x)Y(y)Z^i(z), \quad (20)$$

$$\psi^e(x, y, z) = X(x)Y(y)Z^e(z). \quad (21)$$

ここで上付き添え字 i は試料内部, e は外部を表す. 面内を伝播するスピン波を考えているので波数ベクトルを $\mathbf{k} = (k \cos \phi, k \sin \phi, 0)$ とおくと (ϕ は伝播する方向), $X(x)$ と $Y(y)$ は平面波解を持つと考えられる.

$$X(x) = e^{i(k \cos \phi)x}, Y(y) = e^{i(k \sin \phi)y} \quad (22)$$

一方, $Z^i(z), Z^e(z)$ の形は系の対称性により決められる.

$$Z^i(z) = a \sin(k_z^i z) + b \cos(k_z^i z) \quad (|z| < S/2), \quad (23)$$

$$Z^e(z) = ce^{-k_z^e z} \quad (z > +S/2), \quad (24)$$

$$Z^e(z) = de^{+k_z^e z} \quad (z < -S/2), \quad (25)$$

ここで, S は薄膜の厚さである. なお, この (23) 式中の k_z^i が実数か虚数かによって MSBVW になるか MSSW になるかが決定される. 直観的には例えば k_z^i が虚数の場合は (23) 式は指数関数になり, 磁気ポテンシャルが片方の面からもう片方の面にかけて指数関数的に減衰するプロファイルになり, 試料の片面付近にのみ磁気ポテンシャルが存在するということから MSSW

¹(20), (21) 式で x 微分を施すと h_x が現れるが, 今は H_0 が十分大きいと仮定しているため無視できて, LL 方程式等には入ってこない.

になることが窺える。さて, Maxwell 方程式のうちもう一つの式 $\nabla \cdot \mathbf{b} = \nabla \cdot (\mathbf{h} + \mathbf{m}) = 0$ を用いると, 磁気ポテンシャル ψ に関する微分方程式が得られる。

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + (1 + \kappa) \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right] \psi^i(x, y, z) = 0, \quad (26)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi^e(x, y, z) = 0. \quad (27)$$

これらの式 (20)-(27) を用いると, 波数と k_z^i, k_z^e に関する次のような関係式が得られる。

$$k_x^2 + (1 + \kappa) (k_y^2 + (k_z^i)^2) = 0, \quad (28)$$

$$k_x^2 + k_y^2 - (k_z^e)^2 = 0. \quad (29)$$

そして最後に電磁気学の境界条件を用いて係数 $a \sim d$ の関係式を求める。境界条件は通常行うように, 試料の境界において磁場の接線方向成分 $h_{\parallel}$ が連続, かつ磁束密度の法線方向成分 $b_{\perp}$ が連続である, という条件である。

$$h_{1\parallel} = h_{2\parallel}, \quad (30)$$

$$b_{1\perp} = b_{2\perp}. \quad (31)$$

これにより係数 $a \sim d$ の間には次のような関係式があることがわかる。

$$a = \frac{c - d}{2} \frac{e^{-k_z^e S/2}}{\sin(k_z^i S/2)}, \quad (32)$$

$$b = \frac{c + d}{2} \frac{e^{-k_z^e S/2}}{\cos(k_z^i S/2)}. \quad (33)$$

これは $(c - d)/(c + d)$ の形で表すと便利である。

$$\begin{aligned} \frac{c - d}{c + d} &= \frac{\nu k_y}{(1 + \kappa) k_z^i \cot(k_z^i S/2) + k_z^e} \\ &= -\frac{(1 + \kappa) k_z^i \tan(k_z^i S/2) - k_z^e}{\nu k_y}. \end{aligned} \quad (34)$$

この (34) 式から, k_z^i, k_z^e と波数, および分散に関する方程式が得られる。

$$(k_z^e)^2 - (k_z^i)^2 (1 + \kappa)^2 - \nu^2 k^2 \sin^2 \phi + 2k_z^i k_z^e (1 + \kappa) \cot(k_z^i S) = 0. \quad (35)$$

ここで, (28), (29) 式から

$$k_z^i = \pm k \sqrt{-\frac{1 + \kappa \sin^2 \phi}{1 + \kappa}}, \quad (36)$$

$$k_z^e = k, \quad (37)$$

であったから, 結局静磁波の分散関係は以下の式で与えられる。

$$\begin{aligned} (1 + \kappa)^2 \left(-\frac{1 + \kappa \sin^2 \phi}{1 + \kappa} \right) + \nu^2 \sin^2 \phi - 1 \\ - 2(1 + \kappa) \sqrt{-\frac{1 + \kappa \sin^2 \phi}{1 + \kappa}} \cot(k_z^i S) = 0. \end{aligned} \quad (38)$$

MSBVW は $k_z^i > 0$ であるから, (36) 式から振動数 Ω に関して制限がつく. (36) 式のルートの
中を $\kappa = \frac{\Omega_H}{\Omega_H^2 - \Omega^2}$ を用いて書き直すと,

$$-\frac{1 + \kappa \sin^2 \phi}{1 + \kappa} = \frac{\Omega^2 - \Omega_H(\Omega_H + \sin^2 \phi)}{\Omega_H(\Omega_H + 1) - \Omega^2} \quad (39)$$

であるから振動数のとりうる範囲は

$$\sqrt{\Omega_H(\Omega_H + \sin^2 \phi)} < \Omega < \sqrt{\Omega_H(\Omega_H + 1)} \quad (40)$$

となる. したがって, 伝播角度 ϕ が大きくなるにつれて MSBVW のバンド幅は狭くなり,
 $\phi = \pi/2$ で全てのバンドが $\Omega = \sqrt{\Omega_H(\Omega_H + 1)}$ に縮退する. MSBVW のバンド図は概略図 2
で見たように波数が小さいところでバンドの傾き, すなわち群速度が負でありこれが backward
volume wave と呼ばれる所以である. 面白いのは MSBVW の場合ある有限の波数のところで
バンドが極小になるという点で, これを利用してマグノンの Bose-Einstein 凝縮 (Bose-Einstein
condensation: BEC) を起こすことが可能で, 実際に Demokritov らにより室温でマグノンの
BEC が観測された [11].

以上がスピン波の分散の導出例だが, このほかにも短距離の交換相互作用と長距離の双極子
相互作用両方を含めたハミルトニアンで出発し分散を求める方法もあり, このようなモードを
しばしば dipole-exchange モードと呼ぶ [12]. しかし, この場合は計算がやや複雑になり, 解析
的に解くのは難しい. 交換相互作用と双極子相互作用を両方考えた系においてスピン波の分散
を決定する際のそれぞれの役割を大雑把にまとめると, 波数が小さな領域では双極子相互作用
が分散の曲線を決定し, 交換相互作用は分散曲線が交わる箇所を反発させてバンドを離散的に
する役割を果たしている [13]. 一方波数が大きな領域では逆に交換相互作用が支配的になり,
分散曲線は k^2 の曲線に近づいていく.

1.2 マグノンの応用例: マグノンによる輸送現象

マグノンは低温領域での磁化や比熱を記述するだけでなく, 近年ではその長い伝播距離を活
かした輸送現象に関しても注目を浴びている. 特に以下で述べるイットリウム鉄ガーネット
(Yttrium-Iron-Garnet: YIG) はスピン波のダンピングが非常に小さいため長距離を伝播でき
ることが知られており, スピン波を用いたデバイスなども数多く考案されている [14, 15, 16].
この節では近年のマグノンの輸送現象に関する興味深い実験報告をいくつか紹介する.

1.2.1 絶縁体を介した電気信号の伝導

絶縁体はフェルミ面上に状態がないために, 電気信号を通すことはできないと従来考えら
れていたが, スピン流を用いることで絶縁体を介した電気信号の伝導が可能であることが Y.
Kajiwara らにより実験で示された [17]. 実験のセットアップは図 4 のようなものであり, 注目
すべきは Pt 端子間の距離が 1[mm] とマクロな距離である点である. 実験で用いられている
YIG はフェリ磁性 Mott 絶縁体であり, バンドギャップは 2.7[eV], キュリー温度は $T_c = 550[\text{K}]$,
また Gilbert ダンピング定数 α は $\alpha \approx 6.7 \times 10^{-5}$ (典型的な値は 0.001~0.01 程度) と非常に小

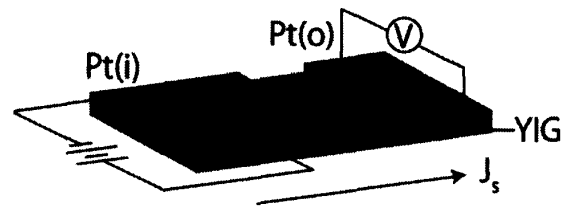


図 4: YIG を介した電気信号の伝導. Pt 端子間の距離は 1[mm] である.

さいためスピン波は [mm]~[cm] というマクロな距離を伝播することができることが知られている [17].

実際にどのように伝導するかは次の通りである. まず入力として, Pt(i) 端子 (図 4 参照) に電流 J を流す. すると, この電流は Pt 内においてスピントルク (spin Hall effect) という「電流 → スピン流」の変換を起こし, Pt と YIG の界面を通してスピントルクを YIG に与えスピン波が生じる. この動作はちょうどスピンプンピング [18] の逆に相当し, 元となっているのは Pt 内の伝導電子と YIG 内の局在電子間の sd 相互作用である. このスピン波はスピン流 J_s として YIG 内を伝播し, もう一つの Pt 端子 (o) に到達すると再びスピンプンピングによって Pt 内にスピン流として注入され, このスピン流は今度は逆スピントルク (Inverse spin Hall effect) と呼ばれる「スピン流 → 電流」の変換を経て再び電気信号として取り出される. このような複雑なプロセスを経ているものの, 実質的にはこれは電気信号が絶縁体を介して離れた場所に伝わっていることを意味しており, 従来の信号伝達方法には無かった非常にインパクトの大きな実験である. しかも, 絶縁体中の伝導は通常の電気伝導と異なりジュール熱が発生しないため, ロスの少ない伝導が可能であり, さらに室温で動作することも注目すべき点である. この実験は金属や半導体中のスピン流ではできなかったスピン情報の長距離伝達が可能であることを意味しており, スピン波には従来のスピントロニクス分野にはない新しい可能性があることを示唆している.

1.2.2 spin Seebeck 効果

2つの異なる物質を接触させ温度勾配をかけると, 両端に電圧が生じる. これを Seebeck 効果と呼び, 温度計や小型発電機などに用いられている. Seebeck 効果の要点は2つの物質の Seebeck 係数が異なっていることであり, このアナロジーから同じ物質中であっても2つのスピンの向きによって異なる Seebeck 係数を持つとして K. Uchida らによって発見されたのが spin Seebeck 効果 (spin Seebeck effect: SSE) である [19, 20]. SSE は初め強磁性金属であるパーマロイ (permalloy: $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$) で観測され [19], その後 YIG 中 [20] でも観測されたが, 理論的な説明に関してはパーマロイのほうが未解決な部分が多い [21]. しかしここではあまり理論的な深入りはせず, 実験でどのような現象が起きるのかについてのみ述べることにする.

SSE の基本的なセッティングは図 5 の通りである. いま YIG の場合を考えると, SSE の観測は次のようにして行われる. まず, YIG の両端で温度勾配を課すと, その方向にスピン波が生じる. スピン波はスピンの情報を伝播するのでスピン流が同じ方向に流れる. すると, sd 相互作用により YIG につけてある Pt 端子にもスピン流が流れ, このスピン流が今度は逆ス

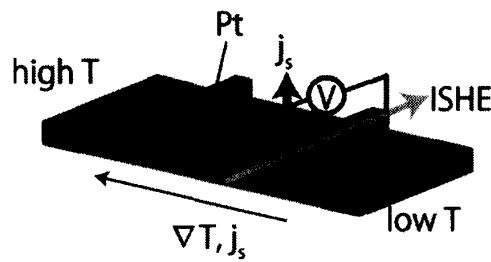


図 5: SSE の基本的なセットアップ

ピンホール効果を起こし、スピン流が電圧に変換され測定可能になる。実際に測定されたシグナルは高温側と低温側で逆符号であり、これは両側で観測されたスピンの向きがそれぞれ逆向きであったことを意味する。すなわち、温度勾配により試料の両端にスピントルテージ (電圧のスピン版) が生じたことになり、これはまさしく Seebeck 効果のスピン版であるといえる²。

このようにスピン波は近年では電子によるスピン流とは全く異なる新しいスピンの媒体としてスピントロニクス分野において注目を集めている。

1.3 本研究の目的と論文構成

以上見てきたようにマグノンはコヒーレンスが良いので実験で観測しやすく、スピントロニクスへの応用の可能性も期待されている。またマグノンは統計性やスピンの伝播距離などにおいて電子と異なっているが、一方で波動性があるという点では類似しており、電子系のアナロジーを用いることによって新しい現象を見出せることが予想される。そこで本研究においてはマグノン波束の運動について電子系のアナロジーを用いて考察し、その結果マグノン波束が2種類の非自明な軌道運動を行うことを見出した。具体的にはマグノン波束に対する準古典論的な運動方程式を構築することで自転運動とエッジに沿った軌道運動を行うことを指摘し、これらは運動量空間におけるマグノンバンドの Berry curvature で表されることを発見した。またマグノンの熱ホール効果を我々の理論により考察した結果、熱ホール伝導率も運動量空間の Berry curvature で表されることがわかったが、先行研究とは異なる結果が得られた。この違いは線形応答理論からの解析により、マグノンの軌道運動に由来していることが明らかになった。

本論文の構成は次の通りである。まず2章では本研究の背景となる波束の運動の準古典論と線形応答理論について、電子系の場合の先行研究を簡単にレビューし、このアナロジーを用いて3章ではマグノン系の場合の波束の運動について考察し、マグノン波束が自転運動とエッジに沿った運動を行うことを示す。次に4章ではこのマグノンのエッジカレントが熱ホール効果を起こすことを述べた後、先行研究との比較を行いその違いを線形応答理論を用いて考察する。そして5章では我々の結果を具体的な系である $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ に適用し、実際に軌道角運動量と熱ホール伝導率を計算する。また、実験でよく知られている YIG 中のスピン波についても適用可

²もっとも、質的に異なるキャリアが異なる Seebeck 係数を持つという話ではないので厳密な意味では異なっており、むしろその点で言えば先に発見されたパーマロイの場合が「Seebeck 効果のスピン版」に当てはまる。しかしながら、パーマロイの場合は磁性金属であり、スピン流は伝導電子によって担われるもののその平均自由行程は図中の Pt 端子間の距離よりはるかに短く、にも関わらず上で述べたような結果が得られており、理論的にはまだよくわかっておらず、現在も議論されている。

能であることを検討する．最後に 6 章では本論文の結論を述べ、本研究で明らかになったことを簡単にまとめる．また本論文中において計算がやや煩雑になると思われる箇所については付録に記載した．

2 背景

この章では電子系での波束の運動と線形応答理論について簡単に述べる．

2.1 波束の運動

まず D. Xiao らによる波束の運動の準古典論を簡単にレビューする [22]．基本的な考え方は電子の Bloch 状態を用いて電子の波束を作ることである． n 番目のバンドで構築された波束は次のように書ける．

$$|W_0\rangle = \int d\mathbf{k} w(\mathbf{k}, t) |\psi_n(\mathbf{k})\rangle. \quad (41)$$

ここで、 $|\psi_n(\mathbf{k})\rangle$ は n 番目のバンドの Bloch 関数、 $w(\mathbf{k}, t)$ はブリルアンゾーン内で中心波数 $\mathbf{k}_c$ に鋭いピークを持つ関数であり、以下の性質を満たすとする．

$$\mathbf{k}_c = \int d\mathbf{k} \mathbf{k} |w(\mathbf{k}, t)|^2, \quad (42)$$

$$\int d\mathbf{k} f(\mathbf{k}) |w(\mathbf{k}, t)|^2 \approx f(\mathbf{k}_c). \quad (43)$$

ここで $f(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ に関する任意の関数である．また電子の波束は実空間においても重心 $\mathbf{r}_c$ の周りに局在している．

$$\mathbf{r}_c = \langle W | \mathbf{r} | W \rangle. \quad (44)$$

この準古典論的な描像の下で外場中の電子の波束がどのような軌道運動をするかを調べる例として、電子の軌道運動からの磁化への寄与を考えよう．まず外場中のハミルトニアンは次のように書ける．

$$H = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - e\phi(\mathbf{r}). \quad (45)$$

ここで m は電子の質量、 $-e$ ($e > 0$) は素電荷、 $V(\mathbf{r})$ は結晶中の周期ポテンシャル、 $\phi(\mathbf{r})$, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ はそれぞれ外部電場 $\mathbf{E}$ と外部磁場 $\mathbf{B}$ を与えるスカラーポテンシャル、およびベクトルポテンシャルである．このとき電子の波束は以下のような準古典論的な運動方程式に従う [23]．

$$\dot{\mathbf{r}}_n = \frac{\partial \varepsilon_{n\mathbf{k}}}{\hbar \partial \mathbf{k}} - \dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}), \quad (46)$$

$$\dot{\mathbf{k}} = -e(\mathbf{E} + \dot{\mathbf{r}}_n \times \mathbf{B}). \quad (47)$$

ここで $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ は n 番目のバンドの電子のエネルギー、 $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})$ は Berry curvature と呼ばれる量で、以下のように定義される．

$$\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = i \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{k}} \right| \times \left| \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle. \quad (48)$$

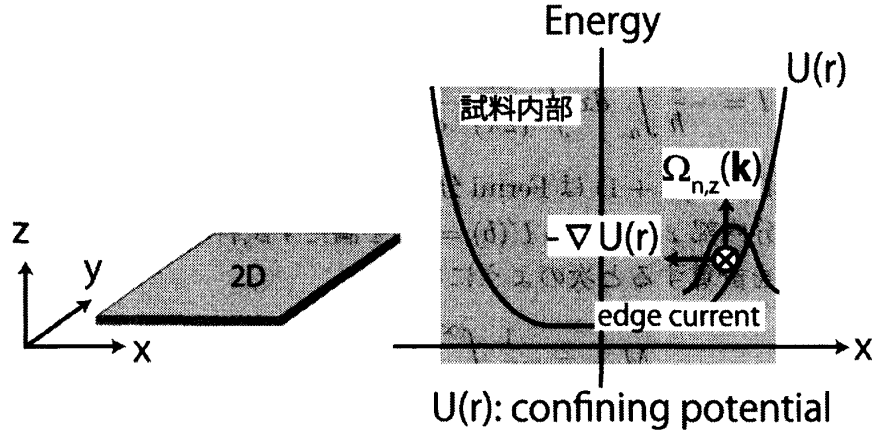


図 6: 閉じ込めポテンシャルの傾きと異常速度. 図では異常速度は紙面に垂直方向に現れる.

ただし, $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ は n 番目の Bloch 関数の周期的な部分であり, $|\psi_n(\mathbf{k})\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|u_n(\mathbf{k})\rangle$ である. さて, 電子の磁化への寄与は大きく分けて 2 種類あることが知られている. 1 つは波束の自転運動, もう 1 つは試料のエッジに沿った運動 (エッジカレント) である. まず前者について述べる. 電子の波束は点ではなく有限の広がりを持っているので一般には自転運動することが考えられる. 実際, この自転運動からの軌道角運動量による磁化への寄与は次のように求められる [24].

$$\mathbf{m}_n(\mathbf{k}) = -\frac{e}{2}\langle W_0 | (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) \times \mathbf{j} | W_0 \rangle, \quad (49)$$

$$= -\frac{ie}{2\hbar} \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{k}} \left| (H(\mathbf{k}) - \varepsilon_{n\mathbf{k}}) \times \left| \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{k}} \right. \right. \right\rangle. \quad (50)$$

ここで, $H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ であり, 式の導出については付録 A に掲載してあるのでそちらを参照されたい. (50) 式の右辺は Berry curvature の形であり³ その値は電子のバンド構造により決まり, 一般には nonzero である. すなわち, 電子の波束は一般には自転運動をしていることがこの式から言える.

もう一つのエッジカレントについては, 系の端の効果により現れる. 端のある有限系では電子は閉じ込めポテンシャル $U(\mathbf{r})$ により試料中に閉じ込められている. 特に試料の端付近では, この閉じ込めポテンシャルがなだらかに変化していると仮定すると, 電子はこのポテンシャルの傾きを感じる. ポテンシャルの傾きは運動方程式の力を表す式 (47) の中に $-\frac{1}{\hbar}\nabla U(\mathbf{r})$ という形で入り, したがって電子の速度を表す式 (46) 中に $\frac{1}{\hbar}\nabla U(\mathbf{r}) \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})$ という異常速度項が現れる. これがエッジカレントである. 例えば 2 次元電子系で y 軸に平行なエッジに注目すると, 閉じ込めポテンシャルは x 方向に変化しており, また $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})$ は z 方向に平行なので, 異常速度はこれらに垂直な方向, すなわち y 方向に現れる (図 6). この時エッジ付近の y 方向の電

³式を見て明らかな通りこれは (48) 式で表される Berry curvature とは異なるものだが, ハミルトニアンが間に挟まったこのような形の項は残念ながら一般的に呼称が存在しない. しかしながら, この項もバンド構造のみで決まる量であり他バンドとのバンド交差が起きる点で極大になるという点で Berry curvature と性質が非常に類似しているので, 本論文ではこのハミルトニアンが間に挟まった形の項も Berry curvature と呼ぶことにする.

流は次のように表せる.

$$I = -\frac{e}{\hbar} \int_a^b dx \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{dU}{dx} f(\varepsilon_{n\mathbf{k}} + U) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}). \quad (51)$$

ここで, $f(\varepsilon) = 1/\exp(\beta(\varepsilon - \mu) + 1)$ は Fermi 分布関数である. また, 積分区間は $U(a) = 0$ を満たすような試料の十分内部 $x = a$ から $U(b) = \infty$ を満たす試料の外側 $x = b$ までである. この電流から生じる磁化を計算すると次のようになる.

$$M_{n,z} = -\frac{1}{e} \int_0^\infty f(\varepsilon) \sigma_n(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (52)$$

ただし,

$$\sigma_n(\varepsilon) = \frac{e^2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} f(\varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_{n\mathbf{k}}) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}) \quad (53)$$

であり, $\Theta(x)$ は階段関数である. 特に注意すべきは, この式 (52) には閉じ込めポテンシャル $U(r)$ には因らず, 先に求めた自転による寄与 (50) と同様に Berry curvature のみで表されていることである. これはエッジが単にエッジカレントの描像を用意するだけのツールに過ぎず, 本質的には磁化が系の内因的な性質により決まる量であることを反映している. 実際, エッジがない場合でも上で求めた磁化の表式は正しいことが J. Shi らにより示されていて [25], ちょうど量子ホール効果がバルク状態 [26], エッジ状態 [27] のどちらの立場からでも解釈できることと類似している.

なお, (50) 式や (52) 式は系の詳細に因らない形をしているため, バンド構造を工夫すれば磁場が存在しなくても自発的に磁化が生じると思われるかもしれないが, これは直観的にもわかるように誤りである. なぜなら, Berry curvature は空間反転対称な系においては $\Omega_n(\mathbf{k}) = \Omega_n(-\mathbf{k})$, 時間反転対称な系においては $\Omega_n(\mathbf{k}) = -\Omega_n(-\mathbf{k})$ が成り立つので, これらが両方守られている系においては $\Omega_n(\mathbf{k}) = 0$ となることが言える. したがってこれらの対称操作の下で系が不変な場合は波束の運動による自発磁化などは生じない.

以上の考察から重要な点をまとめると, 準古典論的な描像の下では電子の波束は自転運動とエッジカレントが存在し, それらは Berry curvature で記述され, 波束の形やエッジの詳細, 閉じ込めポテンシャルなどには因らずバルクの性質のみに依存する intrinsic な効果である, ということである. ただし, 系が空間反転対称性と時間反転対称性を両方保っている場合は Berry curvature は 0 になってしまうので, 最低でもどちらかの対称性を破っている必要がある.

2.2 線形応答理論

次に, 熱輸送係数を求める際に用いられる線形応答理論についての L. Smrčka と P. Středa の理論 [28] を簡単にレビューする. 外部電場 $\mathbf{E}$ と温度勾配 ∇T が存在する下での電流とエネルギー流の関係式は現象論的に次のように書かれる.

$$\mathbf{J} = (L^F)_{11} \left[\mathbf{E} + \frac{T}{e} \nabla \left(\frac{\mu}{T} \right) \right] + (L^F)_{12} \left[T \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \frac{\nabla \psi}{c^2} \right], \quad (54)$$

$$\mathbf{J}_E = (L^F)_{12} \left[\mathbf{E} + \frac{T}{e} \nabla \left(\frac{\mu}{T} \right) \right] + (L^F)_{22} \left[T \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \frac{\nabla \psi}{c^2} \right], \quad (55)$$

ここで μ は化学ポテンシャル, c は光速, $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ は外部電場, $\psi = \mathbf{r} \cdot \nabla\psi$ は温度勾配を dynamical force, すなわちエネルギーに比例した大きさで粒子に直接働く力として取り入れるために仮想的に導入した場で, gravitational field と呼ばれる [29]. $(L^F)_{ij}$ (ただし $i, j = 1, 2$) は熱輸送係数で, 上付き文字 F は後の議論での係数と区別するためにつけたインデックスで, Fermion を表す.

今考える系は磁場中の N 個の独立な電子系で, 1 電子のハミルトニアンは次のように書ける.

$$H_0 = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}). \quad (56)$$

ここで $V(\mathbf{r})$ は結晶中の周期ポテンシャルである. ここに外部電場, および温度勾配がかかる と全ハミルトニアンは次のようになる.

$$H = H_0 + F, \quad (57)$$

$$F = \sum_j (-e)\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}_j + \frac{1}{2} \left\{ H_j, \frac{1}{c^2} \sum_j \mathbf{r}_j \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}) \right\}. \quad (58)$$

ここで添え字 j は j 番目の電子を表し, $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ は反交換関係を表す. この外場 F を摂動として取り扱い, 外場の 1 次の項までの範囲で熱輸送係数を求める. そのためにまず電流の演算子とエネルギー流の演算子を連続方程式から求める. 連続方程式は

$$\frac{\partial n(\mathbf{r})}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [n(\mathbf{r}), H] = -\nabla \mathbf{j}(\mathbf{r}), \quad (59)$$

$$\frac{\partial h(\mathbf{r})}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [h(\mathbf{r}), H] = -\nabla \mathbf{j}_E(\mathbf{r}), \quad (60)$$

であり, $n(\mathbf{r})$ と $h(\mathbf{r})$ はそれぞれ電子密度 $n(\mathbf{r}) = -e \sum_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ とハミルトニアン密度 $h(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_j \{H, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)\}$ である. これらの式から電流演算子とエネルギー流の演算子を求めると, それぞれ外場の 1 次までの範囲で次のようになる.

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}) + \mathbf{j}^{(1)}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}), \frac{1}{c^2} \sum_j \mathbf{r}_j \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}) \right\}, \quad (61)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) &= \mathbf{j}_E^{(0)}(\mathbf{r}) + \mathbf{j}_E^{(1)}(\mathbf{r}), \\ &= \mathbf{j}_E^{(0)}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_j \left\{ \phi(\mathbf{r}_j), \mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}) \right\} \\ &\quad + \frac{1}{4c^2} \sum_j \left(\left\{ \{H, \mathbf{r}_j \cdot \nabla\psi(\mathbf{r})\}, \mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}) \right\} + \left\{ \left\{ \mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}), \mathbf{r}_j \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}) \right\}, H \right\} \right), \end{aligned} \quad (62)$$

$$(63)$$

ただし

$$\mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}) = -\frac{e}{2} \sum_j \{ \mathbf{v}_j, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \}, \quad (64)$$

$$\mathbf{j}_E^{(0)}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2e} \{ H, \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) \}. \quad (65)$$

である。測定可能な物理量は量子力学的平均と熱平均をとったもの、すなわち

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \text{Tr}[g(H)\mathbf{j}(\mathbf{r})] \\ &= \text{Tr}[f_0(H)\mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r})] + \text{Tr}[f_1(H)\mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r})] + \text{Tr}[f_0(H)\mathbf{j}^{(1)}(\mathbf{r})], \end{aligned} \quad (66)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_E &= \text{Tr}[g(H)\mathbf{j}_E(\mathbf{r})] \\ &= \text{Tr}[f_0(H)\mathbf{j}_E^{(0)}(\mathbf{r})] + \text{Tr}[f_1(H)\mathbf{j}_E^{(0)}(\mathbf{r})] + \text{Tr}[f_0(H)\mathbf{j}_E^{(1)}(\mathbf{r})], \end{aligned} \quad (67)$$

である。ここで、 $g(H)$ は密度行列 $g(H) = f_0(H) + f_1(H)$ 、 $f_0(H)$ は平衡状態での密度行列であり、 $f_1(H)$ は外場による平衡状態からのずれである。またこの2つの式中のトレースは多体波動関数に関するものである。(66), (67) 式のうち第一項は外場によらない量であり平衡状態では0である。一方、第二項の $j^{(0)}, j_E^{(0)}$ から計算される熱輸送係数を $(S^F)_{ij}^{\alpha\beta}$ 、第三項の $j^{(1)}, j_E^{(1)}$ から計算される熱輸送係数を $(M^F)_{ij}^{\alpha\beta}$ (ただし $\alpha, \beta = x, y$) とすると、これらはそれぞれ次のように表される。

$$(S^F)_{ij}^{\alpha\beta} = i\hbar \int f(\eta) \text{Tr} \left(j_i^\alpha \frac{dG^+}{d\eta} j_j^\beta \delta(\eta - H) - j_i^\alpha \delta(\eta - H) j_j^\beta \frac{dG^-}{d\eta} \right) d\eta, \quad (68)$$

$$(M^F)_{11}^{\alpha\beta} = 0, \quad (69)$$

$$(M^F)_{12}^{\alpha\beta} = -\frac{e}{2} \int f(\eta) \text{Tr}[\delta(\eta - H)(r^\alpha v^\beta - r^\beta v^\alpha)] d\eta, \quad (70)$$

$$\begin{aligned} (M^F)_{22}^{\alpha\beta} &= \int \eta f(\eta) \text{Tr} \delta(\eta - H)(r^\alpha v^\beta - r^\beta v^\alpha) d\eta \\ &\quad + \frac{i\hbar}{4} \int f(\eta) \text{Tr} \delta(\eta - H)[v^\alpha, v^\beta] d\eta. \end{aligned} \quad (71)$$

ここで、 $j_1^\alpha = -ev^\alpha$ 、 $j_2^\alpha = \{v^\alpha, H\}/2$ 、 $f(\eta) = (e^{(\eta-\mu)/k_B T} + 1)^{-1}$ 、 $G^\pm(\eta) = (\eta - H \pm i\epsilon)^{-1}$ は Green 関数であり、(68) 式以降のトレースは全て1体の波動関数に関するものである。これらの式(68)-(71)と $(L^F)_{ij}^{\alpha\beta} = (S^F)_{ij}^{\alpha\beta} + (M^F)_{ij}^{\alpha\beta}$ の関係式により、トータルの熱輸送係数が求められる。この結果から得られる重要な事実は、温度勾配の下では通常久保公式で計算される熱輸送係数(68)式だけでは不十分で、それに補正項 $(M^F)_{ij}^{\alpha\beta}$ が必要であるということである。

ここまでは L. Smrčka と P. Středa の仕事だが、この結果から後の議論のための便利な式をいくつか導くことにする。まず式(68)のトレース計算を実行すると、例えば $(S^F)_{12}^{\alpha\beta}$ は次のように書ける。

$$(S^F)_{12}^{\alpha\beta} = -\frac{e}{\hbar V} \text{Im} \sum_\lambda \left(f(\varepsilon_\lambda) \left\langle \frac{\partial u_\lambda}{\partial k_\alpha} \middle| (H + \varepsilon_\lambda) \middle| \frac{\partial u_\lambda}{\partial k_\beta} \right\rangle \right). \quad (72)$$

ここで V は系の体積、 λ はバンド指数 n と波数 $\mathbf{k}$ の両方を含む指数である。次に、絶対零度 ($T = 0$) では $(L^F)_{12}^{\alpha\beta} = \frac{\mu}{e} (L^F)_{11}^{\alpha\beta}$ という関係が知られており、 $(M^F)_{11}^{\alpha\beta} = 0$ なので $(L^F)_{12}^{\alpha\beta}$ は次のように書ける。

$$(L^F)_{12}^{\alpha\beta} = -\frac{2e\mu}{\hbar V} \sum_\lambda \Theta(\mu - \varepsilon_\lambda) \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_\lambda}{\partial k_\alpha} \middle| \frac{\partial u_\lambda}{\partial k_\beta} \right\rangle. \quad (73)$$

ここで、 $T = 0$ では Fermi 分布関数が階段関数になることを利用した。すると、式(70)と

$(L^F)_{ij}^{\alpha\beta} = (S^F)_{ij}^{\alpha\beta} + (M^F)_{ij}^{\alpha\beta}$ という関係式を使うと、次の公式が得られる。

$$\begin{aligned}
 & \text{Tr}[\delta(\mu - H)(r^\alpha v^\beta - r^\beta v^\alpha)] \\
 &= \frac{d}{d\mu} \int_{-\infty}^{\mu} \text{Tr}[\delta(\eta - H)(r^\alpha v^\beta - r^\beta v^\alpha)] d\eta \\
 &= \frac{2}{-e} \frac{d}{d\mu} (M^F)_{12}^{\alpha\beta} \Big|_{T \rightarrow 0} \\
 &= -\frac{2}{\hbar V} \frac{d}{d\mu} \sum_{\lambda} \Theta(\mu - \varepsilon_{\lambda}) \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \Big| (H + \varepsilon_{\lambda} - 2\mu) \Big| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle. \tag{74}
 \end{aligned}$$

この関係式の重要な点は、式の中に分布関数の性質が入っていないので扱う粒子が Fermi 粒子でも Bose 粒子でも適用できるという点である。この式 (74) は次の章の計算で用いられる。

3 マグノンの軌道角運動量

この章ではマグノンの軌道角運動量を電子系のアナロジーにより、準古典論的な運動方程式を用いて導出する。マグノンは電子といくつかの点で異なり、例えばマグノンには電荷が無いので外部電場によって粒子に力を直接及ぼすことはできない。そこで我々は系の端に存在する、マグノンに対する閉じ込めポテンシャル $U(\mathbf{r})$ の傾きを力として取り入れることで準古典論的な運動方程式を立てることにする。マグノン波束に対する運動方程式はしたがって次のように書ける。

$$\dot{\mathbf{r}}_n = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} - \dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}), \tag{75}$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -\nabla U(\mathbf{r}). \tag{76}$$

ここで $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ は n 番目のマグノンバンドのエネルギーを表し、 $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})$ は運動量空間におけるマグノンの Berry curvature で

$$\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = i \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{k}} \Big| \times \Big| \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle \tag{77}$$

と定義され、 $u_n(\mathbf{k})$ は n 番目のマグノンバンドの Bloch 関数である。以後簡単のため話を 2 次元に限るが、3 次元への拡張は容易に実行できる。式 (75) 中にある異常速度項 $\dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})$ により、エッジ付近を流れるマグノン流密度は次のように書ける。

$$\mathbf{j} = \frac{1}{V} \sum_{n, \mathbf{k}} (\dot{\mathbf{r}}_n)_{\text{anomalous}} \rho(\varepsilon_{n\mathbf{k}}) = \frac{1}{\hbar V} \sum_{n, \mathbf{k}} \rho(\varepsilon_{n\mathbf{k}}) \nabla U(\mathbf{r}) \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}). \tag{78}$$

ここで、 $\rho(\varepsilon) = 1/\exp(\beta(\varepsilon - \mu) - 1)$ は Bose 分布関数である。すると、(51) 式と同じようにしてマグノンのエッジカレントが求められる。例えば y 方向のエッジカレントは次のようになる。

$$\begin{aligned}
 I_y &= \int_a^b j_y dx = - \int_a^b dx \partial_x U(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{\hbar V} \sum_{n, \mathbf{k}} \rho(\varepsilon_{n\mathbf{k}} + U(\mathbf{r})) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}) \right) \\
 &= -\frac{1}{\hbar V} \sum_{n, \mathbf{k}} \int_{\varepsilon_{n\mathbf{k}}}^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}). \tag{79}
 \end{aligned}$$

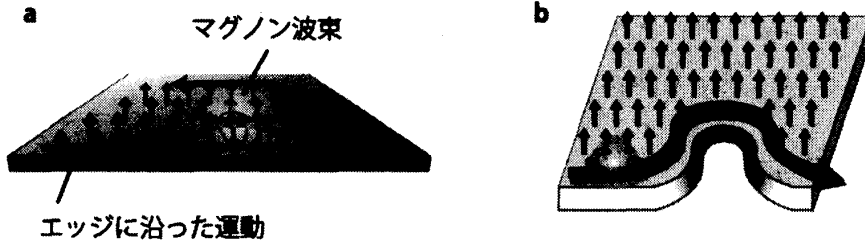


図 7: a: マグノン波束の 2 種類の軌道運動. b: エッジに沿ったマグノン波束の運動.

ただし、積分区間 $[a, b]$ は 2.1 節と同様に、 $U(a) = 0$ なる試料の十分内側 $x = a$ から $U(b) = \infty$ なる試料の十分外側 $x = b$ までとるものとする。 x 方向のカレント I_x も全く同じ形になることは容易に示せる。すると、このエッジカレントによる軌道角運動量⁴ は次のように書ける。

$$l_z^{\text{edge}} = -\frac{2}{\hbar V} \sum_{n, \mathbf{k}} \int_{\varepsilon_{n\mathbf{k}}}^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}). \quad (80)$$

またこれとは別に、マグノン波束も有限の広がりを持っているので 2.1 節で見たような電子系での自転運動と同様にマグノン波束の自転運動も考えられる。自転運動による軌道角運動量は (50) 式と同様に計算可能で、その結果は以下のようにになる。

$$l_z^{\text{self}} = -\frac{2}{\hbar V} \text{Im} \sum_{n, \mathbf{k}} \rho_n \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_x} \left| (H - \varepsilon_{n\mathbf{k}}) \right| \frac{\partial u_n}{\partial k_y} \right\rangle. \quad (81)$$

ただし、 $\rho_n \equiv \rho(\varepsilon_{n\mathbf{k}})$ である。

これら 2 つの結果 (80), (81) はいくつか重要な意味を持つ。まず 1 点目はエッジ付近のマグノン波束は自転運動とエッジに沿った軌道運動をしていることである (図 7a)。これらの軌道角運動量はいずれも波数空間におけるマグノンの Berry curvature で表されており、その値は一般には nonzero である。すなわち、この軌道角運動量はバルクの波動関数の性質のみに起因し、エッジの詳細や閉じ込めポテンシャルの形、波束の形状等には依存しないので、例えばエッジが直線でない場合でもそのエッジに沿ってマグノン波束が運動することが考えられる (図 7b)。

2 点目はどちらも Bose 分布関数 $\times$ Berry curvature という形になっている点である。これについて少し詳しく調べてみよう。まず Berry curvature は (77) 式のように定義されるが、これを変形すると次のように書ける。

$$\begin{aligned} [\Omega_n(\mathbf{k})]_{\alpha} &= \left[i \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{k}} \left| \times \right| \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle \right]_{\alpha}, \\ &= -\text{Im} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_{\beta}} \left| \frac{\partial u_n}{\partial k_{\gamma}} \right\rangle, \end{aligned} \quad (82)$$

ただし $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$, $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ は完全反対称テンソルである。ここで、 $\left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_{\beta}} \left| \frac{\partial u_n}{\partial k_{\gamma}} \right\rangle$ の間に恒等演算子 $\hat{1} = \sum_m |u_m\rangle \langle u_m|$ を挿入し $(\varepsilon_{n\mathbf{k}} - \varepsilon_{m\mathbf{k}}) \langle u_m | \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{k}} \rangle = \langle u_m | \frac{\partial H}{\partial \mathbf{k}} | u_n \rangle$ (ただし $n \neq m$)

⁴軌道角運動量は本来は質量も含まれているのでその意味で言うところの呼び方は正確ではないが、マグノン波束が軌道運動していることを指摘するには位置と速度の外積の期待値を計算すれば十分なので質量の有無はここでは問題にならない。したがって本論文では通常の角運動量の定義から質量を除いたものを改めて“角運動量”と呼ぶことにする。

という関係式を用いると、

$$\text{Im} \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_\beta} \middle| \frac{\partial u_n}{\partial k_\gamma} \right\rangle = \text{Im} \sum_{m(\neq n)} \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_\beta} \middle| u_m \right\rangle \left\langle u_m \middle| \frac{\partial u_n}{\partial k_\gamma} \right\rangle, \quad (83)$$

$$= \text{Im} \sum_{m(\neq n)} \frac{\left\langle u_n \middle| \frac{\partial H}{\partial k_\beta} \middle| u_m \right\rangle \left\langle u_m \middle| \frac{\partial H}{\partial k_\gamma} \middle| u_n \right\rangle}{(\varepsilon_{n\mathbf{k}} - \varepsilon_{m\mathbf{k}})^2}, \quad (84)$$

というよく知られた式が得られる．ここで簡単のため2バンドモデル ($n, m = 1, 2$) を考えると、Berry curvature は2つのバンド間のエネルギー差の2乗 $(\varepsilon_{n\mathbf{k}} - \varepsilon_{m\mathbf{k}})^2$ に比例することが式 (84) から直ちにわかる．すなわち、バンド同士が接近しているようなバンド構造では $\Omega_n(\mathbf{k})$ の値は大きくなる．一方で、Bose 分布関数は Fermi 分布関数と異なり上のバンドの情報も拾うため、式 (80) と (81) の n の和をとる時は上のバンドの Berry curvature も寄与してくる．ところが Berry curvature の総和則 $\sum_n \Omega_n(\mathbf{k}) = 0$ から $\Omega_n(\mathbf{k})$ の符号は上下のバンドで逆になっており、したがって単純にバンドが接近しているだけでは上下のバンド間で Berry curvature の寄与は打ち消しあってしまうので、Fermion の場合と異なりバンド構造に工夫が必要である．幸いなことに最近ではフォトリック結晶のアナロジーで、強磁性体に人工的な周期構造を持たせスピン波の伝播を制御するマグノン結晶 (magnonic crystal) [30] が盛んに研究されており、現段階では1次元的な周期構造が多いが将来的には高次元のマグノン結晶によるバンド制御が期待される．

3点目はマグノンの波束の自転運動についてである．2章の電子系の場合では、この運動は電子のサイクロトロン運動が波束全体で起こっているという解釈が考えられるが、マグノンの場合は当然電荷を持っていないためにローレンツ力によるサイクロトロン運動は考えられず、同じように説明することはできない．したがってこの自転運動は外場による運動ではなく、純粋にマグノンのバンド構造に由来する運動であるといえる．しかしながらこの波束の自転運動に関する直観的な説明はまだ与えられておらず、さらなる追究が必要である．

4点目は同じくマグノン波束の自転運動についてである．マグノンは第1章で少し述べたようにスピンの情報を伝播するものであり、非常に大雑把に見ると $+z$ 方向に一樣に磁化した強磁性体中では、マグノンの波束は全体で $-z$ 方向のスピンの情報を持つ一樣に磁化した剛体のようなものであると見なせる．すると、この磁化した剛体が自転運動を行えば電磁気学によると電気分極を伴うということが考えられる．この効果はスピン軌道相互作用が存在すると大きくなることが予想される．これを用いて電氣的な応答を見ることによりマグノン波束の自転運動を間接的に実験で観測することが考えられるが、本論文の内容を超えるのでここでは深入りしないことにする．

5点目はマグノンのエッジカレントについてである．こちらは波束自体が空間的に移動するので、実験的には Brillouin Light Scattering (BLS) 法という手法で光を用いて観測することが可能である [31]．この BLS 法の特長はマグノン波束の運動を時間分解、空間分解で追うことが可能で、視覚的にマグノン波束がどのように運動しているかが明瞭であるという点である．特に1.2節で少し述べた YIG 中の静磁波はスピン波の平均自由行程が長いので、このエッジに沿った運動が実験で観測できることが期待される．また、次の章で見るとこのマグノンのエッジカレントは熱ホール効果と密接な関係があり、準古典論的な描像ではこのエッジカレントにより熱ホール効果が引き起こされることがわかる．

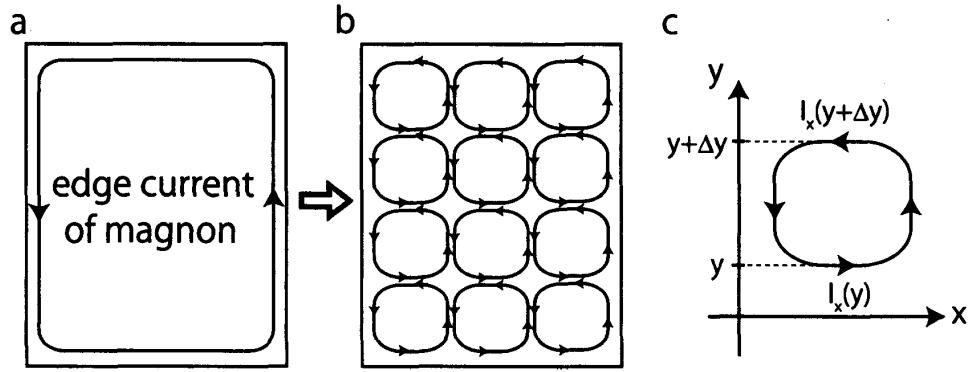


図 8: a: エッジカレントの概略図. b: エッジカレントと等価な円状のカレント. エッジ以外の部分は隣同士でキャンセルする. c: 1つの円状カレントに対して $y = y$ と $y = y + \Delta y$ での x 方向のカレントに注目した図. 温度勾配がなければもちろん $I_x(y) - I_x(y + \Delta y) = 0$ である.

4 マグノンの熱ホール効果

この章ではまず前章で述べたマグノンのエッジカレントが熱ホール効果を引き起こすことを示し, 先行研究と異なる結果が得られることを述べる. 次にこの先行研究を修正した線形応答理論を用いて同様にマグノンの熱ホール効果を議論することにより, 先行研究の熱輸送係数には含まれていなかった項が存在し, それはマグノンの軌道運動に由来していることを示す.

4.1 準古典論

前章で述べたマグノンの軌道運動のうち, 特にマグノンのエッジカレントは熱ホール効果を引き起こす. これについて説明する. まずマグノンの波束は前章で見たように, 試料のエッジに沿って運動している (図 8a). この軌道運動は図 8b のように小さな円流の集まりとしてみることができる. この円のサイズはマグノンのコヒーレンス長で決まると見なせる. 円流の表式は I_x, I_y 共に同じ表式で, 次のように与えられていた.

$$I_{i=x,y} = -\frac{1}{\hbar V} \sum_{n,k} \int_{\epsilon_{nk}}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}). \quad (85)$$

いま, 1つの円流に着目する. 温度勾配あるいは化学ポテンシャルの勾配が存在すると, この円流は (85) 式中の Bose 分布関数を通じて空間依存性を持つ. このときの x, y 方向のカレント密度はそれぞれ次のようになる.

$$j_x = (I_x(x, y) - I_x(x, y + \Delta y)) / \Delta y = -\frac{\partial I_x}{\partial y}, \quad (86)$$

$$j_y = (I_y(x + \Delta x, y) - I_y(x, y)) / \Delta x = \frac{\partial I_y}{\partial x}. \quad (87)$$

したがって一般にマグノン流密度は次のように書ける.

$$\mathbf{j}^{\text{edge}} = \nabla \times \frac{1}{\hbar V} \sum_{n,k} \int_{\epsilon_{nk}}^{\infty} \rho(\epsilon) \Omega_n(\mathbf{k}) d\epsilon. \quad (88)$$

同様に、マグノンにより運ばれるエネルギー流密度も次のように書ける。

$$\mathbf{j}_E^{\text{edge}} = \nabla \times \frac{1}{\hbar V} \sum_{n, \mathbf{k}} \int_{\varepsilon_{n\mathbf{k}}}^{\infty} \varepsilon \rho(\varepsilon) \Omega_n(\mathbf{k}) d\varepsilon. \quad (89)$$

この2式(88), (89)により、種々の熱輸送係数が計算できる。例えば温度勾配を y 方向にかけたときの x 方向のエッジカレントとエネルギーカレントはそれぞれ次のように求められる。

$$(j^{\text{edge}})_x^{\nabla T} = T \partial_y \left(\frac{1}{T} \right) \frac{1}{\hbar V} \sum_{n, \mathbf{k}} \int_{\varepsilon_{n\mathbf{k}}}^{\infty} (\varepsilon - \mu) \left(\frac{d\rho}{d\varepsilon} \right) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}) d\varepsilon, \quad (90)$$

$$(j_E^{\text{edge}})_x^{\nabla T} = T \partial_y \left(\frac{1}{T} \right) \frac{1}{\hbar V} \sum_{n, \mathbf{k}} \int_{\varepsilon_{n\mathbf{k}}}^{\infty} \varepsilon (\varepsilon - \mu) \left(\frac{d\rho}{d\varepsilon} \right) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}) d\varepsilon. \quad (91)$$

同様に、化学ポテンシャル μ の勾配が存在する下では次のようになる。

$$(j^{\text{edge}})_x^{\nabla \mu} = -\partial_y \mu \frac{1}{\hbar V} \sum_{n, \mathbf{k}} \int_{\varepsilon_{n\mathbf{k}}}^{\infty} \left(\frac{d\rho}{d\varepsilon} \right) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}) d\varepsilon, \quad (92)$$

$$(j_E^{\text{edge}})_x^{\nabla \mu} = -\partial_y \mu \frac{1}{\hbar V} \sum_{n, \mathbf{k}} \int_{\varepsilon_{n\mathbf{k}}}^{\infty} \varepsilon \left(\frac{d\rho}{d\varepsilon} \right) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}) d\varepsilon. \quad (93)$$

ここで熱流を $\mathbf{j}_Q \equiv \mathbf{j}_E - \mu \mathbf{j}$ と定義し、熱輸送係数を $L_{ij} (i, j = 1, 2)$ としてマグノン流と熱流の関係式を

$$\mathbf{J} = L_{11} [-\nabla U - \nabla \mu] + L_{12} [T \nabla \left(\frac{1}{T} \right)], \quad (94)$$

$$\mathbf{J}_Q = L_{12} [-\nabla U - \nabla \mu] + L_{22} [T \nabla \left(\frac{1}{T} \right)], \quad (95)$$

と書けば、

$$(j_Q^{\text{edge}})_x^{\nabla T} = T \partial_y \left(\frac{1}{T} \right) \frac{1}{\hbar V} \sum_{n, \mathbf{k}} \int_{\varepsilon_{n\mathbf{k}}}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^2 \left(\frac{d\rho}{d\varepsilon} \right) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}) d\varepsilon, \quad (96)$$

$$(j_Q^{\text{edge}})_x^{\nabla \mu} = -\partial_y \mu \frac{1}{\hbar V} \sum_{n, \mathbf{k}} \int_{\varepsilon_{n\mathbf{k}}}^{\infty} (\varepsilon - \mu) \left(\frac{d\rho}{d\varepsilon} \right) \Omega_{n,z}(\mathbf{k}) d\varepsilon. \quad (97)$$

であるからこれらの式からすべての熱輸送係数が計算可能で、その結果は以下のような簡単な形で書ける。

$$L_{ij}^{xy} = -\frac{1}{\hbar V \beta^q} \sum_{n, \mathbf{k}} \Omega_{n,z}(\mathbf{k}) c_q(\rho_n), \quad (98)$$

ただし $c_q(\rho_n)$ は

$$c_q(\rho_n) = \int_{\varepsilon_{n\mathbf{k}}}^{\infty} d\varepsilon (\beta(\varepsilon - \mu))^q \left(-\frac{d\rho}{d\varepsilon} \right) = \int_0^{\rho_n} \left(\log \frac{1+t}{t} \right)^q dt, \quad (99)$$

であり、 $\beta = 1/k_B T$, $q = i + j - 2$, $\rho_n \equiv \rho(\varepsilon_{n\mathbf{k}})$ である。具体的には、 $c_0(\rho) = \rho$, $c_1(\rho) = (1 + \rho) \log(1 + \rho) - \rho \log \rho$, $c_2(\rho) = (1 + \rho) \left(\log \frac{1+\rho}{\rho} \right)^2 - (\log \rho)^2 - 2\text{Li}_2(-\rho)$ である。 $\text{Li}_n(z)$

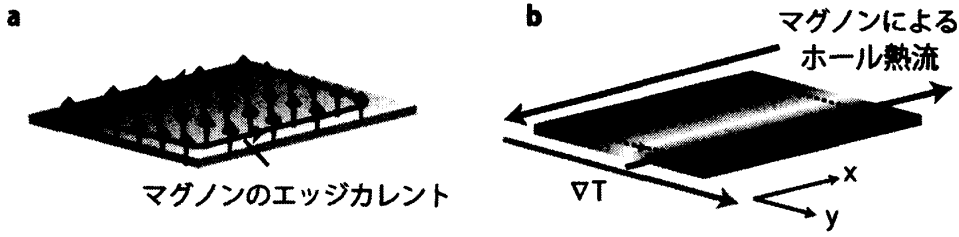


図 9: a: 温度勾配が存在しないときのマグノンのエッジカレント. 正味のカレントは当然 0 である. b: マグノンの熱ホール効果の直観的な説明. 温度勾配によってそれに垂直な方向のカレントの量がキャンセルしなくなり正味の熱流が生じる.

は前節にも出てきた polylogarithm function で, Bose 分布関数を含む積分でよく現れる関数である. 以上の結果から熱ホール伝導率は容易に計算できて, 次のようになる.

$$\kappa^{xy} = L_{22}^{xy}/T = \frac{2k_B^2 T}{\hbar V} \sum_{n,k} c_2(\rho_n) \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_x} \left| \frac{\partial u_n}{\partial k_y} \right. \right\rangle. \quad (100)$$

この節で重要なことは, 準古典論的な解釈ではマグノンの熱ホール効果は試料の端を運動するエッジカレントにより引き起こされるということである. この描像によるマグノンのホール効果の直観的な理解の仕方は次の通りである. まず温度勾配が存在しない場合は波束はエッジに沿った運動を行っているだけで, 正味のカレントは 0 である (図 9a). ここに温度勾配を y 方向にかけると, $+x$ 方向のカレントと $-x$ 方向のカレントがキャンセルしなくなり, その結果正味の熱流が温度勾配に垂直な方向に生じ, 熱ホール効果を引き起こすのである (図 9b). またこの考察からもわかるように, 温度勾配はマグノンに対して直接力を及ぼして進路を曲げることはできず (すなわち dynamical force ではなく), 粒子の分布関数を通じて Hall 効果を引き起こす statistical force であるという点も重要である.

4.2 先行研究

マグノンの熱ホール効果は 2010 年に理論は H. Katsura ら [32] により予言され, 実験は Y. Onose ら [33] によって観測された. 実験で用いられた具体的な系の説明は次章に譲ることにして, 本節では Katsura らによる久保公式を用いたホール熱伝導率の計算 [32] について簡単に紹介する. なお, 次節で示すようにこの先行研究の結果は後の (105)-(107) 式で定義される $(M^B)_{ij}^{\alpha\beta}$ による補正項を加える必要がある.

まずハミルトニアンは一般的な形 $H = \sum_{\mathbf{k}} b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) H_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}) b_{\beta}(\mathbf{k})$ を仮定する. ここで $b_{\alpha}(\mathbf{k})$ 等は boson の生成消滅演算子の Fourier 変換である. 文献 [32] 中では, エネルギーカレントは

$$\mathbf{j}_E = \frac{1}{2\hbar V} \sum_{\mathbf{k}} b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) \left(\partial_{\mathbf{k}} (H(\mathbf{k}))^2 \right)_{\alpha\beta} b_{\beta}(\mathbf{k}) \quad (101)$$

と定義されている. ここで V は系の体積である. 熱流の定義式は $\mathbf{j}_Q = \mathbf{j}_E - \mu \mathbf{j}$ であるから化学ポテンシャルを 0 とするとエネルギー流と熱流の表式は一致するので, 熱ホール伝導率は久

久保公式

$$\bar{\kappa}^{xy} = \frac{V}{T} \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda \langle j_E^x(-i\lambda) j_E^y(t) \rangle_{\text{th}} \quad (102)$$

で計算される。ただし、 $\langle \dots \rangle_{\text{th}}$ は熱平均を表す。この具体的な計算の流れは TKNN(Thouless-Kohmoto-Nightingale-Nijs) 公式 [26] の導出と同様だが、詳細は付録 B に掲載しここでは結果のみを書くと、マグノンの熱ホール伝導率 $\bar{\kappa}^{xy}$ は次のように書かれる。

$$\bar{\kappa}^{xy} = \frac{1}{2\hbar T} \text{Im} \sum_n \int_{\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \rho(\varepsilon_{n\mathbf{k}}) \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_x} \left| (H_{\text{SW}}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{n\mathbf{k}})^2 \right| \frac{\partial u_n}{\partial k_y} \right\rangle. \quad (103)$$

これと実験のデータを重ねてプロットしたのが参考文献 [33] 内の図 4(C) である。温度が 20[K] と低温でフィットされているのは $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ のキュリー温度が $T_c = 70[\text{K}]$ であることと、この試料ではマグノンの平均自由行程が短いこと ($\sim 3.6[\text{nm}]$)、およびマグノン間の相互作用を無視してマグノンの最低バンドからの寄与が支配的であるという近似を行うことが主な理由である [33]。

4.3 修正された線形応答理論

久保公式による先行研究の結果式 (103) と我々の準古典論で得られた式 (100) を比較すると、表式が若干異なっていることがわかる。具体的には、我々の結果は Bose 分布関数の代わりに $c_2(\rho_n)$ という関数になっており、また Berry curvature の形はブラケットの間にハミルトニアンが挟まっていない形になっている。結論から言うと温度勾配が存在する下では先行研究の計算方法では不十分で、修正が必要であることを我々は見出した。以下ではその詳細を見るために 2.2 節で取り上げた熱輸送に関する線形応答理論を用いてマグノンの熱ホール効果を考察し、通常の久保公式で得られる熱輸送係数には補正項が必要であることを示し、さらに先行研究との違いはマグノンの軌道運動に由来していることを示す。基本的な処方箋は 2.2 節と同じで、異なるのは分布関数と外場である。その際マグノンは電荷を持たないのでエッジ付近の閉じ込めポテンシャルの傾きを外場として取り入れることにする。2.2 節と同様に、熱輸送係数 $(L)_{ij}^{\alpha\beta} = (S)_{ij}^{\alpha\beta} + (M)_{ij}^{\alpha\beta}$ のうち、通常の久保公式で計算される熱輸送係数を $(S)_{ij}^{\alpha\beta}$ 、補正項を $(M)_{ij}^{\alpha\beta}$ と書くことにすると、マグノンの場合はそれぞれ次のように書ける。

$$(S^B)_{ij}^{\alpha\beta} = i\hbar \int \rho(\eta) \text{Tr} \left(j_i^\alpha \frac{dG^+}{d\eta} j_j^\beta \delta(\eta - H) - j_i^\alpha \delta(\eta - H) j_j^\beta \frac{dG^-}{d\eta} \right) d\eta, \quad (104)$$

$$(M^B)_{11}^{\alpha\beta} = 0, \quad (105)$$

$$(M^B)_{12}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int \rho(\eta) \text{Tr} [\delta(\eta - H) (r^\alpha v^\beta - r^\beta v^\alpha)] d\eta, \quad (106)$$

$$\begin{aligned} (M^B)_{22}^{\alpha\beta} &= \int \eta \rho(\eta) \text{Tr} \delta(\eta - H) (r^\alpha v^\beta - r^\beta v^\alpha) d\eta \\ &\quad + \frac{i\hbar}{4} \int \rho(\eta) \text{Tr} \delta(\eta - H) [v^\alpha, v^\beta] d\eta. \end{aligned} \quad (107)$$

ただし、ここでは $j_1^\alpha = v^\alpha$ で、 j_2^α は $j_2^\alpha = \{v^\alpha, H\}/2$ のままである。また、上付き文字 B は Boson であることを表し、 $\rho(\eta)$ は Bose 分布関数である。2.2 節で示したように、これらはマグノ

ンの Bloch 波動関数を用いて表すことができる。その際、 $(S^B)_{ij}^{\alpha\beta}$ については (72) 式と同様に計算できるが、 $(M^B)_{12}^{\alpha\beta}$ と $(M^B)_{22}^{\alpha\beta}$ はナイーブにトレースを計算すると Bloch 関数で位置演算子 r の期待値をとることになり、これは well-defined な量ではないのでうまくいかないが [22], 先に 2.2 節で求めておいた公式 (74) を用いることで計算可能である。計算の詳細は付録 C で述べることにして、ここでは結果だけを述べると、マグノンの場合の熱輸送係数 $L^B (= S^B + M^B)$ は Bloch 関数でそれぞれ次のように表される。

$$(L^B)_{11}^{\alpha\beta} = \frac{2}{\hbar V} \text{Im} \sum_{n,k} \rho_n \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_\alpha} \left| \frac{\partial u_n}{\partial k_\beta} \right. \right\rangle, \quad (108)$$

$$(L^B)_{12}^{\alpha\beta} = \frac{2}{\hbar V} \text{Im} \sum_{n,k} (\mu \rho_n + k_B T c_1(\rho_n)) \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_\alpha} \left| \frac{\partial u_n}{\partial k_\beta} \right. \right\rangle, \quad (109)$$

$$(L^B)_{22}^{\alpha\beta} = \frac{2}{\hbar V} \text{Im} \sum_{n,k} \left(\mu^2 \rho_n + 2\mu k_B T c_1(\rho_n) + (k_B T)^2 c_2(\rho_n) \right) \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_\alpha} \left| \frac{\partial u_n}{\partial k_\beta} \right. \right\rangle. \quad (110)$$

ここで、 $c_q(\rho_n)$ は (99) 式で定義される関数であった。これらの式 (108)-(110) を用いて Hall 熱伝導率 $\kappa^{xy} = ((L^B)_{22}^{xy} - 2\mu(L^B)_{12}^{xy} + \mu^2(L^B)_{11}^{xy})/T$ を計算すると、次のように書ける。

$$\kappa^{xy} = (L^B)_{22}^{xy}/T = \frac{2k_B^2 T}{\hbar V} \sum_{n,k} c_2(\rho_n) \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_x} \left| \frac{\partial u_n}{\partial k_y} \right. \right\rangle. \quad (111)$$

この結果は 4.1 節で準古典論的に求めた表式 (100) と一致しており、両者の理論の整合性が確かめられる。また 4.2 節で見た先行研究の結果を比較すると、Katsura らの表式 (103) は今の議論での熱輸送係数 $L^B (= S^B + M^B)$ のうち S^B , すなわち外場に対して分布関数がずれたことに対する応答を計算する通常の久保公式により求められる量の上に相当していることがわかる。一方、この補正項に当たる M^B は例えば (106) 式を見るとわかるようにマグノンの角運動量 $(\mathbf{r} \times \mathbf{v})$ に相当している。実際、 $(M^B)_{12}^{\alpha\beta}$ は 3 章で求めたマグノンの 2 種類の角運動量、すなわち自転の角運動量 l_z^{self} とエッジカレントによる角運動量 l_z^{edge} の和に等しいことが容易に確かめられる。

$$2(M^B)_{12}^{\alpha\beta} = l_z^{\text{self}} + l_z^{\text{edge}} \quad (112)$$

ここで、左辺の係数 2 は (106) 式の prefactor の 1/2 から生じたものである。 $(M^B)_{22}^{\alpha\beta}$ に関しては (107) 式の第二項は速度同士の外積の形をしており直観的な説明をつけにくい量であるが、第一項はエネルギー $\times$ 角運動量という形をしており、やはり角運動量に関与していることが窺える。

5 応用例

5.1 $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ の場合

以上の結果を Onose らの実験で用いられた $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ という物質の場合に適用してみよう。そのために以下ではまず $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ の基本的な性質を紹介する。 $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ は pyrochlore 型の構造を持つ強磁性体 Mott 絶縁体で、[111] 方向から見るとカゴメ格子と三角格子のスタッキン

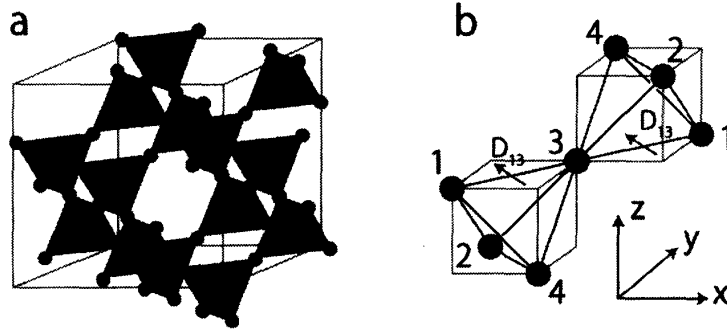


図 10: a: $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ の結晶構造. [111] 面がカゴメ格子と三角格子のスタッキングになっている. b: 1 つの V 原子に着目したときの pyrochlore 格子の原子配置.

グになっている (図 10a). また対称性からこの系は Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用と呼ばれるスピン軌道相互作用が存在し, 系のハミルトニアンは次のように書ける.

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\langle i,j \rangle} -J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) - g\mu_B \mathbf{H} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i. \quad (113)$$

ここで, $\langle i,j \rangle$ は nearest-neighbor の和, J は交換相互作用のカップリング定数, $\mathbf{D}_{ij}$ は DM ベクトル, g は g 因子, μ_B は Bohr 磁子, $\mathbf{H}$ は外部磁場を表し, 2 次元カゴメ格子に垂直な方向 (すなわち (111) 方向) を z 方向とすると $\mathbf{H} \parallel \hat{z}$ である. 通常この DM 相互作用は反強磁性体中で他の相互作用と競合する形で存在するが, この系は特殊な場合で一つのボンドに着目すると DM ベクトルのベクトル和がちょうど 0 になっており, したがって基底状態は強磁性ハイゼンベルグモデルで記述される. 文献 [33] にあるように, このハミルトニアンからスピン波ハミルトニアンを計算する手順は次の通りである. まずスピンの揺らぎの 2 次までの寄与を考慮すると, DM ベクトルは z 成分のみを考慮すればよいので, ハミルトニアンは次のように変形される⁵.

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= \sum_{\langle i,j \rangle} -J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D_{ij}^z (S_i^x S_j^y - S_i^y S_j^x) - g\mu_B \frac{H}{6} (S_i^z + S_j^z) \\ &= \sum_{\langle i,j \rangle} -\frac{J_{ij}}{2} \left(e^{-i\phi_{ij}} S_i^+ S_j^- + e^{i\phi_{ij}} S_i^- S_j^+ \right) - JS_i^z S_j^z - \frac{H}{6} (S_i^z + S_j^z). \end{aligned} \quad (114)$$

ただし, $J_{ij} = \sqrt{J^2 + (D_{ij}^z)^2}$, $\phi_{ij} = \arctan(D_{ij}^z/J)$, $S_i^\pm \equiv S_i^x \pm iS_i^y$ である. 1 章と同様に Holstein-Primakoff 変換

$$S_i^z = S - b_i^\dagger b_i, S_i^+ = (2S - b_i^\dagger b_i)^{1/2} b_i, S_i^- = b_i^\dagger (2S - b_i^\dagger b_i)^{1/2} \quad (115)$$

を行うと, ハミルトニアンは次のように書ける.

$$H_{\text{eff}} \simeq \sum_{\langle i,j \rangle} -J_{ij} S \left(e^{-i\phi_{ij}} b_i^\dagger b_j + e^{i\phi_{ij}} b_j^\dagger b_i \right) + \left(JS + \frac{H}{6} \right) (b_i^\dagger b_i + b_j^\dagger b_j). \quad (116)$$

⁵揺らぎの 1 次からの寄与は基底状態が強磁性であるためキャンセルする. また 2 次からの寄与についてはいま基底状態のスピンが z 方向に向いているので揺らぎは x, y 方向であり, それらの外積は z 方向であるため DM ベクトルも z 成分だけを考えればよい.

ただし $S = 1/2$ は V 原子のスピンである. さらにこれに Fourier 変換

$$b_{\mathbf{R}+\delta_m} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}+\delta_m)} b_m(\mathbf{k}) \quad (117)$$

を施すとスピンハミルトニアンが得られる. ここで, N は単位胞の総数, $\mathbf{R}$ は各単位胞中のサイト 1 (図 10b) の位置, m は副格子のインデックスで, 今の場合 δ_m は次のように与えられる.

$$\delta_1 = 0, \delta_2 = A(\hat{e}_y - \hat{e}_z), \delta_3 = A(\hat{e}_x + \hat{e}_y), \delta_4 = A(\hat{e}_x - \hat{e}_z) \quad (118)$$

ここで, $\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z$ は x, y, z 方向の単位ベクトル, $A = a/4$ で a は $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ の格子定数である. したがって, 運動量空間でのスピンハミルトニアンは $\Psi^\dagger(\mathbf{k}) H_{\text{SW}} \Psi(\mathbf{k})$ (ただし $\Psi(\mathbf{k}) = (b_1(\mathbf{k}), b_2(\mathbf{k}), b_3(\mathbf{k}), b_4(\mathbf{k}))^T$) と表したときに, 次のように書ける.

$$H_{\text{SW}}(\mathbf{k}) = 6JS + g\mu_B H - 2JS\Lambda(\mathbf{k}, \{\phi_{ij}\}), \quad (119)$$

$$\Lambda(\mathbf{k}, \{\phi_{ij}\}) = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi_{12}} \frac{\cos(k_y - k_z)A}{\cos \phi_{12}} & e^{-i\phi_{13}} \frac{\cos(k_x + k_y)A}{\cos \phi_{13}} & e^{-i\phi_{14}} \frac{\cos(k_z - k_x)A}{\cos \phi_{14}} \\ & 0 & e^{-i\phi_{23}} \frac{\cos(k_x + k_z)A}{\cos \phi_{23}} & e^{-i\phi_{24}} \frac{\cos(k_x - k_y)A}{\cos \phi_{24}} \\ & & 0 & e^{i\phi_{43}} \frac{\cos(k_y + k_z)A}{\cos \phi_{43}} \\ & & & 0 \end{pmatrix}. \quad (120)$$

ただし (120) 式の空白部分は全体がエルミート行列になるように決定される.

次にこの系でマグノン波束の角運動量を見積もってみよう. (81) 式においてバンドの和は最低バンドからの寄与が最も大きいので $n = 1$ のみを考える. この最低エネルギーのマグノンバンドの分散は波数が小さな領域 ($k = 0$ 付近) では $\varepsilon_{1\mathbf{k}} \sim 2JSA^2k^2 + g\mu_B H$ と書けるので, この場合はマグノンの有効質量 m_n^* が導入できて, $m_n^* \equiv \hbar^2(\partial^2 \varepsilon_{n\mathbf{k}}/\partial k^2)^{-1}$ と定義することができる. これを用いると $\langle \mathbf{r} \times \mathbf{v} \rangle$ ではなく, 通常の軌道角運動量 $\langle \mathbf{r} \times \mathbf{p} \rangle$ を計算することができる (p. 596 脚注参照). また最低バンドからの Berry curvature は Onose らの計算 [33] によると次のように与えられる.

$$\Omega_{1,z}(\mathbf{k}) = -2\text{Im} \left\langle \frac{\partial u_1}{\partial k_x} \left| \frac{\partial u_1}{\partial k_y} \right. \right\rangle \simeq -\frac{A^4}{8\sqrt{2}} \frac{D}{J} n_z (k_x^2 + k_y^2 + 2k_z^2). \quad (157)$$

ここで D は DM ベクトルの大きさである. すると, まず自転の角運動量は (81) 式から 1 ユニットセルあたり

$$L_z^{\text{self}} = -\frac{JSm_1^*}{\hbar A} \frac{D}{J} \frac{1}{32\pi^{3/2}} \frac{1}{(\beta JS)^{5/2}} \text{Li}_{\frac{5}{2}}(e^{-\beta g\mu_B H}). \quad (121)$$

と解析的に書けるので, これを計算すると $H = 1.0[\text{T}]$ のとき $L_z^{\text{self}} \simeq -0.009\hbar$ となる. ここで, $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ のユニットセルの体積は $3.86[\text{\AA}^3]$ であり, 他のパラメータは以下のものを用いた: $m_1^* = \hbar^2(\partial^2 \varepsilon_{1\mathbf{k}}/\partial k^2)^{-1} = 1.6 \times 10^{-28}[\text{kg}]$, $A = 2.49[\text{\AA}]$, $J = 3.4[\text{meV}]$, $S = 1/2$, $D/J = 0.32$, $T = 20[\text{K}]$. 同様にエッジカレントからの角運動量も計算可能で, (80) 式から 1 ユニットセルあたりを計算すると $H = 1.0[\text{T}]$ で $L_z^{\text{edge}} \simeq 0.008\hbar$ という値が得られた. このことから, 自転運動の回転方向と試料に沿ったエッジカレントの方向は逆向きであることがわかる. また, 熱ホール伝導率は (100) 式から直ちに求められ, 次のように書ける.

$$\kappa^{xy} = \frac{2k_B^2 T}{\hbar V} n_z \sum_{\mathbf{k}} c_2(\rho_1) \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_1}{\partial k_x} \left| \frac{\partial u_1}{\partial k_y} \right. \right\rangle. \quad (122)$$

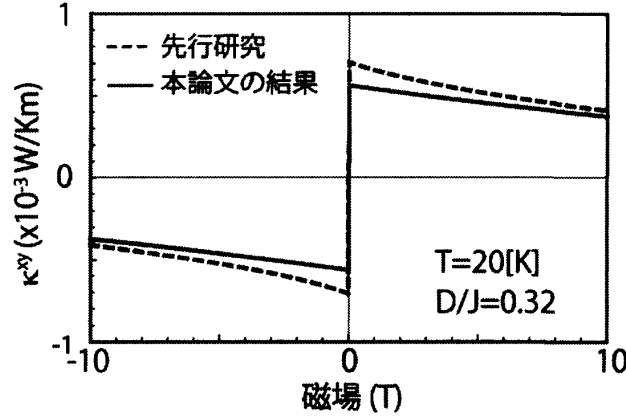


図 11: 熱ホール伝導率の磁場依存性をプロットしたもの。破線が先行研究の理論曲線 [32] で、(104) 式の S^B のみから計算したものに相当し、実線は我々の計算結果 (122) 式であり、こちらはトータルの熱輸送係数 $L^B = S^B + M^B$ から計算したものである。

これを先行研究と重ねてプロットしたのが図 11 である。なお、この系では L_z^{self} や L_z^{edge} が非常に小さいが、これは 3 章で議論したようにこれらの量は波数空間の Berry curvature に因る量であり、Berry curvature は他のバンドとのエネルギー差の二乗に逆比例するという事情が一因として考えられる。また、磁場が大きくなると κ^{xy} が徐々に減少するのはマグノン励起のギャップが磁場の増加によって大きくなっていくためである。

5.2 YIG の場合

前節で挙げた $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ は強磁性絶縁体でありながら DM 相互作用が存在するという点で非常に有望な物質だが、マグノンの平均自由行程が [nm] オーダーと非常に短いために 3 章で述べたようなエッジに沿った運動を光で観測するといった実験は期待できない。またキュリー温度が低いためデバイスへの応用上やや不利である。一方、1 章で述べたように実験でもよく知られている YIG (Yttrium Iron Garnet) はスピン波の伝播距離が [mm] オーダーと非常に長い上にキュリー温度が 550[K] と高いため、この系においては室温でマグノンの波束が実空間を運動している様子を観測できることが期待できる。しかしながら、YIG 中におけるスピン波は量子力学的な交換相互作用が支配的なマグノンではなく、古典電磁気学で記述される双極子相互作用が支配的なスピン波、すなわち 1.1.2 節で紹介した静磁波であり、そのフォーマリズムはやや異なっている。そのような事情にも関わらず、Berry curvature の表式等を若干修正することで同様に我々の理論が適用可能であることをここでは述べる。

さて、実際に我々の結果を YIG 薄膜中の静磁波に適用することを考える。まず図のような座標系をとり、YIG 薄膜は $\eta\zeta$ 平面にとり、それに垂直な方向を ξ 軸とする。また飽和磁化 M_0 と内部磁場 H_0 は図のように ξ 軸から θ だけ傾いているとする。さらに、スピン波の伝播方向を ζ 方向とし、磁化の運動は平面波解 $\mathbf{m}(\xi, \zeta, t) = \mathbf{m}(\xi) \exp(i(k\zeta - \omega t))$ を仮定する。ここで ω はスピン波の周波数である。静磁波のモードを求める問題は、1.1.2 節で見たように多くの方程式を 1 つずつ個別に解いていく代わりにそれらを全てまとめた次の積分方程式を解く問題

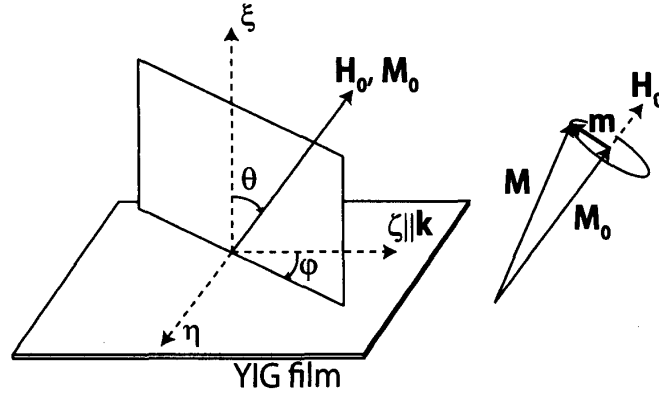


図 12: 静磁波モードを求めるための座標系等.

に帰着させることができる [13].

$$\omega_H \mathbf{m}(\xi) - \omega_M \int_{-L/2}^{L/2} d\xi' \hat{G}(\xi, \xi') \mathbf{m}(\xi') = \omega \sigma_y \mathbf{m}(\xi). \quad (123)$$

ここで, L は薄膜の厚さ, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ は Pauli 行列, $\omega_H = \gamma H$, $\omega_M = \gamma M_0$, $\gamma = g\mu_B/\hbar$ は磁気回転比, g は g 因子, μ_B は Bohr 磁子, $\hat{G}(\xi, \xi')$ は 2×2 の Green 関数で, 以下のように定義される.

$$\hat{G}(\xi, \xi') = \begin{pmatrix} G_{xx} & G_{xy} \\ G_{yx} & G_{yy} \end{pmatrix}, \quad (124)$$

$$G_{xx} = (G_P - \delta(\xi - \xi')) \sin^2 \theta - iG_Q \sin 2\theta \cos \varphi - G_P \cos^2 \theta \cos^2 \varphi, \quad (125)$$

$$G_{xy} = G_{yx} = -iG_Q \sin \theta \sin \varphi - G_P \cos \theta \sin \varphi \cos \varphi, \quad (126)$$

$$G_{yy} = -G_P \sin^2 \varphi, \quad (127)$$

ただし,

$$G_P = \frac{k}{2} \exp(-k|\xi - \xi'|), \quad (128)$$

$$G_Q = G_P \text{sign}(\xi - \xi'). \quad (129)$$

この積分方程式 (123) は一般化された固有値問題とみなすことができるので, 今までと同様に波束の運動に関する議論が適用できる. 基本的な考え方はまず波束を構築することである.

$$|\Phi_n\rangle = \sqrt{N} \int d\mathbf{k} a_n(\mathbf{k}, t) |\mathbf{m}_{n,\mathbf{k}}(\xi)\rangle, \quad (130)$$

ここで $\sqrt{N}$ は規格化因子, n は静磁波の band index で, 振幅 $a_n(\mathbf{k}, t)$ は規格化条件 $\int d\mathbf{k} |a_n(\mathbf{k}, t)|^2 = 1$ を満足する. この波束は実空間では中心位置 $\mathbf{r}_c$ に十分局在しており,

$$\mathbf{r}_c = \frac{1}{2} (\langle \Phi_n | \hat{\mathbf{r}} | \sigma_y \Phi_n \rangle + \langle \sigma_y \Phi_n | \hat{\mathbf{r}} | \Phi_n \rangle), \quad (131)$$

また波数空間内においても中心波数 $\mathbf{k}_c$ の周りに局在しているとする.

$$\mathbf{k}_c = \int d\mathbf{k} |a_n(\mathbf{k}, t)|^2 \mathbf{k}. \quad (132)$$

すると, この波束の運動方程式は次のように書ける.

$$\dot{\mathbf{r}}_c = \frac{\partial \omega_n}{\partial \mathbf{k}_c} - \dot{\mathbf{k}}_c \times \boldsymbol{\Omega}_n, \quad (133)$$

$$\dot{\mathbf{k}}_c = -\frac{\partial \omega_n}{\partial \mathbf{r}_c}, \quad (134)$$

ここで ω_n は n 番目のバンドのエネルギーである. $\boldsymbol{\Omega}_n$ は静磁波の波数空間の Berry curvature だが, (123) 式は非正定値の一般化固有値問題であるため, ここでは次のように定義される.

$$\Omega_{n,\gamma}(\mathbf{k}) = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left\langle \frac{\partial \mathbf{m}_{n,\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} \middle| \sigma_y \middle| \frac{\partial \mathbf{m}_{n,\mathbf{k}}}{\partial k_\beta} \right\rangle, \quad (135)$$

ここで $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ は完全反対称テンソルである. (123), (135) 式に基づいた数値計算は技術的な問題があるので将来課題としておくが, 対称性の議論からいくつかの結論が得られる. 例えば磁化 $\mathbf{M}_0$ が面内にある場合は $\mathbf{m}' \equiv U^{-1}\mathbf{m} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \mathbf{m}$ とゲージ変換すると, (123) 式は次のように変換される.

$$\omega_H \mathbf{m}'(\xi) - \omega_M \int_{-L/2}^{L/2} d\xi' \hat{G}'(\xi, \xi') \mathbf{m}'(\xi') = -\omega \sigma_x \mathbf{m}'(\xi). \quad (136)$$

ただし $\hat{G}'(\xi, \xi')$ は $\theta = \pi/2$ であることに注意すると,

$$\hat{G}'(\xi, \xi') = U^{-1} \hat{G}(\xi, \xi') U = \begin{pmatrix} G'_{xx} & G'_{xy} \\ G'_{yx} & G'_{yy} \end{pmatrix}, \quad (137)$$

$$G'_{xx} = G_P - \delta(\xi - \xi'), \quad G'_{xy} = -G_Q \sin \varphi, \quad (138)$$

$$G'_{yx} = G_Q \sin \varphi, \quad G'_{yy} = -G_P \sin^2 \varphi, \quad (139)$$

となりこの場合は実行列になる. すると (136) 式は全て実関数で表されるので固有ベクトル $\mathbf{m}'$ も実ベクトルになる. 一方, Berry curvature (135) 式は

$$\Omega_{n,\gamma}(\mathbf{k}) = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left\langle \frac{\partial \mathbf{m}'_{n,\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} \middle| U^{-1} \sigma_y U \middle| \frac{\partial \mathbf{m}'_{n,\mathbf{k}}}{\partial k_\beta} \right\rangle, \quad (140)$$

$$= \text{Im} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left\langle \frac{\partial \mathbf{m}'_{n,\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} \middle| \sigma_x \middle| \frac{\partial \mathbf{m}'_{n,\mathbf{k}}}{\partial k_\beta} \right\rangle, \quad (141)$$

と変換され, $\mathbf{m}'$ は実ベクトルなのでこれは 0 になることがわかる. したがって, $\mathbf{M}_0$ が面内, すなわち MSBVW モードと MSSW モードの場合は Berry curvature の効果が現れないことが言える. しかし, それ以外の場合, 例えば $\mathbf{M}_0$ が面に垂直な MSFVW モードの場合は $\hat{G}, \mathbf{m}$ などが複素数で $\mathbf{k}$ に依存しているので一般には nonzero の Berry curvature が期待できる.

6 結論

本論文での結論は以下の通りである。まず第一に我々は電子系における先行研究のアナロジーを用いて、磁性体中におけるマグノン波束の運動を準古典論的な方程式を立てることによって解析し、その結果マグノン波束が2種類の軌道運動を行うことを示した。この軌道運動による軌道角運動量は波束の自転運動とエッジに沿った運動に分けられ、いずれも運動量空間における Berry curvature の形で表せることを示した。すなわち、これらの運動はエッジの詳細や閉じ込めポテンシャルの形などの系の詳細に因らず、マグノンのバンド構造のみによって決定される内因的な性質に起因することがわかった。特に軌道角運動量の具体的な表式を用いて簡単な変形を行い、band crossing や Bose ファクターとの関連性などを議論し、より大きな軌道運動の効果を得るためにはマグノンのバンド構造に工夫が必要であることを述べた。

第二に、このマグノンの軌道運動とマグノンの熱ホール効果の関連性を、準古典論と線形応答理論の2つの立場から考察した。その結果、まず準古典論的な考察から、マグノンの熱ホール効果はマグノン波束のエッジに沿った運動が温度勾配によって釣り合いが破れたことに起因することがわかった。この結果からマグノンの熱ホール効果の直観的な理解を得ることに成功し、熱ホール伝導率の具体的な表式が得られ、これも軌道角運動量と同様にマグノンの波数空間における Berry curvature の形で記述されることがわかった。また、この結果は温度勾配が粒子に対して力を与える dynamical force ではなく、分布関数を通じて影響を及ぼす statistical force であることに関連していることについても言及した。一方、線形応答理論による考察では、温度勾配を仮想的に dynamical force として取り扱うことで熱輸送係数を計算し、これにより得られた熱ホール伝導率は準古典論で計算したものと一致することが確認され、理論的な整合性を得た。また先行研究との比較を行い、その結果我々の計算では分布関数の変化から計算されるような通常の久保公式で得られる熱輸送係数の他に、温度勾配によりカレントの表式が変化することから生じる補正項が必要であることを指摘し、またこの補正項はマグノンの軌道角運動量に関連した項であることを述べた。

第三に、我々の結果の応用例を $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ と YIG を用いて示した。まず $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ については上で挙げた2種類の軌道角運動量と熱ホール伝導率を実際に計算し、その結果2種類の軌道角運動量は符号が逆でどちらも小さな値であり、また熱ホール伝導率についても先行研究よりやや小さな値になることがわかった。一方 YIG では、非正定値の一般化固有値問題を出発点とすることで同様の議論が展開できることを示し、飽和磁化が面内にある場合は対称性から Berry curvature は現れないことがわかったが、磁化が面に垂直な場合の MSFVW モードや磁化が一般の方向を向いている場合は nonzero の Berry curvature による効果が期待できることを見出した。

A 自転の角運動量の導出

ここでは (50) 式、あるいは (81) 式に現れた波束の自転による角運動量の導出を示す。出発点となるのは波束の構築である。

$$|W_0\rangle = \int d\mathbf{k} w(\mathbf{k}, t) |\psi_n(\mathbf{k})\rangle. \quad (142)$$

ここで、 $|\psi_n(\mathbf{k})\rangle$ は n 番目のバンドの Bloch 波動関数 $|\psi_n(\mathbf{k})\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $w(\mathbf{k}, t)$ はブリルアンゾーン内で中心波数 $\mathbf{k}_c$ に鋭いピークを持つ関数であり、以下の性質を満たすとする。

$$\mathbf{k}_c = \int d\mathbf{k} \mathbf{k} |w(\mathbf{k}, t)|^2, \quad (143)$$

$$\int d\mathbf{k} f(\mathbf{k}) |w(\mathbf{k}, t)|^2 \approx f(\mathbf{k}_c). \quad (144)$$

また、実空間における波束の中心座標を $\mathbf{r}_c = \langle W_0 | \mathbf{r} | W_0 \rangle$ とする。簡単のため系は 2 次元であると仮定すると、まず中心座標 $\mathbf{r}_c$ に関して次の式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_c &= \langle W_0 | \mathbf{r} | W_0 \rangle \\ &= \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' w^*(\mathbf{k}') w(\mathbf{k}) \left\langle u_{n\mathbf{k}'} \left| e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \left(-i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) \right| u_{n\mathbf{k}} \right\rangle \\ &= \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \left(\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') w^*(\mathbf{k}') i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} w(\mathbf{k}) + w^*(\mathbf{k}') w(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \left\langle u_{n\mathbf{k}} \left| i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right| u_{n\mathbf{k}} \right\rangle \right) \\ &= \int d\mathbf{k} \left(w^*(\mathbf{k}) i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} w(\mathbf{k}) + |w(\mathbf{k})|^2 \left\langle u_{n\mathbf{k}} \left| i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right| u_{n\mathbf{k}} \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (145)$$

この (145) 式は後で計算に用いる。さて、波束の自転による角運動量 $\mathbf{L}_n(\mathbf{k}_c)$ は次のように表される。

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_n(\mathbf{k}_c) &= \langle W_0 | (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) \times \mathbf{p} | W_0 \rangle \\ &= \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \tilde{w}^*(\mathbf{k}') \tilde{w}(\mathbf{k}) \left\langle u_{n\mathbf{k}'} \left| \left(e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) \times \mathbf{p} \right) \right| u_{n\mathbf{k}} \right\rangle, \end{aligned} \quad (146)$$

ただし $\mathbf{p}$ は運動量演算子、 $\tilde{w}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_c} w(\mathbf{k})$ である。ここで、

$$\begin{aligned} &\left\langle u_{n\mathbf{k}'} \left| \left(e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) \right) \right| u_{n\mathbf{k}'} \right\rangle \\ &= i \left\langle u_{n\mathbf{k}'} \left| \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}'} \left(e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)} \right) \right| u_{n\mathbf{k}'} \right\rangle \\ &= i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}'} \left\langle u_{n\mathbf{k}'} \left| e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)} \right| u_{n\mathbf{k}'} \right\rangle - i \left\langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}'}}{\partial \mathbf{k}'} \left| e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)} \right| u_{n\mathbf{k}'} \right\rangle \\ &= i \delta_{n,n'} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - i \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \left\langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}'}}{\partial \mathbf{k}'} \left| u_{n\mathbf{k}'} \right\rangle \right\rangle \end{aligned} \quad (147)$$

という関係式 [34] と、恒等演算子 $\hat{1} = \sum_{n'} |u_{n'\mathbf{k}}\rangle \langle u_{n'\mathbf{k}}|$ を用いると、(146) 式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_n(\mathbf{k}_c) &= \sum_{n'} \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \tilde{w}^*(\mathbf{k}') \tilde{w}(\mathbf{k}) \\ &\quad \cdot \left\langle u_{n\mathbf{k}'} \left| \left(e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) \right) \right| u_{n'\mathbf{k}} \right\rangle \times \langle u_{n'\mathbf{k}} | \mathbf{p} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &= \sum_{n'} \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \tilde{w}^*(\mathbf{k}') \tilde{w}(\mathbf{k}) \\ &\quad \cdot \left(i \delta_{n,n'} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - i \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \left\langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}'}}{\partial \mathbf{k}'} \left| u_{n'\mathbf{k}} \right\rangle \right\rangle \right) \times \langle u_{n'\mathbf{k}} | \mathbf{p} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &= -i \int d\mathbf{k} \frac{\partial \tilde{w}^*(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \tilde{w}(\mathbf{k}) \times \mathbf{p}_{nn} - i \int d\mathbf{k} |\tilde{w}^*(\mathbf{k})|^2 \left\langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \left| \times \mathbf{p} \right| u_{n\mathbf{k}} \right\rangle. \end{aligned} \quad (148)$$

ただし, $p_{nn} = \langle u_{nk} | \mathbf{p} | u_{nk} \rangle$ である. ここで, $\mathbf{p} = \frac{m}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{k}}$ であるから, (148) 式の第二項は

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial u_{nk}}{\partial k_1} \middle| p_2 \middle| u_{nk} \right\rangle - (1 \leftrightarrow 2) &= \frac{m}{\hbar} \left\langle \frac{\partial u_{nk}}{\partial k_1} \middle| \frac{\partial H}{\partial k_2} \middle| u_{nk} \right\rangle - (1 \leftrightarrow 2) \\ &= \frac{m}{\hbar} \left\langle \frac{\partial u_{nk}}{\partial \mathbf{k}} \middle| \times (\varepsilon_n - H) \middle| \frac{\partial u_{nk}}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \frac{\partial u_{nk}}{\partial \mathbf{k}} \middle| u_{nk} \right\rangle \times p_{nn} \end{aligned} \quad (149)$$

となる. したがって, 角運動量は次のようになる.

$$\begin{aligned} L_n(\mathbf{k}_c) &= i \frac{m}{\hbar} \left\langle \frac{\partial u_{nk}}{\partial \mathbf{k}} \middle| \times (H - \varepsilon_n) \middle| \frac{\partial u_{nk}}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle \bigg|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_c} \\ &\quad - i \int d^2 \mathbf{k} \left(|\tilde{w}(\mathbf{k})|^2 \left\langle \frac{\partial u_{nk}}{\partial \mathbf{k}} \middle| u_{nk} \right\rangle + \frac{\partial \tilde{w}^*(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \tilde{w}(\mathbf{k}) \right) \times p_{nn} \end{aligned} \quad (150)$$

ここで, (150) 式の第二項は中心座標の表式 (145) を用いるとキャンセルすることがわかる [24]. 以上から, 波束の自転による角運動量の表式は結局次のようになることが示せた.

$$L_n(\mathbf{k}_c) = i \frac{m}{\hbar} \left\langle \frac{\partial u_{nk}}{\partial \mathbf{k}} \middle| \times (H - \varepsilon_n) \middle| \frac{\partial u_{nk}}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle \bigg|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_c}. \quad (151)$$

B 先行研究における熱ホール伝導率 κ^{xy} の計算

ここでは 4.2 節で紹介した先行研究 [32] における熱ホール伝導率の計算の詳細を示す. まず熱ホール伝導率は久保公式で次のように書かれていた.

$$\bar{\kappa}^{xy} = \frac{V}{T} \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda \langle j_E^x(-i\lambda) j_E^y(t) \rangle_{\text{th}} \quad (152)$$

ここで, V は系の体積, $j_E = \frac{1}{2\hbar V} \sum_{\mathbf{k}} b_\alpha^\dagger(\mathbf{k}) \left(\partial_{\mathbf{k}} (H(\mathbf{k}))^2 \right)_{\alpha\beta} b_\beta(\mathbf{k})$ はエネルギーカレントであり, $\mu = 0$ のときは熱流に等しい. $\langle \dots \rangle_{\text{th}} = \text{Tr}(\dots e^{-\beta H}) / Z$ ($Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$ は分配関数), $j_E^y(t)$ 等は相互作用表示 $j_E^y(t) = e^{iHt/\hbar} j_E^y e^{-iHt/\hbar}$ であることに注意すると,

$$\begin{aligned} \bar{\kappa}^{xy} &= \frac{1}{4\hbar^2 VT} \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda \sum_{n,m} e^{(\lambda - \frac{it}{\hbar})(\varepsilon_n - \varepsilon_m)} \\ &\quad \times \left\langle n \middle| \sum_{\mathbf{k}} b_\alpha^\dagger(\mathbf{k}) \left(\partial_{k_x} (H(\mathbf{k}))^2 \right)_{\alpha\beta} b_\beta(\mathbf{k}) \middle| m \right\rangle \\ &\quad \times \left\langle m \middle| \sum_{\mathbf{k}'} b_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{k}') \left(\partial_{k_y} (H(\mathbf{k}'))^2 \right)_{\alpha'\beta'} b_{\beta'}(\mathbf{k}') \middle| n \right\rangle \frac{e^{-\beta \varepsilon_n}}{Z} \end{aligned} \quad (153)$$

となる. ここで, $|n\rangle, |m\rangle$ はハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ の固有関数であり, 完全系をなす. (153) 式の行列要素が nonzero になるのは $|m\rangle = b_\beta^\dagger \Pi_\gamma b_\gamma^\dagger(\mathbf{k}) |0\rangle, |n\rangle = b_\alpha^\dagger \Pi_\gamma b_\gamma^\dagger(\mathbf{k}) |0\rangle$ (ただし $|0\rangle$ は真

空状態) かつ $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, $\alpha' = \beta$, $\beta' = \alpha$ のときだけであるから, 状態 α の波動関数の周期的な部分を u_α と書くことにすれば, (153) 式は次のように書き換えられる.

$$\begin{aligned} \bar{\kappa}^{xy} = & -\frac{1}{4\hbar VT} \sum_{\alpha, \beta, \mathbf{k}} \frac{i}{(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)^2} \frac{e^{-\beta\varepsilon_\alpha} - e^{-\beta\varepsilon_\beta}}{Z} \\ & \times \left\langle u_\alpha \left| \left(\partial_{k_x} (H(\mathbf{k}))^2 \right) \right| u_\beta \right\rangle \left\langle u_\beta \left| \left(\partial_{k_x} (H(\mathbf{k}))^2 \right) \right| u_\alpha \right\rangle. \end{aligned} \quad (154)$$

ここで, $\left\langle u_\alpha \left| \left(\frac{\partial H^2}{\partial \mathbf{k}} \right) \right| u_\beta \right\rangle = (\varepsilon_\alpha^2 - \varepsilon_\beta^2) \left\langle \frac{\partial u_\alpha}{\partial \mathbf{k}} \left| u_\beta \right\rangle \right.$ という関係式を用いると, 熱ホール伝導率は結局次のように求められる.

$$\begin{aligned} \bar{\kappa}^{xy} = & -\frac{i}{4\hbar VT} \sum_{\alpha, \beta, \mathbf{k}} (\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta)^2 \rho(\varepsilon_\alpha) \left\langle \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_x} \left| u_\beta \right\rangle \left\langle u_\beta \left| \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_y} \right\rangle - (k_x \leftrightarrow k_y), \right. \\ = & -\frac{i}{4\hbar VT} \sum_{\alpha, \beta, \mathbf{k}} \rho(\varepsilon_\alpha) \left\langle \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_x} \left| (\varepsilon_\alpha + H)^2 \right| u_\beta \right\rangle \left\langle u_\beta \left| \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_y} \right\rangle - (k_x \leftrightarrow k_y), \\ = & \frac{1}{2\hbar VT} \text{Im} \sum_{\alpha, \mathbf{k}} \rho(\varepsilon_\alpha) \left\langle \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_x} \left| (\varepsilon_\alpha + H)^2 \right| \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_y} \right\rangle. \end{aligned} \quad (155)$$

このようにして, (103) 式を導くことができた.

次に, 実験で用いられた $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ の場合の熱ホール伝導率の導出を行う. $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ のバンドは4つあるが, Bose 分布関数がかかっているので最低バンド ($n=1$) からの寄与のみが重要であると近似すると, (103) 式は次のように変形される.

$$\bar{\kappa}_{xy} = \frac{(8JS + 2g\mu_B H)^2}{2\hbar T} \text{Im} \int_{\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \rho(\varepsilon_1 \mathbf{k}) \left\langle \frac{\partial u_1}{\partial k_x} \left| \frac{\partial u_1}{\partial k_y} \right\rangle. \quad (156)$$

ただし, J は交換相互作用の定数, S はスピンの大きさ, g は g 因子, μ_B は Bohr 磁子, H は外部磁場の大きさを表す. また ρ_n は $\rho_n \equiv \rho(\varepsilon_n, \mathbf{k})$ と定義される. Onose らの計算結果 [33] によればこの系の最低バンドでの Berry curvature は次のように書かれる.

$$\Omega_{1,z}(\mathbf{k}) = -2\text{Im} \left\langle \frac{\partial u_1}{\partial k_x} \left| \frac{\partial u_1}{\partial k_y} \right\rangle \simeq -\frac{A^4}{8\sqrt{2}} \frac{D}{J} n_z (k_x^2 + k_y^2 + 2k_z^2), \quad (157)$$

ただし, $n_z = H_z/|\mathbf{H}|$ である. したがって熱ホール伝導率は以下の形で求まる.

$$\bar{\kappa}_{xy} \sim \frac{n_z}{8\sqrt{2}} \frac{D}{J} \frac{k_B^2 T}{\pi^{3/2} \hbar a} \left(2 + \frac{g\mu_B H}{2JS} \right)^2 \sqrt{\frac{k_B T}{2JS}} \text{Li}_{\frac{5}{2}} \left(e^{-\frac{g\mu_B H}{k_B T}} \right), \quad (158)$$

ただし $\text{Li}_n(z)$ は polylogarithm function と呼ばれる関数である. これと実験結果をプロットしたのが参考文献 [33] 内の図 4(C) である.

C Boson の場合の熱輸送係数の計算

4.3 節の輸送係数 $(M^B)_{12}^{\alpha\beta}$, $(M^B)_{22}^{\alpha\beta}$ は 2.2 節公式 (74) を用いると計算可能で、まず $(M^B)_{12}^{\alpha\beta}$ は次のように計算される.

$$\begin{aligned}
(M^B)_{12}^{\alpha\beta} &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \rho(\eta) \left(-\frac{2}{\hbar V} \frac{d}{d\eta} \sum_{\lambda} \Theta(\eta - \varepsilon_{\lambda}) \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| (H + \varepsilon_{\lambda} - 2\eta) \left| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle \right) \\
&= \frac{1}{\hbar V} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{d\rho(\eta)}{d\eta} \sum_{\lambda} \left(\Theta(\eta - \varepsilon_{\lambda}) \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| (H + \varepsilon_{\lambda} - 2\eta) \left| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle \right) \\
&= \frac{1}{\hbar V} \text{Im} \sum_{\lambda} \int_{\varepsilon_{\lambda}}^{\infty} d\eta \frac{d\rho(\eta)}{d\eta} \left(\left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| (H + \varepsilon_{\lambda} - 2\mu) \left| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle - 2(\eta - \mu) \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle \right) \\
&= \frac{1}{\hbar V} \text{Im} \sum_{\lambda} \left(-c_0(\rho(\varepsilon_{\lambda})) \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| (H + \varepsilon_{\lambda} - 2\mu) \left| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle + 2c_1(\rho(\varepsilon_{\lambda})) k_B T \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle \right). \tag{159}
\end{aligned}$$

同様に $(M^B)_{22}^{\alpha\beta}$ も計算可能で、これは次のようになる.

$$\begin{aligned}
(M^B)_{22}^{\alpha\beta} &= \int_{-\infty}^{\infty} \eta \rho(\eta) \left(-\frac{2}{\hbar V} \frac{d}{d\eta} \sum_{\lambda} \Theta(\eta - \varepsilon_{\lambda}) \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| (H + \varepsilon_{\lambda} - 2\eta) \left| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle \right) d\eta \\
&\quad + \frac{i\hbar}{4} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \rho(\eta) \text{Tr} \delta(\eta - H) [v^{\alpha}, v^{\beta}] \\
&= \frac{2}{\hbar V} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\rho(\eta) \sum_{\lambda} \Theta(\eta - \varepsilon_{\lambda}) \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| (H + \varepsilon_{\lambda} - 2\eta) \left| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \eta \frac{d\rho(\eta)}{d\eta} \sum_{\lambda} \Theta(\eta - \varepsilon_{\lambda}) \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| (H + \varepsilon_{\lambda} - 2\eta) \left| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle \right) d\eta \right. \\
&\quad \left. + \frac{i\hbar}{4V} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \rho(\eta) \sum_{\lambda} \text{Tr} \delta(\eta - \varepsilon_{\lambda}) \langle u_{\lambda} | (v^{\alpha} v^{\beta} - v^{\beta} v^{\alpha}) | u_{\lambda} \rangle \right) \\
&= \frac{2}{\hbar V} \left[\sum_{\lambda} \rho(\eta) \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| (H + \varepsilon_{\lambda} - \eta) \eta \left| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle \right]_{\varepsilon_{\lambda}}^{\infty} \\
&\quad - \frac{2}{\hbar V} \int_{\varepsilon_{\lambda}}^{\infty} d\eta \frac{d\rho(\eta)}{d\eta} \eta^2 \sum_{\lambda} \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle \\
&\quad + \frac{i\hbar}{4V} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \rho(\eta) \sum_{\lambda, \nu} \delta(\eta - \varepsilon_{\lambda}) (v_{\lambda\nu}^{\alpha} v_{\nu\lambda}^{\beta} - (\alpha \leftrightarrow \beta)) \\
&= -\frac{2}{\hbar V} \text{Im} \sum_{\lambda} \left(\rho(\varepsilon_{\lambda}) \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| \left(\frac{H + \varepsilon_{\lambda}}{2} \right)^2 \left| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle + \int_{\varepsilon_{\lambda}}^{\infty} d\eta \frac{d\rho(\eta)}{d\eta} \eta^2 \left\langle \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\alpha}} \middle| \frac{\partial u_{\lambda}}{\partial k_{\beta}} \right\rangle \right) \tag{160}
\end{aligned}$$

これらをまとめると (104)-(107) 式は次のように変形される.

$$(S^B)_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{2}{\hbar V} \text{Im} \sum_{n,\mathbf{k}} \rho_n \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_\alpha} \left| \left(\frac{H + \varepsilon_{n\mathbf{k}}}{2} \right)^q \right| \frac{\partial u_n}{\partial k_\beta} \right\rangle, \quad (161)$$

$$(M^B)_{11}^{\alpha\beta} = 0, \quad (162)$$

$$(M^B)_{12}^{\alpha\beta} = \frac{2}{\hbar V} \text{Im} \sum_{n,\mathbf{k}} \left[-\rho_n \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_\alpha} \left| \left(\frac{H + \varepsilon_{n\mathbf{k}}}{2} \right) \right| \frac{\partial u_n}{\partial k_\beta} \right\rangle + (\mu \rho_n + k_B T c_1(\rho_n)) \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_\alpha} \left| \frac{\partial u_n}{\partial k_\beta} \right\rangle \right], \quad (163)$$

$$(M^B)_{22}^{\alpha\beta} = \frac{2}{\hbar V} \text{Im} \sum_{n,\mathbf{k}} \left[-\rho_n \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_\alpha} \left| \left(\frac{H + \varepsilon_{n\mathbf{k}}}{2} \right)^2 \right| \frac{\partial u_n}{\partial k_\beta} \right\rangle + \left(\mu^2 \rho_n + 2\mu k_B T c_1(\rho_n) + (k_B T)^2 c_2(\rho_n) \right) \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_\alpha} \left| \frac{\partial u_n}{\partial k_\beta} \right\rangle \right], \quad (164)$$

ただし, $\alpha, \beta = x, y$, $q = i + j - 2$, $\rho_n \equiv \rho(\varepsilon_{n\mathbf{k}})$ であり, $c_q(\rho_n)$ は 4.1 節で現れた関数で,

$$c_q(\rho_n) = \int_{\varepsilon_{n\mathbf{k}}}^{\infty} d\varepsilon (\beta(\varepsilon - \mu))^q \left(-\frac{d\rho}{d\varepsilon} \right) = \int_0^{\rho_n} \left(\log \frac{1+t}{t} \right)^q dt$$

である.

謝辞

本論文の執筆にあたりご援助を頂いた方々への謝辞を述べたいと思います. まず本研究に関して様々な場面でディスカッションをして頂き, 研究の方向性や的確なアドバイスを提供して下さった指導教官の村上准教授に厚くお礼申し上げます. 貴重なお時間を惜しまず快く議論に応じて頂きました. また, 研究の取り組み方や聴衆を意識した成果発表の仕方, 論文の書き方など研究活動に必要な様々な知識を得ることができました. ありがとうございます. 次に, 学会や研究会等の出張の度に事務手続きをして頂いた物性事務の方々, 秘書の津久井さんにお礼申し上げます. 最後に, 研究はもちろん日常生活の中でも様々な面でご助力をいただいた村上研究室の皆様に感謝致します. 非常に充実した研究生生活を送ることができました. ありがとうございます.

参考文献

- [1] 久保 建, 田中 秀数, 「磁性 I」 朝倉書店 (2008)
- [2] 芳田 奎, 「磁性」 岩波書店 (1998)
- [3] R. Matsumoto and S. Murakami, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 197202 (2011)
- [4] R. Matsumoto and S. Murakami, *arXiv*: 1106.1987 (2011)

- [5] F. Bloch, *Z. f. Phys.* **61**, 206 (1930)
- [6] T. Holstein and H. Promakoff, *Phys. Rev.* **58**, 1094 (1940)
- [7] L. R. Walker, *Phys. Rev.* **105**, 390 (1957)
- [8] R. L. White and I. H. Solt, Jr., *Phys. Rev.* **104**, 56 (1956)
- [9] R. W. Damon and J. R. Eshbach, *J. Phys. Chem. Solids.* **19**, 308 (1961)
- [10] M. J. Hurben and C. E. Patton, *J. Magn. Magn. Mater.* **139**, 263 (1995)
- [11] S. O. Demokritov, V. E. Demidov, O. Dzyapko, G. A. Melkov, A. A. Serga, B. Hillbrands and A. N. Slavin, *Nature* **443**, 440 (2006)
- [12] A. Kreisel, F. Sauli, L. Bartosch and P. Kopietz, *Eur. Phys. J. B* **71**, 59 (2009)
- [13] B. A. Kalinikos, and A. N. Slavin, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **19**, 7013-7033 (1986).
- [14] S. Neusser and D. Grundler, *Adv. Mater.* **21**, 2927 (2009)
- [15] A. A. Serga, A. V. Chumak and B. Hillbrands, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43**, 264002 (2010)
- [16] V. V. Kruglyak, S. O. Demokritov and D. Grundler, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43**, 264001 (2010)
- [17] Y. Kajiwara, K. Harii, S. Takahashi, J. Ohe, K. Uchida, M. Mizuguchi, H. Umezawa, H. Kawai, K. Ando, K. Takahashi, S. Maekawa and E. Saitoh, *Nature* **464**, 262 (2010)
- [18] R. H. Silsbee, A. Janossy and P. Monod, *Phys. Rev. B* **19**, 4382 (1979)
- [19] K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibae, K. Ando, S. Maekawa and E. Saitoh, *Nature* **455**, 778 (2008)
- [20] K. Uchida, H. Adachi, T. Ota, H. Nakayama, S. Maekawa and E. Saitoh, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 172505 (2010)
- [21] J. Sinova, *Nature Materials* **9**, 880 (2010)
- [22] D. Xiao, M. C. Chang, and Q. Niu, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959 (2010)
- [23] D. Xiao, J. Shi, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 137204 (2005)
- [24] M. C. Chang, and Q. Niu, *Phys. Rev. B.* **53**, 7010 (1996)
- [25] J. Shi, G. Vignale, D. Xiao, Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 197202 (2007)
- [26] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982)

- [27] B. I. Halperin, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 2185 (1982)
- [28] L. Smrčka, and P. Středa, *J. Phys. C* **10**, 2153 (1977)
- [29] L. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **135**, A1505 (1964)
- [30] S. A. Nikitov, Ph. Tailhades and C. S. Tsai, *J. Magn. Magn. Mater.* **236**, 320 (2001)
- [31] S. O. Demokritov, B. Hillbrands, and A. N. Slavin, *Phys. Rep.* **348**, 441 (2001)
- [32] H. Katsura, N. Nagaosa, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 066403 (2010)
- [33] Y. Onose, T. Ideue, H. Katsura, Y. Shiomi, N. Nagaosa, and Y. Tokura, *Science* **329**, 297 (2010)
- [34] E. I. Blount, in Solid State Physics, edited by F. Seitz and D. Turnbull, vol. 13. Academic, New York, (1962)