

平成26年度 博士論文

空間反転対称性が欠如した結晶における
フェルミ面のトポロジカル転移と電子相関効果

新潟大学大学院自然科学研究科 博士後期課程
数理物質科学専攻 物理学コース

F12J008K

丸山大輔

目次

第 I 部	序論	3
1	はじめに	3
2	空間反転対称性の破れた系の基礎	4
2.1	結晶構造	4
2.2	反対称スピン軌道相互作用	4
2.3	フェルミ面	6
3	反対称スピン軌道相互作用によって生じる現象	6
3.1	磁気電気効果	7
3.2	異常ホール効果	7
3.3	スピホール効果	8
3.4	カイラル磁性	9
3.5	空間反転対称性が破れた超伝導	9
3.6	局所的な空間反転対称性が破れた系	12
4	本論文の目的	15
第 II 部	フェルミ面のトポロジカル転移	16
5	研究背景と研究目的	16
6	模型	18
7	計算結果	19
7.1	2次元系	20
7.2	3次元系	23
8	第 II 部のまとめと議論	26
第 III 部	電子相関効果	28
9	研究背景と研究目的	28

目次

10	モデルと計算手法	32
10.1	モデルハミルトニアン	32
10.2	グリーン関数	33
10.3	有効質量	36
10.4	フェルミ面の分裂幅	38
11	2次摂動	39
11.1	数値計算の結果	39
11.2	解析計算の結果	43
12	3次摂動	50
13	第 III 部のまとめと議論	57
付録 A	数値計算の詳細	60
A.1	FFT による畳み込み積分の数値計算	60
A.2	サイト当たりの粒子数密度 n の導出	61
付録 B	解析計算の詳細	63
B.1	空間反転対称性が破れている系のグリーン関数の導出	63
B.2	フェルミ面の分裂幅 Δk_F の導出	64
	謝辞	66
	論文リスト	67
	参考文献	68

第1部 序論

1 はじめに

スピン軌道相互作用によって引き起こされる現象は最近の凝縮系物理の研究のハイライトの1つになっている。その中でも、特に空間反転対称性が破れた系においてスピントロニクス [1,2] やカイラル磁性、ヘリカル磁性 [3,4]、それから空間反転対称性が破れた超伝導 [5] などの興味深い現象が起こる。反対称スピン軌道相互作用は空間反転対称性の破れによって生じ、これらの現象において本質的な役割を果たす [5]。この反対称スピン軌道相互作用は結晶の対称性によって様々な形で表される [6]。その中でも特にラシュバ型スピン軌道相互作用 [7] が最も多くの場面で研究されている。それはおそらく、このラシュバ型スピン軌道相互作用がバルク [8–11] だけでなく、人工的なヘテロ構造 [12–15] にも現れるからである。この反対称スピン軌道相互作用はフェルミ面のスピン分裂を引き起こす。そこで得られる電子状態は運動量空間での特殊なスピン構造を持ち、これが様々な現象の原因になっている。このフェルミ面のスピン分裂は実験的に角度分解型光電子分光 (ARPES) [11, 16, 17] やドハース・ファンアルフェン (dHvA) 効果 [18] の測定から観測されている。

第1部のここからは上で述べた空間反転対称性の破れと反対称スピン軌道相互作用についてもう少し詳しく見ていく。そして、反対称スピン軌道相互作用によって引き起こされる様々な現象の一部を紹介する。最後に本論文の構成について述べる。

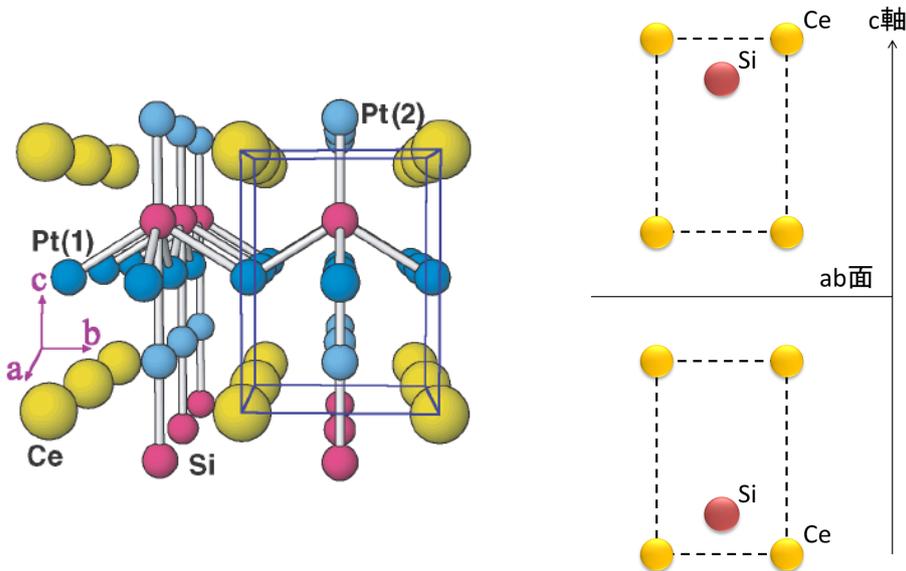


図1 左図:CePt₃Siの結晶構造 [8]。右図:CePt₃Siの結晶構造の簡略図。

2 空間反転対称性の破れた系の基礎

2.1 結晶構造

まず初めに本研究が対象とする空間反転対称性がどのような系で破れているか見ていく。その1つが反転中心を持たない結晶構造である。その例として CePt_3Si の結晶構造を図1に示す。 CePt_3Si の単位格子は正方晶であり、結晶の c 軸は他の a 軸と b 軸から区別されている。Si 原子の位置に注目すると単位格子の中心より c 軸方向にずれた場所にあるのが分かる。つまり、この物質では ab 面に対しての鏡映対称性が破れている。他の例としてはヘテロ界面がある。ここでは異なる物質の接合面において面に対しての鏡映対称性が破れている。また、物質の表面でも当然鏡映対称性は破れている。ここでは鏡映対称性が破れている例を挙げたが、それ以外の場合もある。第II部の主な対象物質である $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ [19] と $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ [20] の結晶構造は立方晶のアンチペロブスカイトの構造を持つ。この物質では a 、 b 、 c 軸のいずれの方向に沿っても空間反転対称性が破れている。また、空間反転対称性が単位格子全体で見ると保たれているが、その中の原子に注目すると破れている場合がある。このような場合には空間反転対称性が局所的に破れている。これについては3.6節で紹介する。

2.2 反対称スピン軌道相互作用

ここでは空間反転対称性の破れがどのようにして電子状態に影響を与えるのか見ていく。その答えが反対称スピン軌道相互作用である。これは第二量子化の表示では一般的に次のようなハミルトニアンで表される。

$$H_{\text{ASOC}} = \alpha \sum_{\mathbf{k}, s, s'} \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \sigma_{ss'} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s'} \quad (1)$$

ここで α は相互作用の結合定数であり、 $\sigma_{ss'}$ はパウリ行列のベクトル表現である。そして、 g ベクトル $\mathbf{g}(\mathbf{k})$ が数多くある反対称スピン軌道相互作用を特徴づける。代表的なものはラシュバ型 [7] で $\mathbf{g}(\mathbf{k}) = (-k_y, k_x, 0)$ と表現される。この形は c 軸方向の鏡映対称性が破れた正方晶などの C_{4v} の点群の場合に現れ、先ほど紹介した CePt_3Si がまさにそうである。ラシュバ型以外の例としてはドレッセルハウス型 [21] がある。これは系が立方晶のような T_d の点群の場合に現れ、 $\mathbf{g}(\mathbf{k}) = (k_x(k_y^2 - k_z^2), k_y(k_z^2 - k_x^2), k_z(k_x^2 - k_y^2))$ のように表される。この $\mathbf{g}(\mathbf{k})$ は結晶構造によらずに、奇のパリティを持ち、 $\mathbf{g}(\mathbf{k}) = -\mathbf{g}(-\mathbf{k})$ を満たす。これは時間反転対称性による帰結であり、“反対称” という名前の由来になっている。

次にこの反対称スピン軌道相互作用がどのようにして生じるのか微視的起源を考える。よく用いられている説明で電場中を走る電子に働く相対論効果というものがある。図1のSi原子のように反転中心にない位置に原子が存在すると、それにより異方的な電場勾配が結晶内部に生じる。この影響を結晶内の電子が受ける。電場勾配 ∇V の下での電子はそれによる軌道運動と電子スピンの間で発生するスピン軌道相互作用 $(\hbar^2/4m^2c^2)(\nabla V \times \mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ を受ける。この電場勾配が z 軸方向なら

ば、これはラシュバ型の形になる。ただし、固体電子系のスピン軌道相互作用としてよく知られている LS 結合は主に原子内部から生じるものであり、この説明では原子内部の運動とはあまり関係していないように見える。そこで、LS 結合を考慮した多軌道模型から反対称スピン軌道相互作用の正確な導出が行われている [22–24]。この導出によると (1) パリティが異なる軌道間の局所的混成、(2) 原子間の飛び移りによるパリティが異なる軌道間の混成、(3) 原子内の LS 結合の 3 つが反対称スピン軌道相互作用の原因になっている。その発源機構を図 2 を用いて簡単に説明する。ここでは最も簡単な例として s - p 電子系を考える。図 2 の上は p_z 軌道に注目した局所的な波動関数を表している。この p_z 軌道が (3) の効果により p_x 軌道と混成し、さらに (1) の効果によって s 軌道と混成する。このような局所的な波動関数が (2) の効果のサイト間の sp 混成項によりスピン反転を伴うホッピングをする。このホッピングをフーリエ変換して運動量表示に変換したものがラシュバ型スピン軌道相互作用になる。ここでは (1)~(3) の 3 つ重要な要素があるが、この中でも (1) の効果が空間反転対称性が破れることによって現れる。他の (2)、(3) の効果は空間反転対称性が保たれている系でも存在する。

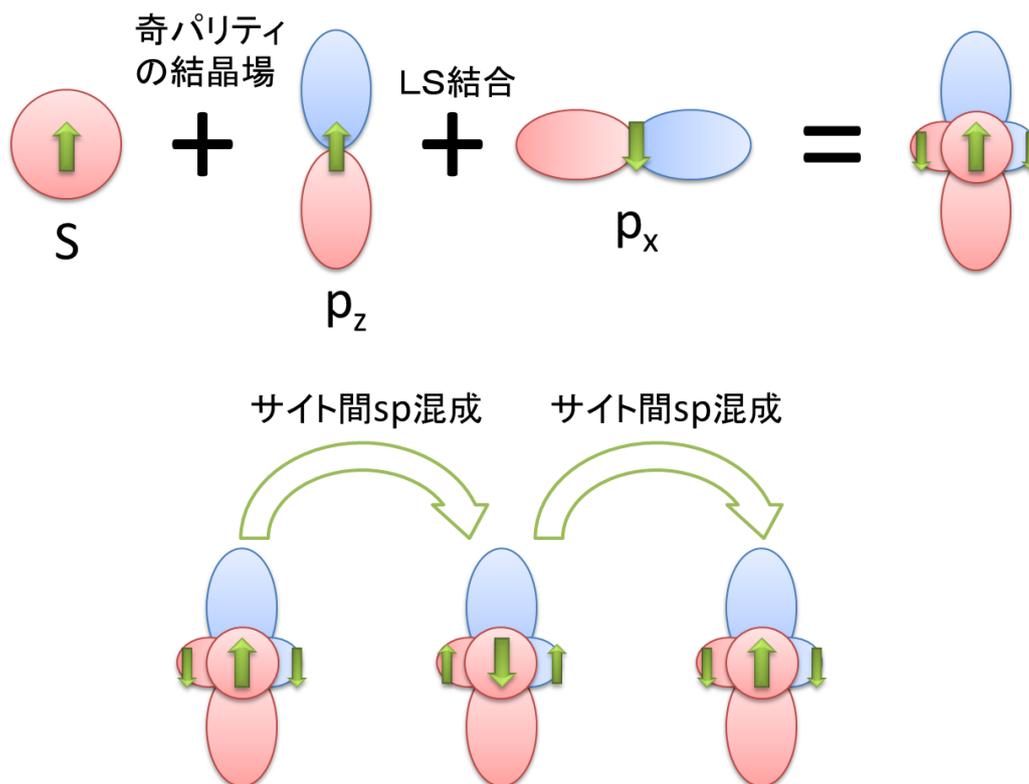


図 2 s - p 電子系のラシュバ型スピン軌道相互作用の起源を示す直感的な描像 [24]。上： p_z 軌道に注目した局所的な波動関数。下：サイト間 sp 混成によるスピン反転を伴うホッピング。

2.3 フェルミ面

ここでは実際に反対称スピン軌道相互作用が電子構造に与える影響を見ていく。そこで空間反転対称性の破れにより生じる反対称スピン軌道相互作用を考慮した最も単純なモデルが次のようになる。

$$H = \sum_{\mathbf{k},s} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} + \alpha \sum_{\mathbf{k},s,s'} \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s'} \quad (2)$$

このハミルトニアンはスピン表示で 2×2 行列で表すことができ、対角化すると反対称スピン軌道相互作用によってスピン縮退が解けた 2 つのバンド、

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \pm \alpha |\mathbf{g}(\mathbf{k})|, \quad (3)$$

が得られる。この 2 つに分裂したフェルミ面の模式図を図 3 に示す。ただし、ここでの \mathbf{g} ベクトルはラシュバ型を考えている。ここで注目すべき点はフェルミ面上の各波数点ごとに、それぞれ異なった方向にスピン量子化軸が向くことである。この特異なスピン構造を持つフェルミ面が様々な興味深い現象の舞台になっている。

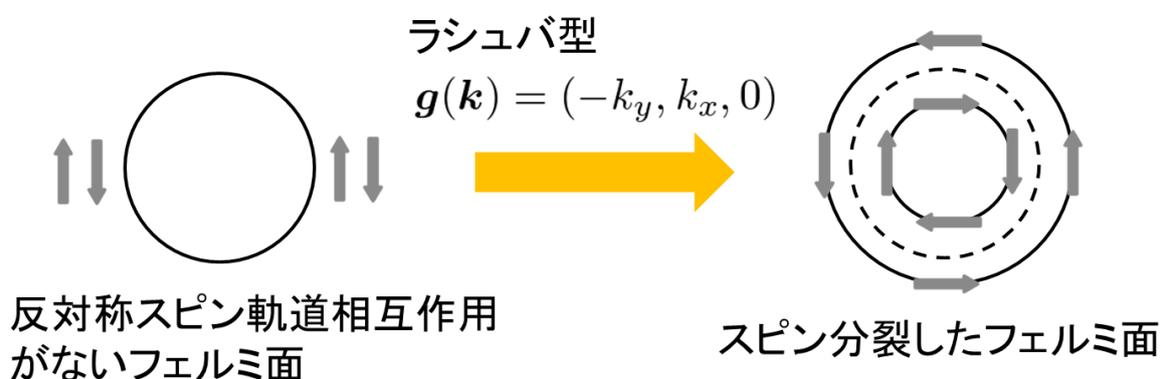


図 3 ラシュバ型スピン軌道相互作用によってスピン分裂したフェルミ面。矢印はそれぞれのフェルミ面上のスピン向きを表す。右図の点線はスピン分裂する前の縮退しているフェルミ面である。

3 反対称スピン軌道相互作用によって生じる現象

ここでは空間反転対称性の破れによって生じる反対称スピン軌道相互作用が引き起こす様々な現象をいくつか簡単に紹介する。

3.1 磁気電気効果

まずは、磁気電気効果 [25–28] について紹介する。磁気電気効果は簡単に言えば磁場が電流を、電場が磁化を生じさせる効果である。ここでは z 軸方向の空間反転対称性が破れているラシュバ型スピン軌道相互作用の場合を考える。磁場を x 軸方向に印加すると、反対称スピン軌道相互作用によりフェルミ面が図 4 のように y 軸方向に歪む。その結果、 y 軸方向に電流が流れる。ただし、常伝導状態では電気抵抗があるため、電流を流し続けるためには静的な磁場ではなく、動的な交流磁場を印加する必要がある。この逆効果も同様に説明できる。 y 軸方向に電場をかけて、電流を流すとフェルミ面が y 軸方向に歪み、それに伴い x 軸方向に磁化が生じる (図 4)。また、立方晶系のドレッセルハウス型スピン軌道相互作用の場合には印加磁場とそれによって生じる電流の向きは平行になる。逆も同様で印加した電場とそれによって生じる磁化の向きも平行になる。

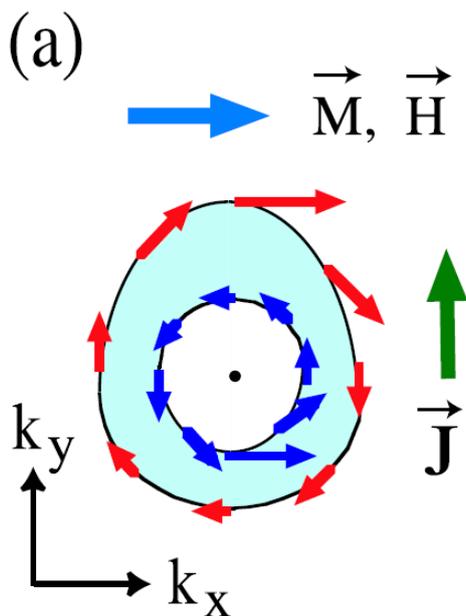


図 4 磁気電気効果を説明する模式図 [26]。ラシュバ型スピン軌道相互作用によりフェルミ面がスピン分裂している。

3.2 異常ホール効果

次に異常ホール効果 [25, 26, 28] について説明する。この現象でも磁気電気効果 (3.1 節) と同様に反対称スピン軌道相互作用によってスピン分裂したフェルミ面のスピン構造が重要になる。ここではラシュバ型スピン軌道相互作用の場合を考える。まず、 y 軸方向に電場をかけると、 y 軸方向に電流が流れる。それにより、フェルミ面が y 軸方向に歪む (図 5(a))。次に z 軸方向に磁場を印加すると、 z 軸回りにスピンを回転させるトルクが発生し、図 5(b) のように赤い矢印から青い矢印に

スピンの方向が回転する。このスピンの回転に伴い、反対称スピ軌道相互作用がフェルミ波数とスピンの垂直になるようにフェルミ面を回転させる (図 5(c))。最終的に x 軸方向にも非対称なフェルミ面になり、 x 軸方向に電流が流れる。これが空間反転対称性が破れた系における異常ホール効果である。また、同様の効果で電流ではなく熱流が流れることも可能である。それは異常熱ホール効果と呼ばれる。

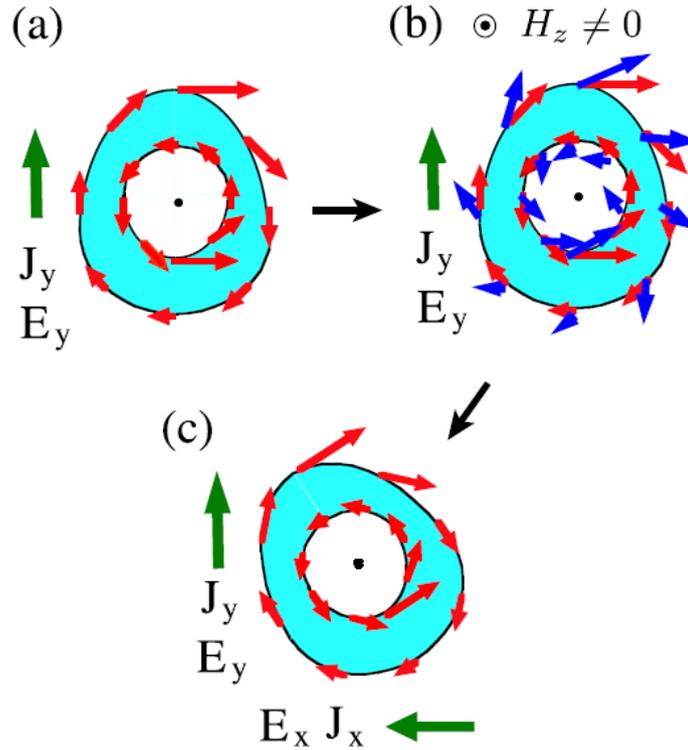


図 5 異常ホール効果を説明す模式図 [26]。ラシュバ型スピ軌道相互作用によりフェルミ面がスピン分裂している。

3.3 スピンホール効果

ここではスピンホール効果について紹介する [29]。スピンホール効果とは電流を試料に流したときにスピ軌道相互作用により電子がアップスピンとダウンスピンでそれぞれ逆方向に曲げられ、それによってスピン流が流れる現象である。半導体におけるスピンホール効果の理論研究はラッティンジャー模型に基づく研究 [1] とラシュバ型スピ軌道相互作用に基づく研究 [2] が行われており、ここでは後者を簡単に紹介する。ラシュバ型スピ軌道相互作用を考慮したヘテロ構造の 2 次元電子系の n 型半導体を再現する模型は、

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k})_z, \quad (4)$$

である。 λ がラシュバスピン軌道相互作用の大きさであり、これはゲート電圧によって制御される。このラシュバ型スピン軌道相互作用により、伝導バンドの縮退が解けて、電子をドープして n 型にすることでスピホール効果が現れる。一方で、反対称スピン軌道相互作用がない場合にはバンドはスピン縮退しているため、スピホール効果はそのバンド同士で打ち消し合い現れない。一般的に、バンドが分裂することで、分裂したバンドによるスピホール効果が互いに打ち消し合わないで全体的にはスピホール効果が現れる。

3.4 カイラル磁性

ここではカイラル磁性 [4, 30] について紹介する。その例となる物質が $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$ である [4]。図 6(a) に示されるように、その結晶構造はらせん構造を持ち明らかに空間反転対称性も破れている。結晶のらせん軸 (c 軸) に沿ってスピが少しずつねじれて配置されたカイラルらせん磁気秩序が現れ (図 6(b), (c))、この結晶構造はカイラル磁性結晶と呼ばれる。電子はスピン軌道相互作用を通じて磁気構造と結ばれ、その働きをするのがジャロシンスキー・守谷相互作用である。この相互作用がスピカイラリティの起源となっている。また、らせん軸に垂直方向に磁場を印加すると、図 6(d) に示されるようなカイラルソリトン格子が現れ実際にそれが観測されている。これは、スピをねじる働きがあるジャロシンスキー・守谷相互作用と磁場方向にスピを揃えようとするゼーマン相互作用との競合により生じる。カイラルらせん磁気秩序ではらせん構造が線形構造であるため位相情報を伝搬することはできないが、カイラルソリトン格子ではらせん構造が周期的にほぐれた非線形構造になり情報を伝搬できるようになる。このカイラルソリトン格子の周期 $L(H)$ は磁場により連続的に制御することができる。また、この磁気秩序はカイラル結晶構造に守られたものであり、試料全域で欠陥構造を示さない。このようにカイラル磁気秩序は磁気情報記録デバイスの開発、研究でも注目を集めている。

3.5 空間反転対称性が破れた超伝導

次に空間反転対称性が破れた超伝導 [5, 27, 31] について紹介する。その特徴例としてパリティ混成、ヘリカル超伝導、異常な常磁性効果などが挙げられる。

まず、パリティ混成について説明する。空間反転対称性がある場合には超伝導の秩序変数 $\Delta(\mathbf{k})$ はパリティ演算子の固有関数になっている。そのため $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta(-\mathbf{k})$ を満たすスピン一重項状態と $\Delta(\mathbf{k}) = -\Delta(-\mathbf{k})$ を満たすスピン三重項状態に分類することができる。しかし、空間反転対称性が破れているとパリティ演算子が良い量子数にならないため、スピン一重項超伝導とスピン三重項超伝導の混成が可能になる。

次にヘリカル超伝導について説明する。このヘリカル超伝導は面内に磁場を印加した場合に起こる。空間反転対称性が破れているとフェルミ面は磁場を印加する前からスピ分裂している。そこに図 7 のように面内に磁場が印加されると、磁場と垂直な方向にフェルミ面が歪む (ここでもラシュバ型スピン軌道相互作用の場合を考えている)。この場合にはバンド内の重心運動量が有限に

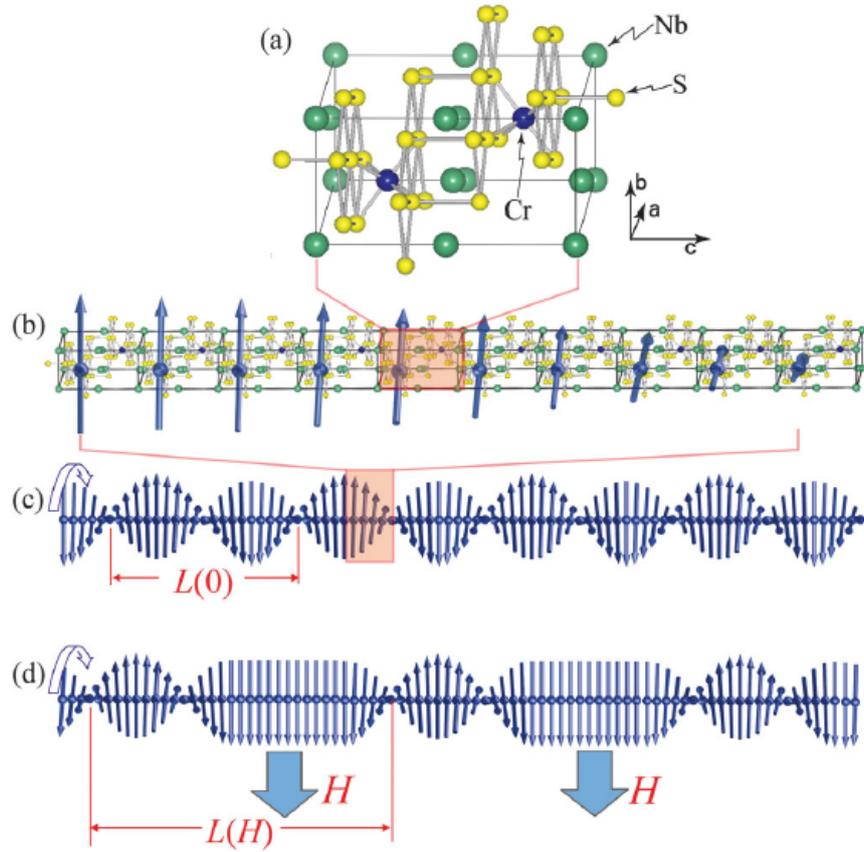


図6 $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$ のカイラル磁気結晶とカイラル磁気秩序の模式図 [4]。(a) 結晶構造。(b),(c) ゼロ磁場下ではカイラルらせん磁気秩序が現れる。(d) らせん軸に垂直な弱磁場により、カイラルソリトン格子が現れる。

なるようにクーパーペアが形成される。その結果、超伝導秩序変数に位相因子が付き、この状態をヘリカル状態と呼ぶ。これは FFLO(Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov) 状態と状況が似ている。しかし、FFLO 状態は低温領域でしか実現しないが、こちらは T_c 以下の全ての温度領域で実現する点が異なる。

最後に異常な常磁性効果の説明にはいる。この内容には超伝導磁化率の説明も含まれ、これは第 II 部と関係するので丁寧に説明する。ここでもまたラシュバ型スピン軌道相互作用の場合を例にとる。この場合のフェルミ面は図 3 のようにスピン分裂している。磁場応答として、まず c 軸方向に磁場を印加する場合を考える。ラシュバ型スピン軌道相互作用によって ab 面内に寝ていたスピンは磁場によって少し起き上がる。この時、スピンが残るのはスピン分裂したバンドに挟まれた領域である。そのため、フェルミ面上だけではなく 2 つのバンドに挟まれた電子全てのバンド間遷移によってスピン磁化率は決まる。この磁化率はバンド間の遷移で決まるのでヴァンブレック磁化率と呼ばれる。ただし、よく知られた軌道自由度に由来するヴァンブレック磁化率とは異なるので注意が必要である。次に磁場を ab 面に印加した場合を考える。この場合は先ほど示した図 7 のよう

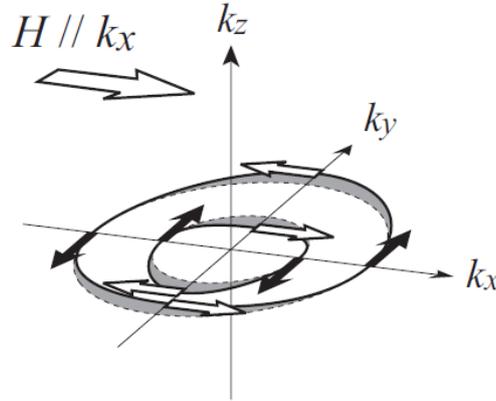


図7 面内磁場中の分裂したフェルミ面。点線は $H = 0$ の時のフェルミ面 [5]。

にフェルミ面は磁場に垂直方向に歪む。このため、バンド内の遷移によるパウリ磁化率が生じるので、スピン磁化率はこのパウリ磁化率と先ほどのヴァンブレック磁化率の2つから成る。ここまでの説明は正方晶系の c 軸方向の空間反転対称性が破れている場合である。立方晶系のように3軸全ての方向に空間反転対称性が破れている場合にはスピン磁化率はパウリとヴァンブレック磁化率の両方の寄与で決まる。

このように空間反転対称性が破れていると、この系特有のヴァンブレック磁化率が現れる。これが超伝導状態の上部臨界磁場に大きな影響を与える。超伝導が磁場によって壊れるメカニズムは常磁性対破壊効果と軌道対破壊効果の2種類がある。それぞれの効果によって決まる上部臨界磁場の内、小さい方がその物質の上部臨界磁場となる。ここでは常磁性対破壊効果だけを考え、その場合の上部臨界磁場を式で表すと、

$$H_{c2} = \frac{H_p}{\sqrt{1 - \chi_s/\chi_n}}, \quad (5)$$

となる。ここで H_p はBCS理論から求まるスピン一重項超伝導の常磁性対破壊効果で決まる上部臨界磁場である。式(5)の右辺に超伝導磁化率 χ_s が出てくるので、その振る舞いを説明する必要がある。まず、空間反転対称性がある場合を見ていく。スピン一重項超伝導の基底状態では全ての電子は $S = 0$ の対を形成しているため、磁場の方向によらずに磁化率はゼロとなる。有限温度では準粒子が熱的に励起されるので、有限の磁化率を持つ。図8(a)にその振る舞いを示す。 s 波と d 波では振る舞いが多少異なるが、磁場の方向によらずに $T = 0$ で $\chi_s/\chi_n = 0$ となるのが特徴である。これに対してスピン三重項超伝導の磁化率は異方的である(図8(b))。特に d ベクトルと垂直な磁場に対しては転移温度以下でも $\chi_s/\chi_n = 1$ となる。このように磁化率の振る舞いが異なるので、NMR(核磁気共鳴)法のナイトシフトによる磁化率の測定はクーパーペアの対称性を決める有用な手段となっている。

次に空間反転対称性が破れているラッシュバ型超伝導の場合の磁化率を見ていく [25, 32, 33]。空間反転対称性が破れると先ほど述べたヴァンブレック磁化率が現れるが、これは超伝導転移の影響を

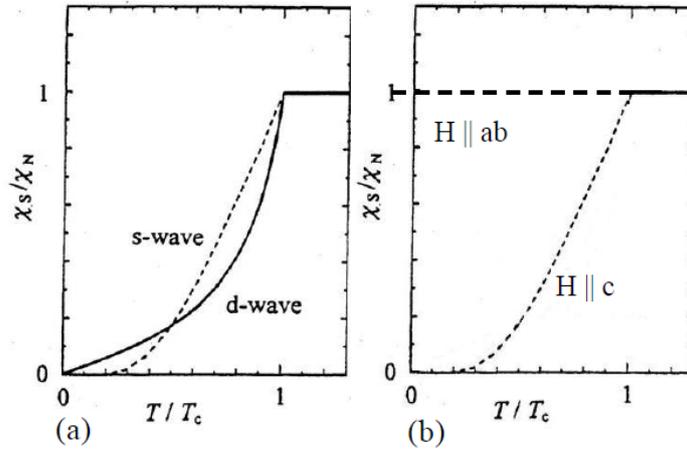


図 8 超伝導状態での磁化率の温度依存性 [5]。(a) s 波と d 波のスピン三重項状態。(b) スピン三重項状態。

ほとんど受けない。その理由は多くの空間反転対称性が破れた超伝導では超伝導秩序変数のエネルギースケールがフェルミ面のスピン分裂のエネルギースケールに比べて小さいからである。一方でパウリ磁化率は超伝導の影響を受けて、絶対零度ではなくなる。これらをまとめると、磁場が c 軸の場合、スピン磁化率はヴァンブレック磁化率のみからなるので $\chi_s = \chi_n$ が成り立つ。 ab 面に磁場を印加した場合は、スピン磁化率はパウリとヴァンブレック磁化率からなるので、 c 軸とは異なる振る舞いをする。特に正方晶系で等方的なフェルミ面の場合にはパウリ磁化率とヴァンブレック磁化率は等しくなるので絶対零度で $\chi_s/\chi_n = 1/2$ 、立方晶系の等方的なフェルミ面の場合にはヴァンブレック磁化率はパウリ磁化率の 2 倍になるので $\chi_s/\chi_n = 2/3$ になる (図 9)。また、これらの振る舞いは超伝導秩序変数によらない。ここで上部臨界磁場に話を戻す。正方晶系では超伝導磁化率の振る舞いに大きな異方性があり、それがそのまま上部臨界磁場にも現れる。つまり、磁場が c 軸方向の場合には $\chi_s = \chi_n$ となるので式 (5) から分かるように常磁性対破壊効果で決まる上部臨界磁場は無限大になる。そのため、常磁性対破壊は起こらず、上部臨界磁場は軌道対破壊効果で決まる。一方、磁場が ab 面の場合には常磁性対破壊効果を見捨てることはできないが、例えば正方晶では $\chi_s/\chi_n = 1/2$ となるので通常の常磁性対破壊効果で決まる上部臨界磁場より $\sqrt{2}$ 倍大きくなるので、常磁性対破壊効果は抑制される。このようにスピン分裂したバンド間の寄与で決まるヴァンブレック磁化率が元となり、このような振る舞いが起こる。

3.6 局所的な空間反転対称性が破れた系

ここまでは空間反転対称性が大域的に破れている場合を取り扱ってきた。しかし 2.1 節で紹介したように反対称スピン軌道相互作用は (1) パリティが異なる軌道間の局所的混成、(2) 原子間の飛び移りによるパリティが異なる軌道間の混成、(3) 原子内の LS 結合の 3 つの要素があれば存在する。この中で (1) の効果は空間反転対称性が破れている場合にもみ現れると述べたが、それは反転中心にない原子には必ず現れるものであり、大域的に空間反転対称性が破れる必要はない。つま

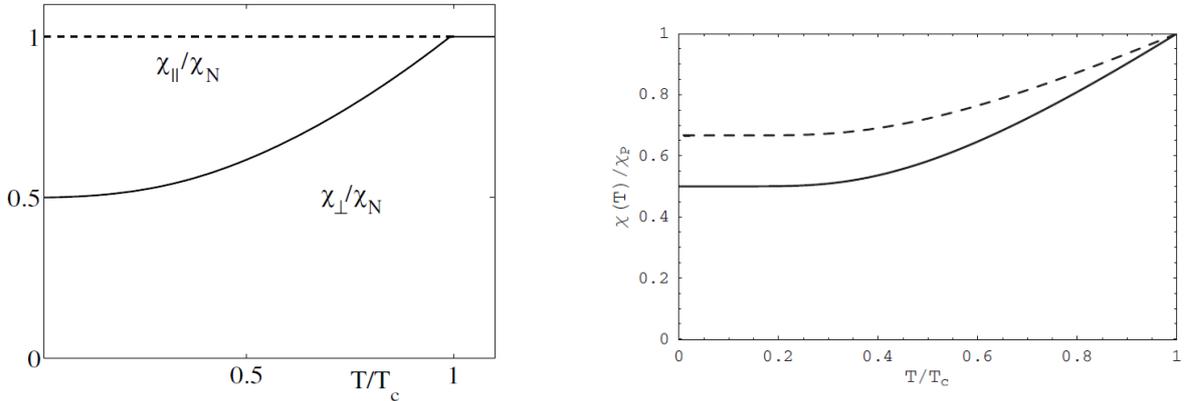


図9 ラシュバ型の場合の超伝導磁化率。左：正方晶系 [32]。右：実線が正方晶系、破線が立方晶系 [33]。

り、系全体での空間反転対称性は保たれているが、原子 1 つに注目して局所的に空間反転対称性が破れている場合にも反対称スピン軌道相互作用は現れる。ダイヤモンドやグラフェンなどがこれに該当する。ここでその簡単な例として 3 層系 (図 10) を紹介する。図 10 からすぐにわかるように、系全体での巨視的な空間反転対称性は破れていない。また、中央のレイヤーに注目してやると c 軸方向の上下に対称的にそれぞれ 1 枚ずつレイヤーが存在する。そのため、中央のレイヤーでは c 軸方向の鏡映対称性が保たれている。しかし、1 番上の外側のレイヤーに注目すると、その上には何も無いが下にはレイヤーが存在しているので、 c 軸方向の鏡映対称性をもたない。同様にして 1 番下の外側のレイヤーでも c 軸方向の鏡映対称性がない。このように大局的には空間反転対称性があるが局所的には空間反転対称性がないので、このよう系を局所的な空間反転対称性が破れた系と見なすことができる。また、このような場合には反対称スピン軌道相互作用が空間非一様な形で現れる。これまでの説明での反対称スピン軌道相互作用は系全体で一様であったが、多層系では図 10 によるスタガードな反対称スピン軌道相互作用が現れる [34]。中央のレイヤーには空間反転対称性があるので反対称スピン軌道相互作用が現れない。このような多層系の例としては重い電子系超伝導体の CeCoIn_5 と通常金属である YbCoIn_5 の層を交互に重ねた人工超格子 [35, 36] や多層系銅酸化物超伝導 [37] などが挙げられる。

局所的な空間反転対称性の破れによっても反対称スピン軌道相互作用が生じると述べてきたが、実際にそれが物性に影響を与えるかどうかを見ていく。多層系を対象にした電子状態、超伝導秩序変数、超伝導磁化率が調べられており [34]、ここではその超伝導磁化率の計算結果を図 12 に示す。スタガードな反対称スピン軌道相互作用 α が層間ホッピング t_{\perp} を越えたあたりから大局的な空間反転対称性が破れている場合の超伝導磁化率と同じような振る舞いになる。このように局所的な空間反転対称性が破れた場合にも反対称スピン軌道相互作用は現れ、それが物性に影響を与えることが分かる。ただし、反対称スピン軌道相互作用の影響が常に強く現れるわけではない。その条件を一般化すると反対称スピン軌道相互作用がユニットセル内の異なる副格子間を結ぶエネルギースケールより大きくなることである。副格子間を結ぶエネルギースケールは今の多層系の場合には層間ホッピング t_{\perp} に対応している。また、この反対称スピン軌道相互作用がより現れやすくなる

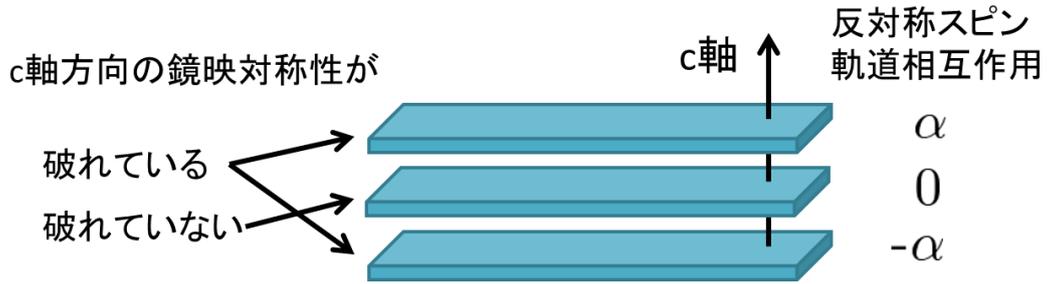


図 10 局所的な空間反転対称性が破れている 3 層系の概略図。中央のレイヤーでは c 軸方向の鏡映対称性は保たれているが、外側のレイヤーでは鏡映対称性が破れている。反対称スピン軌道相互作用 α は空間非一様なスタガードな形になる。

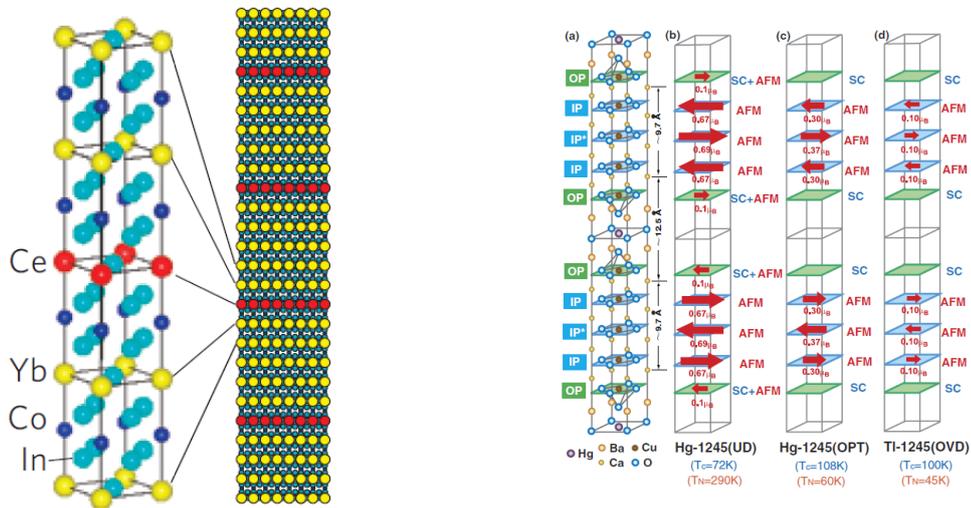


図 11 左図:CeCoIn₅(1 層) と YbCoIn₅(5 層) の人工超格子の結晶構造 [36]。右図:多層系銅酸化物超伝導 [37]

条件が提案されている。その 1 つが多層系において各層の電荷が大きく異なる場合である。その理由は中心層の電荷密度が他の層と異なる場合に有効的に層間ホッピングが抑えられるためである [38]。他には非共型な結晶では副格子間ホッピングに波数依存性が現れ、そのホッピングが部分的に消失したところでは反対称スピン軌道相互作用が現れやすくなる [39]。局所的な空間反転対称性の破れの影響は実際の実験結果にも現れている。CeCoIn₅ と YbCoIn₅ の人工超格子の上部臨界磁場の観測結果において常磁性対破壊効果の抑制が見られており [14, 36, 40]、その原因が局所的な空間反転対称性の破れによるものだと考えられている。さらに理論研究ではエキゾチックな超伝導相が実現することが報告されている [34, 41–44]。

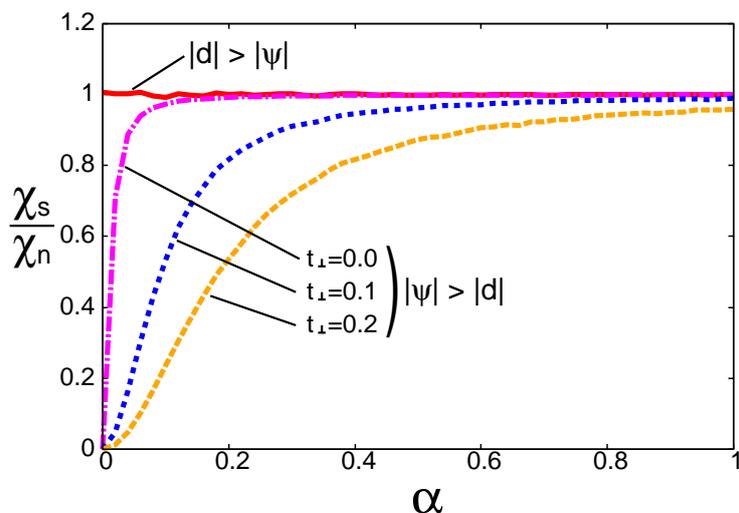


図 12 絶対零度における 2 層系の超伝導磁化率 [34]。ここで、 ψ と d はそれぞれスピン一重項と三重項超伝導の秩序変数である。 t_{\perp} は層間ホッピングを表す。

4 本論文の目的

ここまで述べてきたように空間反転対称性が破れた系では反対称スピン軌道相互作用が主役となり興味深い現象が数多く起こる。そこで本論文では反対称スピン軌道相互作用に関する研究を 2 つ行った。

1 つ目がスピン分裂したフェルミ面のトポロジカル転移に注目した研究である。空間反転対称性が破れた超伝導体、 $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ と $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ は同じ結晶対称性を持つにも関わらず、異なる超伝導特性を示す。第一原理バンド計算によると、 $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ では反対称スピン軌道相互作用によるスピン分裂したフェルミ面の片方が消失する。これが超伝導特性に大きな影響を与えていると考え、フェルミ面のトポロジーに注目した研究を行った。具体的には超伝導磁化率の計算を行い、様々なフェルミ面のトポロジカル転移での普遍的な振る舞いを調べた。

2 つ目の研究は空間反転対称性が破れた系における電子相関効果を調べたものである。空間反転対称性が破れた超伝導は重い電子系で多く見つかっており、盛んに研究が行われている。このような重い電子系では電子相関効果が本質的になってくる。また、反対称スピン軌道相互作用に由来する現象が電子相関効果によって顕著に現れやすくなることも報告されている。しかし、このような状況にも関わらず反対称スピン軌道相互作用と電子相関効果の間関係を調べた研究はあまり多くない。そこで、ここではフェルミ液体での準粒子の性質についての基本的なことを調べた。解析方法としては 2 次元ラシュバ・ハバードモデルの摂動論を用いて行った。

それでは、以上の内容をそれぞれ第 II 部と第 III 部で詳しく議論していく。この 2 つの研究のつながりはあまりないので、第 II 部、第 III 部それぞれでまとめを行う。

第 II 部

フェルミ面のトポロジカル転移

反対称スピン軌道相互作用によるフェルミ面のトポロジカル転移は第一原理バンド計算によると空間反転対称性が破れている超伝導体 $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ で起こり、これが超伝導特性に大きな影響を与えると考えられている。第 II 部ではこの反対称スピン軌道相互作用によるフェルミ面のトポロジカル転移に注目する。

まず、5 節では $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ についての説明を行い、研究目的を述べる。次に 6 節では用いたモデルハミルトニアンを紹介する。そして、スピン磁化率の数値計算の結果を 7 節で示す。第 II 部の最後の 8 節でまとめと議論を行う。

5 研究背景と研究目的

数多くある空間反転対称性が破れた超伝導体の中でもアンチペロブスカイトの構造を持つ $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ [19] と $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ [20] は特に興味深い性質を示す。この二つの物質は同じ結晶構造を持つにもかかわらず、異なる超伝導特性を示す [19, 20, 45–53]。超伝導の秩序変数が $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ ではフルギャップなのに対し、 $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ はラインノードを持つことが実験結果から示唆されている [45–48, 50, 53]。NMR のナイトシフトにおいては図 13、14 に示されるように温度を下げていき超伝導転移温度以下になると $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ では減少するが、一方で $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ ではほとんど変化しない [47, 53]。これらの振る舞いから $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ は反対称スピン軌道相互作用によってスピン三重項 P 波超伝導が混成した BCS 的な S 波超伝導であると示唆される。一方で $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ の実験結果は 3.5 節で紹介した空間反転対称性が破れた超伝導の一般的な理論から予想される振る舞いと矛盾する [5]。

電子相関効果を無視した弱結合理論によると、立方晶の空間反転対称性が破れた超伝導の磁化率は絶対零度で常伝導状態の値の $2/3$ に減少するはずである [25, 33]。しかし、 $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ のナイトシフトの実験結果からはスピン磁化率のそのような減少は見られない [47, 53]。この実験結果から $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ はスピン三重項超伝導であると提案されている [47, 53]。しかしながら、 $\mu_B H \ll k_B T_c$ のように磁場が弱いときにはスピン磁化率は超伝導秩序変数の対称性に依らない [54]。実際に理論研究 [55, 56] で示されている超伝導秩序変数でも $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ のナイトシフトの結果と矛盾している。超伝導状態では電子相関効果によってスピン磁化率が增强されるという報告 [25] もある (図 30) が、 $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ と $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ では電子相関効果は無視できるので [49, 51]、電子相関効果がスピン磁化率增强の原因とは考えられない。他にも空間反転対称性が破れている重い電子系の超伝導体 CePt_3Si では磁気秩序の影響が指摘されている [22, 57]。しかし、 $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ では磁気秩序は起こらない。このように従来型の空間反転対称性が破れた超伝導体である $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ に比べて、 $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ の超伝導状態ははっきりと解明されない。

$\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ と $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ の違いとしては反対称スピン軌道相互作用の大きさが挙げられ、 $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ で

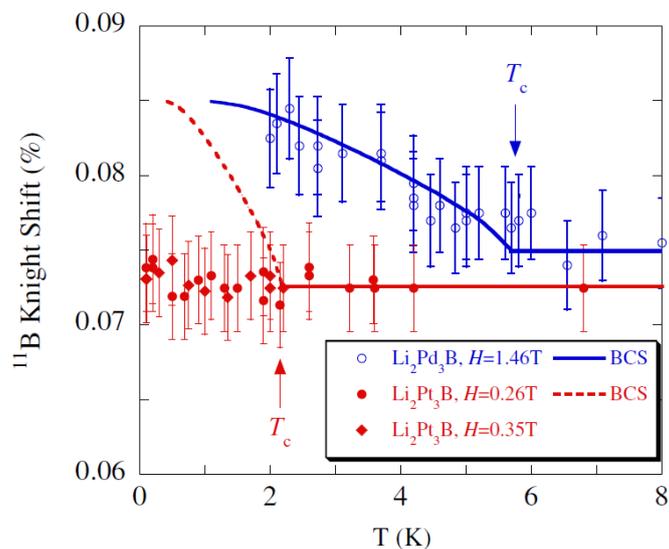


図 13 $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ と $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ におけるナイトシフト [47]。ここでは超微細結合定数が負であるため、ナイトシフトの増加はスピン磁化率の減少に対応している。

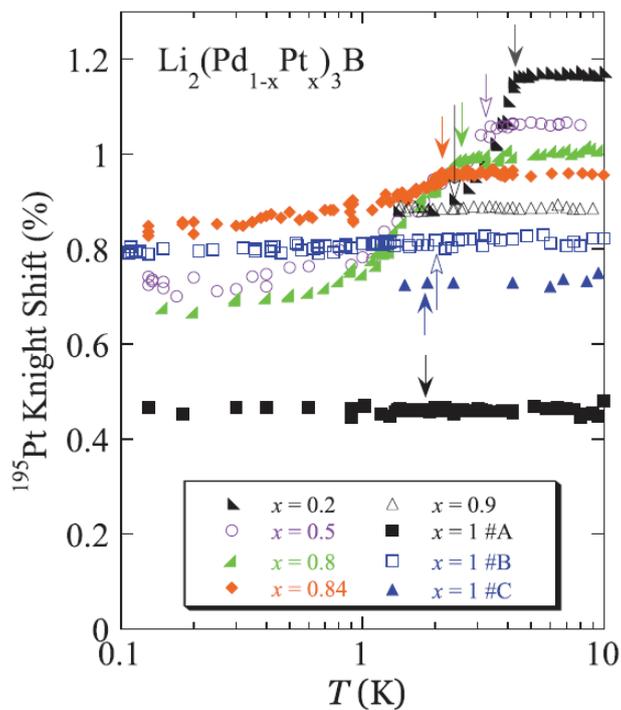


図 14 固溶系 $\text{Li}_2(\text{Pd}_{1-x}\text{Pt}_x)_3\text{B}$ におけるナイトシフト [53]。

は大きな反対称スピン軌道相互作用が指摘されている [58]。結晶構造の変形 [53] と同様に Pt イオンの LS 結合の増加によって、 $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ の反対称スピン軌道相互作用が大いに増強される。第一原理バンド計算によると反対称スピン軌道相互作用のこの増強によって、フェルミ面のトポロジカル転移が起こる [59]。 $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ のフェルミ面はいくつかのスピン分裂したフェルミ面のペアからなる。一方、 $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ のフェルミ面ではスピン分裂したフェルミ面の片方がいくつか消失している。固容系 $\text{Li}_2(\text{Pd}_{1-x}\text{Pt}_x)_3\text{B}$ の結晶構造の実験研究によると、約 $x \sim 0.8$ のところで構造変化が起こる [53]。おそらく、ここでフェルミ面のトポロジカル転移が起こっていると考えられる。

本論文のこの第 II 部での研究目的は超伝導状態での反対称スピン軌道相互作用によるフェルミ面のトポロジカル転移の影響を明かにすることである。ここでは超伝導状態のスピン磁化率における 3 種類のフェルミ面のトポロジカル転移の役割を調べる。1 つ目の (A) タイプは図 15(a) で示されるように反対称スピン軌道相互作用の増加によってスピン分裂したフェルミ面の 1 つが消える場合である。2 つ目の (B) タイプは図 15(b) で示されるように反対称スピン軌道相互作用の増加によってフェルミ面がディラックポイントを横切る場合である。最後に (C) タイプは図 15(c) のようにスピン分裂したフェルミ面の 1 つがヴァン・ホープ特異点を横切る場合である。ここでの解析ではシングルバンドに基づいて行うため、 $\text{Li}_2(\text{Pd}_{1-x}\text{Pt}_x)_3\text{B}$ の電子構造は再現されていない。しかし、以下で示されるようにフェルミ面のトポロジカル転移はバンド構造に依らない。そのため、フェルミ面のトポロジカル転移が $\text{Li}_2(\text{Pd}_{1-x}\text{Pt}_x)_3\text{B}$ の異なる超伝導特性の原因であると期待される。また、本研究はこの物質に限らずに大きな反対称スピン軌道相互作用を持つ他の空間反転対称性が破れた超伝導体にも適用できると考える。

6 模型

ここからは用いる模型を紹介する。シングルバンドのハミルトニアンは

$$H = \sum_{\mathbf{k},s} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} + \alpha \sum_{\mathbf{k},s,s'} \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s'} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},s,s'} [\Delta_{ss'}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger + \text{h.c.}], \quad (6)$$

である。ここで $c_{\mathbf{k}s}(c_{\mathbf{k}s}^\dagger)$ は運動量 \mathbf{k} 、スピン s の電子の消滅 (生成) 演算子である。分散関係 $\varepsilon(\mathbf{k})$ は反対称スピン軌道相互作用を大きくした際にフェルミ面のトポロジカル転移が起こるように決める。化学ポテンシャル μ は分散関係に含まれており、サイト当たりの粒子数 n が一定になるように決まる。第 2 項が反対称スピン軌道相互作用である。反対称な \mathbf{g} ベクトル $\mathbf{g}(-\mathbf{k}) = -\mathbf{g}(\mathbf{k})$ のため、時間反転対称性は保存する。この第 2 項によりバンドの二重縮退が $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \pm \alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})|$ のように解かれる。本研究における \mathbf{g} ベクトルは、2 次元系ではラシュバ型スピン軌道相互作用 $\mathbf{g}(\mathbf{k}) = (-\sin k_y, \sin k_x, 0)$ 、3 次元系ではキュービック型スピン軌道相互作用 $\mathbf{g}(\mathbf{k}) = (\sin k_x, \sin k_y, \sin k_z)$ を採用する。

式 (6) の第 3 項は平均場近似による超伝導の秩序変数である。秩序変数 $\Delta_{ss'}(\mathbf{k})$ は反対称スピン軌道相互作用によってスピン一重項と三重項が混成する。しかし、絶対零度でのスピン磁化率は大きな反対称スピン軌道相互作用 $|\Delta_{ss'}| \ll \alpha$ では秩序変数の対称性に依らない [25, 33, 54]。そのた

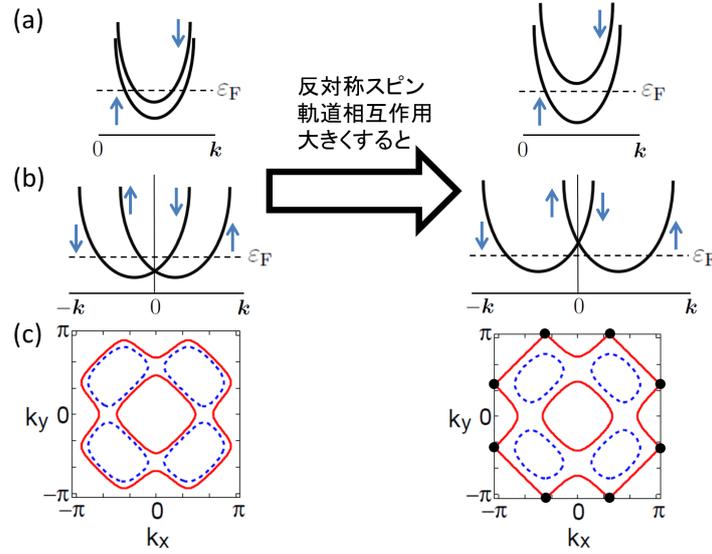


図 15 フェルミ面のトポロジカル転移の模式図。(a) (A) タイプ: スピン分裂したフェルミ面の 1 つが消える。(b) (B) タイプ: フェルミ準位がディラックポイントを横切る。(a) と (b) での太線はスピン分裂した 2 つのバンドを表す。矢印はそれぞれのバンドのスピンの向きである。(c) (C) タイプ: フェルミ面がヴァン・ホーブ特異点 (丸点) を横切る点線と実線は ε_+ バンドと ε_- バンドのフェルミ面をそれぞれ表す。

め、スピン三重項成分を無視し、スピン一重項 S 波の秩序変数を仮定する ($\Delta_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) = -\Delta_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) = \psi$)。いくつかの実験結果 [47, 53] においては $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ は P 波超伝導であると示されている。しかし、スピン磁化率の解析からは S 波と P 波超伝導の区別をすることはできないため、ここではその可能性には触れない。秩序変数の大きさは $|\psi| \leq 0.01$ と小さめにとる。これは多くの空間反転対称性が破れた超伝導体で実現している $|\Delta_{ss'}(\mathbf{k})| \ll \alpha$ を満足する。

7 計算結果

ここ節では絶対零度 $T = 0$ での超伝導状態のスピン磁化率の計算を行う。スピン磁化率 $\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \langle M \rangle / H$ の計算方法は磁場 H での磁化 $\langle M \rangle$ を計算し、 $H \rightarrow 0$ の極限を取ることで求める。ゼーマン項として $H_Z = -(g\mu_B/2)\sum_{\mathbf{k}, s, s'} \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s'}$ を導入する。ここで $g = 2$ と仮定し、 μ_B はボーア磁子である。まず、最初にラシュバ型スピン軌道相互作用を持つ 2 次元系の計算を行い、その後にキュービック型スピン軌道相互作用を持つ 3 次元系の計算を行う。2 次元系においては、 ab 面のスピン磁化率に注目する。なぜなら、 c 軸方向のスピン磁化率は超伝導状態になっても減少しないからである [32]。一方で 3 次元の立方晶系ではスピン磁化率は等方的である。スピン磁化率は常伝導状態の値で規格化された χ_s/χ_n の値を見ていく。ここで、 χ_s は超伝導状態のスピン磁化率であり、常伝導状態のスピン磁化率 χ_n は $|\Delta_{ss'}(\mathbf{k})| = 0$ として計算される。

7.1 2次元系

ラシュバ型スピン軌道相互作用 $g(\mathbf{k}) = (-\sin k_y, \sin k_x, 0)$ の2次元系の計算から始める。分散関係は、

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2t_1(\cos k_x + \cos k_y) + 4t_2 \cos k_x \cos k_y + 2t_3(\cos 2k_x + \cos 2k_y) - \mu. \quad (7)$$

と仮定する。バンド幅 $W = 8$ の $(t_1, t_2, t_3, \mu) = (-0.25, 0.5, 0.8, 0.1)$ のパラメーターではタイプ (A) のトポロジカル転移が $\alpha = 0.325$ で起こる (図 16)。図 17(a) は反対称スピン軌道相互作用 α の関数としての規格化されたスピン磁化率 χ_s/χ_n を示す。 $\alpha = 0.325$ で規格化されたスピン磁化率の不連続な飛びが見られる。この飛びは α を大きくすると起こるタイプ (A) のトポロジカル転移での常伝導状態のスピン磁化率 χ_n の急激な減少によって引き起こされる。一方で、超伝導状態のスピン磁化率 χ_s はこのトポロジカル転移の影響をほとんど受けない。

ここでスピン磁化率を 3.5 節でも紹介したパウリ項とヴァンブレック項に分けて、これらの変化を明らかにする。スピン磁化率のヴァンブレック項は常伝導状態の動的なスピン磁化率 $\chi_n(\mathbf{q}, \omega)$ を用いて $\chi_V = \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \chi_n(\mathbf{q}, \omega)$ と定義される。一方で、実験で観測されるスピン磁化率は $\chi_n = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_n(\mathbf{q}, \omega)$ として得られる。パウリ項はこの差 $\chi_P = \chi_n - \chi_V$ である。このパウリ項 χ_P はバンド内の寄与から生じ、絶対零度 $T = 0$ では完全に抑制される。一方でヴァンブレック項 χ_V は ε_+ と ε_- バンドのバンド間遷移から生じ、これは超伝導の影響をほとんど受けない。ここでのヴァンブレック項 χ_V は軌道自由度から生じる通常の温度に依存しないヴァンブレック磁化率とは異なるので注意が必要である。ここで出てくるヴァンブレック項 χ_V は反対称スピン軌道相互作用 α がフェルミエネルギーに比べて十分小さいときにはパウリ項 χ_P と同じような温度依存性を示す。このように、この χ_V は NMR のナイトシフトのスピン成分 K_s に含まれる。一方で軌道自由度から生じる通常のヴァンブレック磁化率は軌道部分 K_{orb} に含まれる。NMR の実験でよく解析

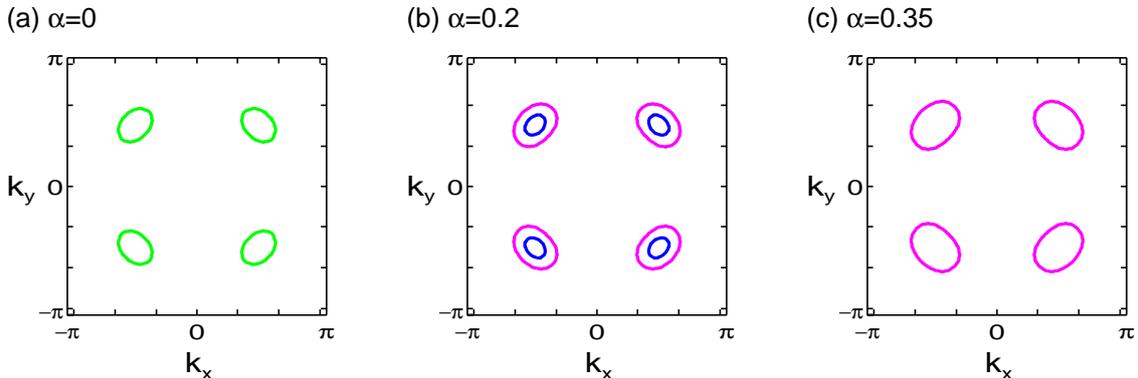


図 16 2次元系におけるタイプ (A) のフェルミ面のトポロジカル転移。(a) $\alpha = 0$ ではフェルミ面がスピン縮退している。(b) $\alpha = 0.2$ でのスピン分裂したフェルミ面。青線が ε_+ 、紫線が ε_- のバンドのフェルミ面を表す。(c) $\alpha = 0.35$ ではタイプ (A) のトポロジカル転移により ε_+ のバンドのフェルミ面が消えている。

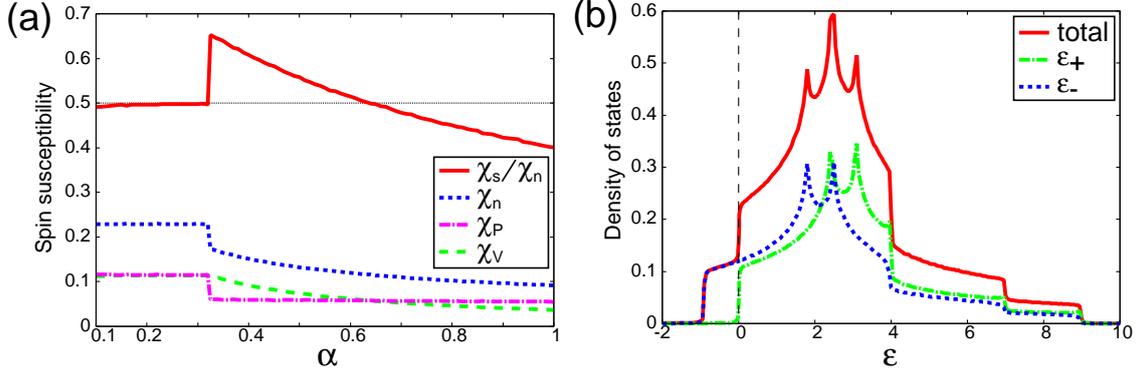


図 17 (a) ラッシュバ型スピン軌道相互作用をもつ 2 次元系での規格化されたスピン磁化率 χ_s/χ_n (実線)。式 (7) の分散関係のパラメータは $(t_1, t_2, t_3, n) = (-0.25, 0.5, 0.8, 0.1)$ と仮定する。この時、 $\alpha = 0.325$ でタイプ (A) のトポロジカル転移が起こる。常伝導状態のスピン磁化率 χ_n は点線で示されている。また、パウリ項 χ_P とヴァンブレック項 χ_V は点破線と破線でそれぞれ示されている。図 17(a) と 18 と 20 の水平の細い点線は従来型のラッシュバ型超伝導体の規格化されたスピン磁化率 $\chi_s/\chi_n = 1/2$ [32] を表す。(b) $\alpha = 0.325$ での常伝導状態の状態密度。実線は全バンドの状態密度を表す。 ϵ_+ と ϵ_- バンドの状態密度は点破線と点線でそれぞれ示されている。垂直の破線はフェルミエネルギーを表す。

されているように、ここではスピン部分 K_s からなるスピン磁化率に焦点を当てている。そのスピン磁化率は常伝導状態では $\chi_n = \chi_P + \chi_V$ として得られる。一方、超伝導状態ではヴァンブレック項とほぼ等しい $\chi_s \approx \chi_V$ 。

パウリ項 χ_P はフェルミ準位の状態密度に比例するから、タイプ (A) のフェルミ面のトポロジカル転移におけるフェルミ面の消失は χ_P を χ_n と同じように減少させる。2 次元系では状態密度の端が不連続であるから (図 17(b))、対応してパウリ項の減少は不連続な形で現れる。一方で超伝導状態のスピン磁化率はヴァンブレック項 χ_V から決まるので、フェルミ面の消失の影響をほとんど受けない。このような理由で規格化されたスピン磁化率 χ_s/χ_n はタイプ (A) のフェルミ面のトポロジカル転移で増加する。反対称スピン軌道相互作用が大きな領域 $\alpha > 0.325$ では α を大きくしていくと χ_s/χ_n は徐々に減少していく。これはフェルミ面の分裂幅が大きくなりヴァンブレック項が小さくなるからである。反対称スピン軌道相互作用 α が臨界値 $\alpha_c = 0.325$ より少し大きいときに、 χ_s/χ_n が典型的な値 $1/2$ よりもかなり大きくなっていることを強調しておく。

次にタイプ (B) のフェルミ面のトポロジカル転移を考える。式 (7) のパラメータとして $(t_1, t_2, t_3, n) = (-1, 0, 0, 0.1)$ と仮定すると、 $\alpha = 1.22$ でフェルミ面がディラックポイントを横切る。図 18 に示されているように $\alpha > 1.22$ において χ_s/χ_n はタイプ (A) とは対照的に減少する。これはフェルミ準位での状態密度が増加し、このためパウリ項 χ_P が $\alpha > 1.22$ で増加するからである。

規格化されたスピン磁化率 χ_s/χ_n はタイプ (C) のフェルミ面のトポロジカル転移で増加することが藤本によって調べられている [25]。本研究でもその結果を再現したが、タイプ (A) のトポロジカル転移に比べて規格化されたスピン磁化率の増強は小さい。ここで式 (7) のパラメータとして

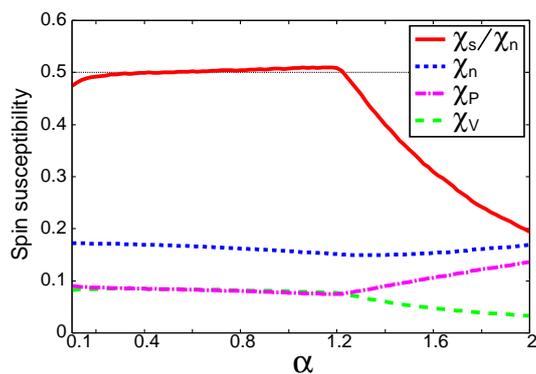


図 18 式 (7) のパラメーターが $(t_1, t_2, t_3, n) = (-1, 0, 0, 0.1)$ のときの規格化されたスピン磁化率。タイプ (B) のフェルミ面のトポロジカル転移は $\alpha = 1.22$ で起こる。この図の線は図 17(a) と同じ量である。

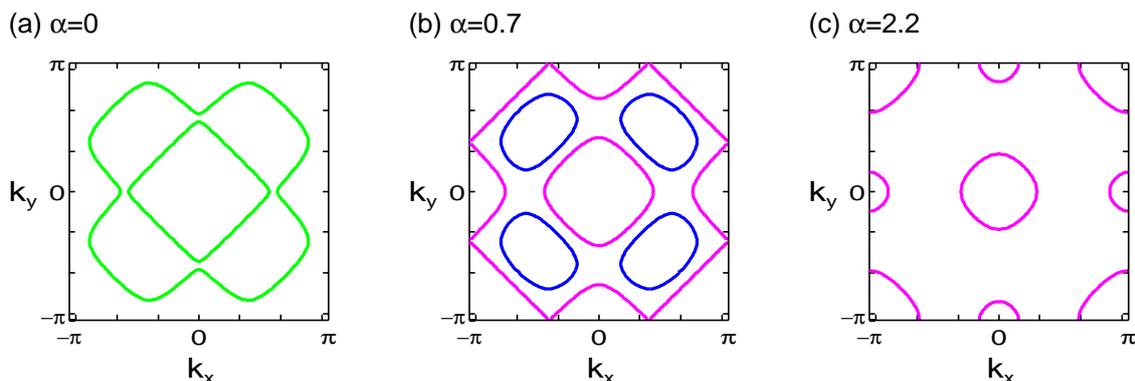


図 19 2次元系におけるタイプ (A) と (C) のフェルミ面のトポロジカル転移。(a) $\alpha = 0$ ではフェルミ面がスピン縮退している。(b) $\alpha = 0.7$ でのスピン分裂したフェルミ面。青線が ε_+ 、紫線が ε_- のバンドのフェルミ面を表す。 ε_- バンドのフェルミ面がヴァン・ホープ特異点に掛かっていた。(c) $\alpha = 0.22$ ではタイプ (A) のトポロジカル転移で ε_+ のバンドのフェルミ面が消えている。

$(t_1, t_2, t_3, n) = (-0.25, 0.5, 0.8, 0.8)$ と仮定すると、 $\alpha = 0.69$ でタイプ (C) のトポロジカル転移が起こる。図 20 から χ_s/χ_n が転移点 $\alpha = 0.69$ で減少し、そこから α を大きくしていくと $\alpha > 0.69$ では増加しているのが分かる。さらに、 α を大きくしていくと χ_s/χ_n は $\alpha = 2.16$ で起こるタイプ (A) のトポロジカル転移で大きく増加する (フェルミ面の α による変化の様子は図 19 に示されている)。このように、タイプ (C) のトポロジカル転移による χ_s/χ_n の $\alpha > 0.69$ における増加がタイプ (A) のトポロジカル転移による増加より小さいことが分かる。

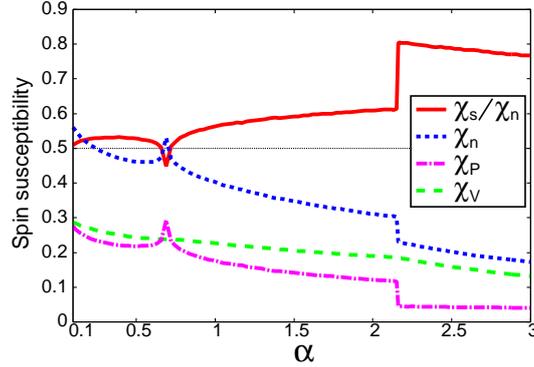


図 20 式 (7) のパラメーターが $(t_1, t_2, t_3, n) = (-0.25, 0.5, 0.8, 0.8)$ のときの規格化されたスピン磁化率。タイプ (C) のフェルミ面のトポロジカル転移が $\alpha = 0.69$ で起こり、タイプ (A) のトポロジカル転移が $\alpha = 2.16$ で起こる。この図の線は図 17(a) と同じ量である。

7.2 3次元系

ここからは立方対称性の 3 次元系を見ていく。キュービック型スピン軌道相互作用を考え、 g ベクトルは $g(\mathbf{k}) = (\sin k_x, \sin k_y, \sin k_z)$ と仮定する。分散関係は、

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = & 2t_1(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) \\ & + 4t_2(\cos k_x \cos k_y + \cos k_y \cos k_z + \cos k_z \cos k_x) \\ & + 8t_3 \cos k_x \cos k_y \cos k_z \\ & + 2t_4(\cos 2k_x + \cos 2k_y + \cos 2k_z) - \mu, \end{aligned} \quad (8)$$

とする。バンド幅が $W = 17.24$ のパラメーター $(t_1, t_2, t_3, t_4, n) = (-0.8, 0.275, 0.1125, 0.8, 0.2)$ を選ぶと、 $\alpha = 0.92$ でタイプ (A) のトポロジカル転移が起こる。そのフェルミ面の変化の様子を図 21 に示す。図 22(a) で示されるようにトポロジカル転移点で規格化されたスピン磁化率 χ_s/χ_n は最大値をとる。2 次元系の場合 (図 17(a)) とは対照的に χ_s/χ_n は連続的に増加する。これは図 22(b) から分かるようにバンドの端 $\varepsilon = \varepsilon_c$ での状態密度が $\rho(\varepsilon) \propto \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c}$ のように連続的に減少するからである。状態密度のこのような振る舞いのため、規格化されたスピン磁化率 χ_s/χ_n のフェルミ面のトポロジカル転移による増強は 2 次元系に比べて変化が小さい。

図 22(a) における χ_s/χ_n の $\chi_s/\chi_n = 2/3$ からの小さな増加では $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ で観測された大きな χ_s/χ_n を説明できない。つまり、大きなスピン磁化率の原因が他にあると考えられる。ここではほぼ $\chi_s/\chi_n \sim 1$ が実現する場合の結果を示す。式 (8) の分散関係のパラメーターとして $(t_1, t_2, t_3, t_4, n) = (-0.8, 0.275, 0.1125, 0.8, 0.9)$ と仮定すると、 ε_- と ε_+ バンドのフェルミ面が $\alpha = 0.82$ と $\alpha = 2.3$ でそれぞれヴァン・ホープ特異点を横切る (タイプ (C))。そして、さらに反対称スピン軌道相互作用を大きくすると ε_+ バンドのフェルミ面が $\alpha = 3.6$ で消失する (タイプ (A))。そのフェルミ面の変化の様子を図 23 に示す。この時、図 24 で示されるように $\alpha > 3.6$ では $\chi_s/\chi_n > 0.9$ となる大きなスピン磁化率が得られる。

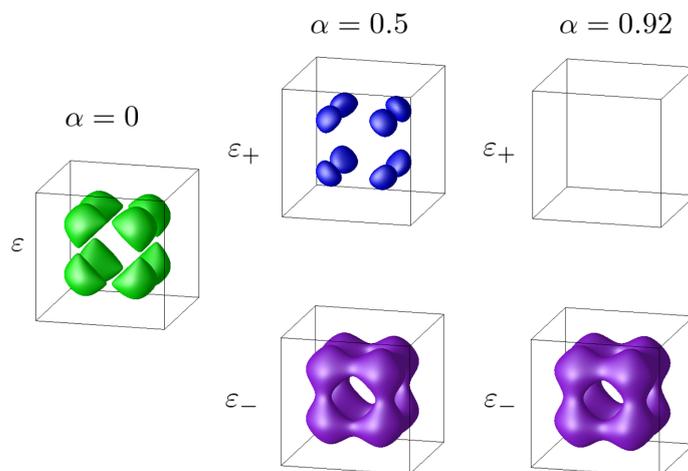


図 21 3次元系におけるタイプ(A)のフェルミ面のトポロジカル転移。 $\alpha = 0$ ではフェルミ面がスピ縮退している。 $\alpha = 0.5$ でのスピ分裂したフェルミ面。青面が ϵ_+ 、紫面が ϵ_- のバンドのフェルミ面を表す。 $\alpha = 0.92$ ではタイプ(A)のトポロジカル転移により ϵ_+ のバンドのフェルミ面が消えている。

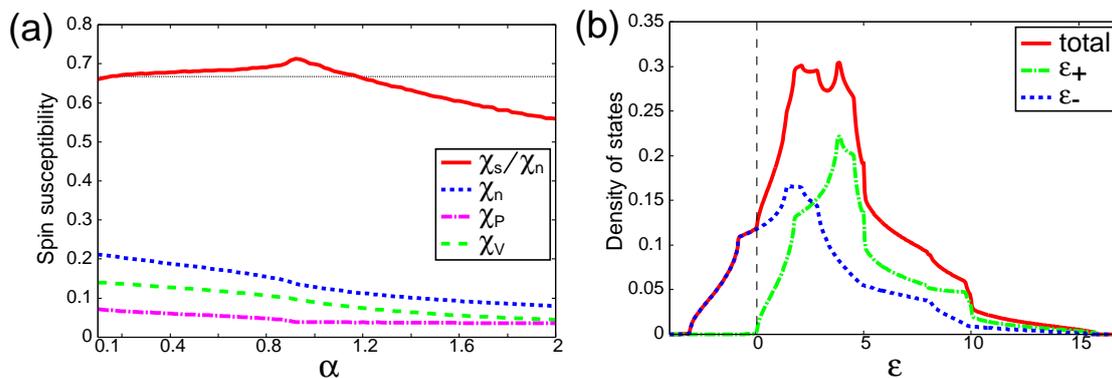


図 22 (a) キュービック型スピ軌道相互作用をもつ3次元系での規格化されたスピ磁化率 χ_s/χ_n (実線)。式(8)の分散関係のパラメーターを $(t_1, t_2, t_3, t_4, n) = (-0.8, 0.275, 0.1125, 0.8, 0.2)$ と仮定する。 $\alpha = 0.92$ でタイプ(A)のフェルミ面のトポロジカル転移が起こる。この図の線は図17(a)と同じ量である。図22(a)と24の水平の細い点線は従来型のキュービック型超伝導体の規格化されたスピ磁化率 $\chi_s/\chi_n = 2/3$ [25, 33]を表す。(b) $\alpha = 0.92$ での常伝導状態の状態密度。この図の線は図17(b)と同じ量である。垂直の破線はフェルミエネルギーを表す。

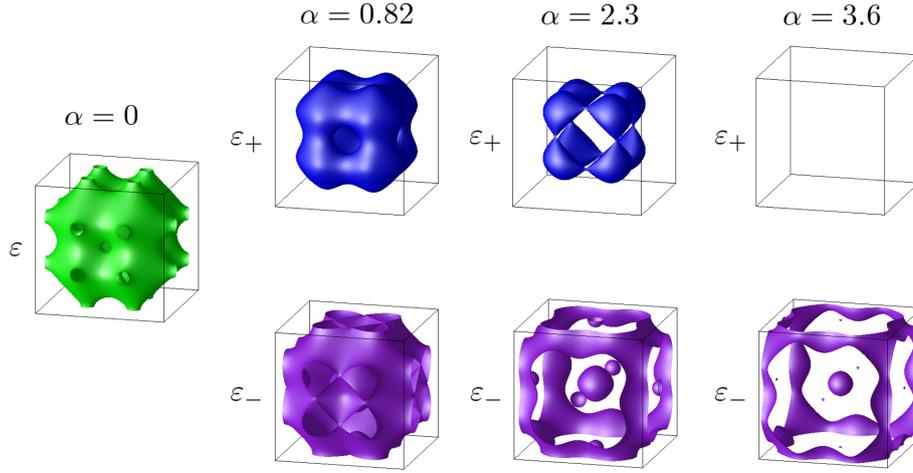


図 23 3次元系におけるタイプ(A)と(C)のフェルミ面のトポロジカル転移。 $\alpha = 0$ ではフェルミ面がスピン縮退している。スピン分裂したフェルミ面はそれぞれ、青面が ϵ_+ 、紫面が ϵ_- のバンドのフェルミ面を表す。 $\alpha = 0.82$ では ϵ_- のバンドのフェルミ面がヴァン・ホープ特異点に掛かる。次に $\alpha = 2.3$ では ϵ_+ のバンドのフェルミ面がヴァン・ホープ特異点に掛かる。そして、 $\alpha = 3.6$ ではタイプ(A)のトポロジカル転移で ϵ_+ のバンドのフェルミ面が消える。

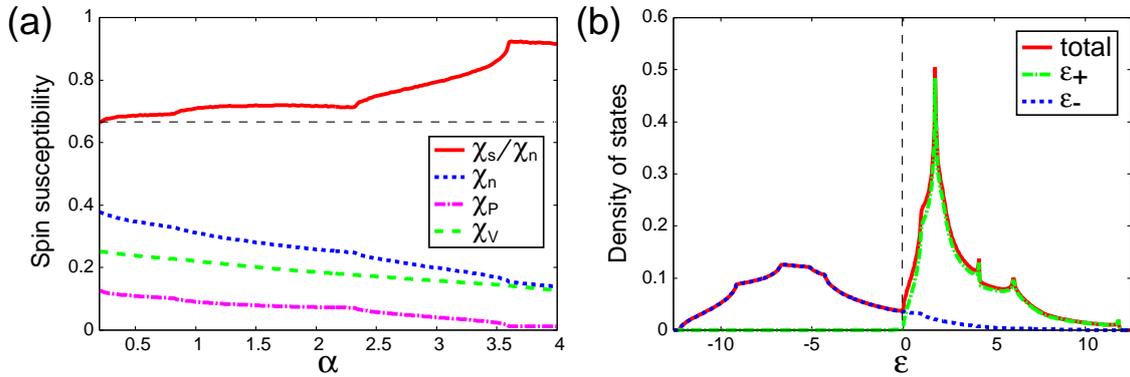


図 24 (a) 式(8)のパラメーターを $(t_1, t_2, t_3, t_4, n) = (-0.8, 0.275, 0.1125, 0.8, 0.9)$ と仮定した際の規格化されたスピン磁化率 χ_s/χ_n 。 $\alpha = 0.82$ と $\alpha = 2.3$ でタイプ(C)、 $\alpha = 3.6$ でタイプ(A)のフェルミ面のトポロジカル転移が起こる。(b) $\alpha = 3.6$ での常伝導状態の状態密度。この図の線は図17(b)と同じ量である。垂直の破線はフェルミエネルギーを表す。

ここでまた、得られた大きなスピン磁化率をパウリ項とヴァンブレック項の観点から説明する。簡単のため、重い ϵ_+ バンドのフェルミ面の小さな電子ポケットと軽い ϵ_- バンドのフェルミ面の小さな正孔ポケットを考える。スピン磁化率のパウリ項は状態密度、

$$\rho(\epsilon_F) = \frac{\sqrt{2m_c^3(\epsilon_F - \epsilon_{c+})}}{4\pi^2} + \frac{\sqrt{2m_h^3(\epsilon_{c-} - \epsilon_F)}}{4\pi^2},$$

に比例する。ここで、この状態密度の第 1 項は重い電子バンド、第 2 項は軽い正孔バンドからの寄与であり、有効質量は $m_e \gg m_h$ であると仮定する。また、 ϵ_{c+} と ϵ_{c-} はそれぞれのバンドの端である。反対称スピン軌道相互作用を大きくしていき、その重い電子ポケットが消えるとき、状態密度は、

$$\rho(\epsilon_F) = \frac{\sqrt{2m_h^3(\epsilon_{c-} - \epsilon_F)}}{4\pi^2},$$

のように大きく減少する。この状態密度の減少はパウリ項の減少につながる。一方で、ヴァンブレル項はほとんど影響を受けない。つまり、図 24(a) のようにスピン分裂したフェルミ面の有効質量が異なり、重いバンドのフェルミ面が消えると、このようにして規格化されたスピン磁化率 $\chi_s/\chi_n = \chi_V/(\chi_P + \chi_V)$ はタイプ (A) のトポロジカル転移点に近づくにつれて十分大きな値をとる。実際に図 24(b) の $\alpha = 3.6$ での状態密度に示されているように、状態密度の大きなバンドがタイプ (A) のトポロジカル転移で消えている。これは $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ の大きなスピン磁化率を再現する可能なメカニズムである。ただし、小さなパウリ項が実現するフェルミ面のトポロジカル転移以外の他の可能性が完全に排除されるわけではない。また、フェルミエネルギーに比べて小さな反対称スピン軌道相互作用によってはこのような小さなパウリ項が実現されないことを強調したい。

第一原理バンド計算によると $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ から $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ へは連続的なフェルミ面のトポロジカル転移が示されている [58, 59]。このように $\text{Li}_2(\text{Pd}_{1-x}\text{Pt}_x)_3\text{B}$ のフェルミ面の興味深いトポロジーが超伝導状態における異常なスピン磁化率の原因になっているのかもしれない。しかし、Pt イオンの増加による状態密度の減少ははっきりとは観測されていない [48]。そのため、我々の提案は実現していないように思われる。しかしながら、実際の $\text{Li}_2(\text{Pd}_{1-x}\text{Pt}_x)_3\text{B}$ は多軌道であるので単純ではない。 $\text{Li}_2(\text{Pd}_{1-x}\text{Pt}_x)_3\text{B}$ のフェルミ面のトポロジカル転移も多軌道のため、部分的に起こっていると考えられる。本研究では 1 軌道模型のため、正確に $\text{Li}_2(\text{Pd}_{1-x}\text{Pt}_x)_3\text{B}$ の電子構造を再現していない。そのため、 $\text{Li}_2(\text{Pd}_{1-x}\text{Pt}_x)_3\text{B}$ の超伝導状態を明かにするために現実的な多軌道模型での解析が要求される。

8 第 II 部のまとめと議論

この第 II 部では反対称スピン軌道相互作用によるフェルミ面のトポロジカル転移がある空間反転対称性が破れた超伝導のスピン磁化率を調べた。タイプ (A) のスピン分裂したフェルミ面の一つが消えるトポロジカル転移では規格化されたスピン磁化率 χ_s/χ_n は増加する。一方で、フェルミ面がディラックポイントを横切るタイプ (B) のトポロジカル転移では χ_s/χ_n は減少する。タイプ (C) のフェルミ面がヴァン・ホープ特異点を横切る場合のトポロジカル転移においても χ_s/χ_n は増加するが、タイプ (A) のトポロジカル転移による増加よりは小さい。スピン磁化率 χ_s/χ_n はタイプ (A) のトポロジカル転移点で最大値をとり、その転移点より大きな反対称スピン軌道相互作用 α においても大きな値をとる。

スピン磁化率のこのような振る舞いは状態密度から理解される。状態密度はバンド構造に依存す

るが、各トポロジカル転移において普遍的な変化を示す。よって、本研究で得られたトポロジカル転移による変化は定性的にはバンド構造に依らない。また、これらの結果は超伝導の対称性にも依らない。

フェルミ面のトポロジカル転移による影響は状態密度のバンドの端の不連続な飛びのため 2 次元系で顕著に現れる。ただし 3 次元系においても、連続的にタイプ (C) と (A) のトポロジカル転移が起こるときに、スピン磁化率は超伝導状態になってもほとんど変化しない結果が得られた。つまり、実験誤差の範囲内ではあるが図 13 と 14 で示されている $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ における NMR のナイトシフトの実験結果 [47, 53] と一致する大きなスピン磁化率 $\chi_s/\chi_n > 0.9$ が得られた。一般的にそのような大きなスピン磁化率は反対称スピン軌道相互作用によって状態密度が十分に減少したときに得られる。本研究ではそのようなバンド構造の一例を示した。今回の 1 軌道モデルでは $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ の多軌道構造は再現できないが、本研究ではフェルミ面のトポロジカル転移が重要な役割を果たすことを示している。実際に第一原理バンド計算 [58, 59] では大きな反対称スピン軌道相互作用による $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ のフェルミ面のトポロジカル転移が示されている。一方で $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ では反対称スピン軌道相互作用が小さいためトポロジカル転移は起こっていない。 $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ の超伝導状態における興味深いフェルミ面のトポロジーの影響を明らかにするためには、 $\text{Li}_2(\text{Pd}_{1-x}\text{Pt}_x)_3\text{B}$ の正確なバンド構造を再現する多軌道モデルでの解析が必要である。

第 III 部

電子相関効果

空間反転対称性が破れた系における電子相関効果が重要であることが実験、理論の両方から分かっている。そこで、この第 III 部では空間反転対称性が破れた系における電子相関効果について議論する。

まず、9 節では空間反転対称性の破れた系において電子相関効果が現れている例をいくつか紹介する。そして、ここでの研究目的を述べる。次に 10 節では解析に用いたラシュバ・ハバードモデルを紹介する。そして、グリーン関数、準粒子の繰り込みについての定式化を行う。2 次摂動での数値計算と解析計算の結果を 11 節で示す。さらにより高次の効果を調べるために 3 次摂動で得られた結果を 12 節で示す。最後の 13 節で第 III 部のまとめと議論を行う。

9 研究背景と研究目的

反対称スピン軌道相互作用が生じる空間反転対称性が破れた系において電子相関効果は重要な役割を果たす。その例として、空間反転対称性が破れている強相関電子系の超伝導体、CeRhSi₃ と CeIrSi₃ における巨大な上部臨界磁場が挙げられる [60, 61]。これらの物質は図 25 と 26 に示されるように正方晶の結晶構造を持ち、*c* 軸方向の空間反転対称性が破れている。常圧では反強磁性を示し、圧力を印加していくと超伝導が現れる。図 27 と 28 にこれらの物質の上部臨界磁場 H_{c2} を示す。図から分かるように、これらの物質では転移温度が数 K のオーダーにもかかわらず、30T に届きそうな巨大な上部臨界磁場が観測されている。このような振る舞いの原因はラシュバ型スピン軌道相互作用と電子相関効果の 2 つの効果があることで説明される。これは多田らによる数値計算によって実験結果を上手く再現していることから分かる [62, 63]。3.5 節で紹介したように異常な常磁性効果により $H \parallel z$ では常磁性対破壊効果がなく、上部臨界磁場は軌道対破壊効果で決まる。この軌道対破壊効果で決まる上部臨界磁場は常磁性対破壊効果で決まるものより大きく強結合効果の影響を受ける。これによって、温度を下げていくとペアリング相互作用は大きくなるのに対し、準粒子のダンピングは小さくなり、大きな上部臨界磁場が得られる。さらにこの効果は量子臨界点に近づくにつれて大きくなることが示されている (図 29)。このように、ラシュバ型スピン軌道相互作用と電子相関効果の 2 つの組み合わせで説明される。

他には理論計算によって 3.1 節の磁気電気効果や 3.2 節の異常ホール効果などの磁気応答が電子相関効果によって現れやすくなることが示されている [25, 26]。ここで、フェルミ液体論に基づいた解析による磁気電気効果係数 Υ_{xy} [26] を紹介する。その式は、

$$\Upsilon_{xy} \sim \frac{\mu_B}{ev_F^* \rho} \cdot \frac{ak_F}{E_F} \propto \frac{\gamma}{\rho}, \quad (9)$$

と表される。ここで、 v_F^* は電子相関効果によって繰り込まれたフェルミ速度、 γ は比熱係数、 ρ は電気抵抗である。重い電子系では一般的に電気抵抗は $\rho \sim \rho_0 + C\gamma^2 T^2$ (ここで ρ_0 は残留抵抗、 C は

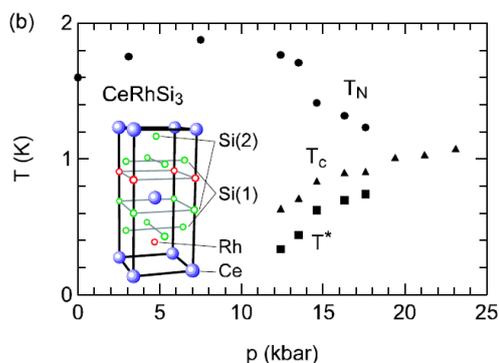


図 25 CeRhSi₃ の結晶構造と温度-圧力相図 [9]。

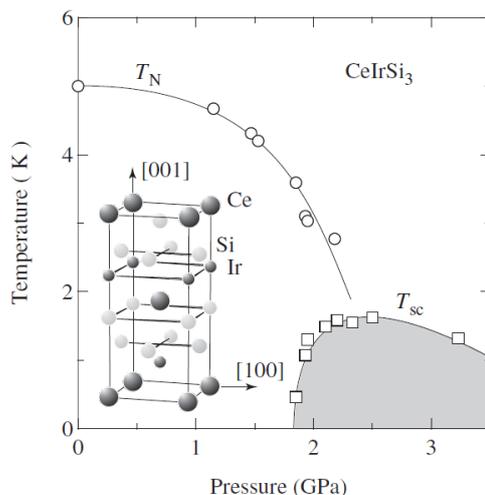


図 26 CeIrSi₃ の結晶構造と温度-圧力相図 [64]。

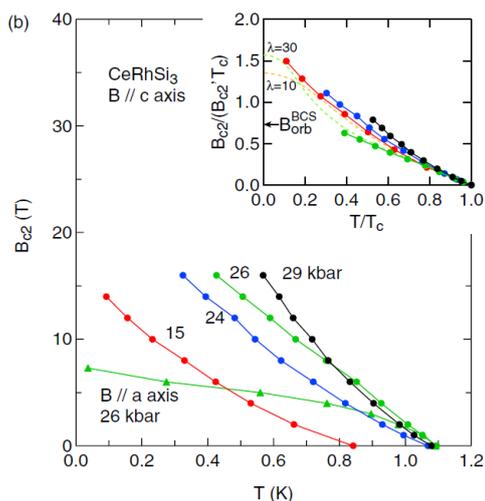


図 27 CeRhSi₃ の上部臨界磁場 [60]。

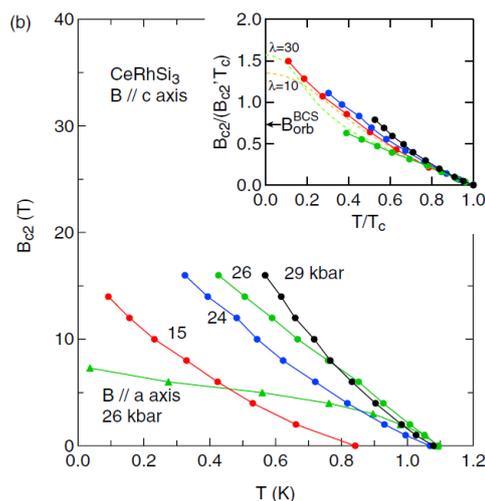


図 28 CeIrSi₃ の上部臨界磁場 [61]。

比例定数) と表されるため、十分低温では γ に比例する形になり Υ_{xy} が増強する。このように電子相関効果によって磁気応答が顕著に現れやすくなるが、全ての応答が増強されるわけではない。例えば、スピンホール電導度は電子相関効果の影響を受けず、バンド構造によって決まる [25]。

また、図 30 に示さるよう電子相関効果によって超伝導状態のスピン磁化率が増強されるという報告もある [25]。

このように反対称スピン軌道相互作用と電子相関効果との間には重要な関係があることが分かる。理論的な観点からは磁性 [65] や超伝導 [22, 57, 62, 63, 66–69] のような長距離秩序については集中的に研究されている。さらには、電子相関効果によって自発的な空間反転対称性が破れと反対称スピン軌道相互作用が生じる場合があり、このようなことについても研究されている [39, 70–72]。しかしながら、フェルミ液体での電子相関効果は少しの研究 [25, 62, 63] を除いて、ほとんど調べ

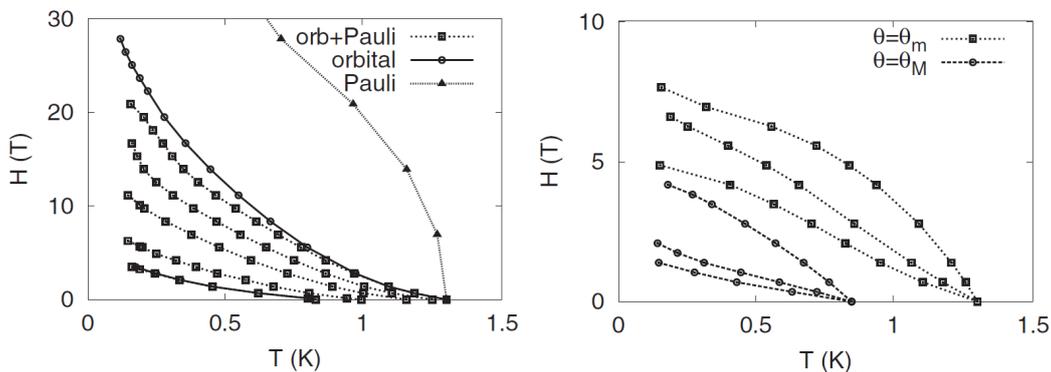


図 29 理論計算による上部臨界磁場の温度依存性 [63]。四角で表されているのが軌道対破壊効果と常磁性対破壊効果の両方を考慮しており、上の線ほど量子臨界点に近い。左： $H \parallel z$ 。右： $H \perp z$ 。

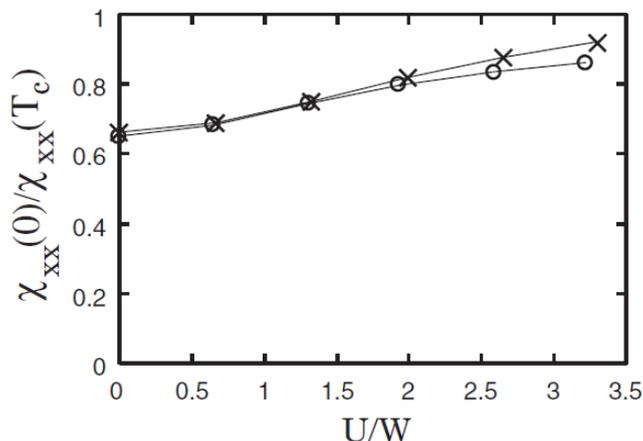


図 30 超伝導磁化率の相互作用依存性 [25]。丸印が $\alpha=0.5$ 、バツ印が $\alpha=1.0$ の結果である。

られていない。

空間反転対称性が破れている金属のフェルミ液体論は藤本によって 2 次元ラシュバ・ハバード模型に基づいて定式化されている [25]。この時、2 次摂動に基づき自己エネルギーの対角成分だけを考慮し数値計算されている。図 30 のスピン磁化率の数値計算がまさにそうである。また、3 次元系での現象論に基づくスピン揺らぎが多田らによって調べられている [62,63]。しかし、ここでも自己エネルギーの非対角成分は無視されている。このように自己エネルギーの非対角成分が考慮されないと、藤本による模型 [25] で示されるように反対称スピン軌道相互作用の繰り込みは無視されてしまう。他にはラシュバ・ハバード模型の 1 次元での解析が Goth と Assaad によって行われている [73]。しかし、これは 1 次元系であるため、ランダウのフェルミ液体論は適用されない。そこで、本研究ではフェルミ液体での電子相関効果を 2 次元ラシュバ・ハバード模型を用いて明らかにする。その際に先行研究で無視されていた自己エネルギーの非対角成分を対角成分と同等に考慮

して計算を行う。電子相関の効果は自己エネルギーに含まれるが、この自己エネルギーを計算するためには何かしらの近似を使う必要がある。ここではクーロン相互作用に対する摂動展開を行う摂動論を用いる。この摂動論は弱結合領域でのみ妥当な近似法ではあるが、その代わりに低次の全ての自己エネルギーのダイアグラムを取り入れることができるというメリットがある。また、電子相関効果を取り入れる方法としては他に動的平均場理論 (DMFT) もある。しかし、この方法では自己エネルギーの波数依存性が考慮されない。この後の計算結果で示すが反対称スピン軌道相互作用がある場合にはこの自己エネルギーの波数依存性が重要な役割を果たすことが分かる。そのため、摂動論を用いた解析を行う。

10 模型と計算手法

この節では初めに第 III 部で用いるモデルハミルトニアンを紹介する。その後に対称スピン軌道相互作用を考慮したグリーン関数、自己エネルギーを説明する。さらに次の節から示していく有効質量、フェルミ面の分裂幅を定義し、その計算方法まで述べる。

10.1 モデルハミルトニアン

空間反転対称性が破れている系における電子相関効果を調べるために、ここでは 2 次元ハバードモデルを用いる。空間反転対称性の破れから生じる反対称スピン軌道相互作用を取り入れた拡張したハバードモデルになっている。モデルハミルトニアンは、 H_0 を無摂動項、 H_{int} を摂動項として次のように表される。

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (10)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, s} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} + \alpha \sum_{\mathbf{k}, s, s'} \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s'}, \quad (11)$$

$$H_{\text{int}} = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (12)$$

ここで、 $c_{\mathbf{k}s} (c_{\mathbf{k}s}^\dagger)$ は運動量 \mathbf{k} 、スピン $s = \uparrow, \downarrow$ の電子の消滅 (生成) 演算子である。 $\boldsymbol{\sigma}$ はベクトル表示のパウリ行列である。 n_{is} はスピン s のサイト i における電子の数演算子である。ここから、各項を説明していく。

H_0 の第 1 項目は分散関係である。ここではシンプルに 2 次元正方格子を考え、第 2 次近接項まで考慮したタイトバインディング近似を用いて、

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t_1(\cos k_x + \cos k_y) + 4t_2 \cos k_x \cos k_y - \mu, \quad (13)$$

と表される。ここで μ は化学ポテンシャルである。 H_0 の第 2 項目は空間反転対称性の破れから生じる反対称スピン軌道相互作用である。 α は結合定数を表している。よく使われる表記 [5] の g ベクトル $\mathbf{g}(\mathbf{k})$ によって反対称スピン軌道相互作用は特徴づけられる。特に本研究では固体物理の多くの分野で研究されているラシュバ型スピン軌道相互作用に注目する。この g ベクトルの運動量依存性は正確にはマルチバンドモデルから微視的に導出される [22–24]。しかし、本論文では簡単のためにシンプルな形のラシュバ型スピン軌道相互作用を採用する。それは、

$$\mathbf{g}(\mathbf{k}) = 2t_1(-\sin k_y, \sin k_x, 0), \quad (14)$$

と表され、この形はブリルアンゾーンの周期性を満足している。微視的な導出からは電子構造において軌道縮退がない場合にこの形になることが分かっている [23, 24, 74, 75]。反対称スピン軌道相互作用の他の種類については 13 節で議論する。最後の H_{int} が相互作用を表す項になっており、オンサイトのクーロン相互作用を表している。このクーロン相互作用 U に関する摂動展開を行い、弱結合領域での電子相関効果を調べる。

10.2 グリーン関数

電子相関効果を調べるためにグリーン関数に基づいた解析を行う。そこで反対称スピン軌道相互作用を考慮したグリーン関数をここでは紹介する。反対称スピン軌道相互作用があるため、スピンの自由度がありグリーン関数は 2×2 の行列で表される。通常の空間反転対称性がある場合にはこのグリーン関数の非対角成分は出てこない(オンサイトのクーロン相互作用の場合)。まず、相互作用がない場合 ($U = 0$) のグリーン関数 $\hat{G}^{(0)}(\mathbf{k})$ から見ていく。それは次のように表され、

$$\begin{aligned}\hat{G}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= (i\omega_n \hat{I} - \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{I} - \alpha \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma})^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} i\omega_n - \varepsilon - \alpha g_z & -\alpha(g_x - ig_y) \\ -\alpha(g_x + ig_y) & i\omega_n - \varepsilon + \alpha g_z \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \sum_{\lambda=\pm} \left(\frac{\hat{I} + \lambda \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2} \right) G_{\lambda}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n),\end{aligned}\quad (15)$$

となる。ここで \hat{I} は単位行列、 $\omega_n = (2n - 1)\pi T$ はフェルミオンの松原振動数である。最後の式にある $G_{\lambda}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ はバンド表示のグリーン関数で、

$$G_{\lambda}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon(\mathbf{k}) - \lambda \alpha |\mathbf{g}(\mathbf{k})|}, \quad (16)$$

と表される。ここで $\lambda = \pm$ は反対称スピン軌道相互作用によってスピン分裂したバンドのインデックスである。この詳しい導出は付録 B.1 に記述する。ここで、各成分を具体的に書き表すと、

$$G_{\uparrow\uparrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{2} (G_{+}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) + G_{-}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)) + \frac{g_z(\mathbf{k})}{2|\mathbf{g}(\mathbf{k})|} (G_{+}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) - G_{-}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)), \quad (17)$$

$$G_{\uparrow\downarrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{g_x(\mathbf{k}) - ig_y(\mathbf{k})}{2|\mathbf{g}(\mathbf{k})|} (G_{+}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) - G_{-}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)), \quad (18)$$

$$G_{\downarrow\uparrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{g_x(\mathbf{k}) + ig_y(\mathbf{k})}{2|\mathbf{g}(\mathbf{k})|} (G_{+}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) - G_{-}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)), \quad (19)$$

$$G_{\downarrow\downarrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{2} (G_{+}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) + G_{-}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)) - \frac{g_z(\mathbf{k})}{2|\mathbf{g}(\mathbf{k})|} (G_{+}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) - G_{-}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)), \quad (20)$$

となる。次にここで採用している \mathbf{g} ベクトルがラシュバ型 ($\mathbf{g}(\mathbf{k}) = (-\sin k_y, \sin k_x, 0)$) の場合の各成分を書き表すと、

$$G_{\uparrow\uparrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{2} (G_{+}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) + G_{-}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)), \quad (21)$$

$$G_{\uparrow\downarrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{-\sin k_y - i \sin k_x}{2\sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}} (G_{+}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) - G_{-}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)), \quad (22)$$

$$G_{\downarrow\uparrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{-\sin k_y + i \sin k_x}{2\sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}} (G_{+}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) - G_{-}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)), \quad (23)$$

$$G_{\downarrow\downarrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{2} (G_{+}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) + G_{-}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)), \quad (24)$$

となる。これらから、 $G_{\uparrow\uparrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = G_{\downarrow\downarrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ であることがすぐに分かる。また、 $g(\mathbf{k}) = 0$ の時は、 $G_{\uparrow\downarrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = G_{\downarrow\uparrow}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = 0$ である。

次に相互作用がある場合 ($U \neq 0$) のグリーン関数を考える。先ほどの裸のグリーン関数に自己エネルギー $\hat{\Sigma}^R(k)$ を考慮することで得られる。この自己エネルギーもグリーン関数と同様に反対称スピン軌道相互作用によって4成分あり行列で表される。これまでの研究 [25, 62, 63] ではこの自己エネルギーの非対角成分は無視されているが、自己エネルギーの対角成分 $\Sigma_{\uparrow\uparrow}^R(k)$ 、 $\Sigma_{\downarrow\downarrow}^R(k)$ だけでなく、非対角成分 $\Sigma_{\uparrow\downarrow}^R(k)$ 、 $\Sigma_{\downarrow\uparrow}^R(k)$ も重要な役割を果たすことが後ほど分かる。ここからは実際に物理量を計算するために解析接続 ($i\omega_n \rightarrow \omega$) した遅延グリーン関数 $\hat{G}^R(k)$ を考えていく。同様に自己エネルギーも解析接続したものを用いる。その遅延グリーン関数は、

$$\begin{aligned} \hat{G}^R(k) &= (\omega \hat{I} - \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{I} - \alpha \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} - \hat{\Sigma}^R(k))^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} \omega - \varepsilon - \alpha g_z - \Sigma_{\uparrow\uparrow}^R(k) & -\alpha(g_x - ig_y) - \Sigma_{\uparrow\downarrow}^R(k) \\ -\alpha(g_x + ig_y) - \Sigma_{\downarrow\uparrow}^R(k) & \omega - \varepsilon + \alpha g_z - \Sigma_{\downarrow\downarrow}^R(k) \end{pmatrix}^{-1}, \end{aligned} \quad (25)$$

と表される。ここでは波数と振動数を合わせて $k = (\mathbf{k}, \omega)$ と簡略した。次にスピン表示で表されている自己エネルギーをベクトル表示 $\hat{\Sigma}^R(k) = \Sigma_0^R(k) \hat{I} + \boldsymbol{\Sigma}^R(k) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ に書き換える。ここで $\boldsymbol{\Sigma}^R(k) = (\Sigma_x^R(k), \Sigma_y^R(k), \Sigma_z^R(k))$ であり、具体的に書くと

$$\hat{\Sigma}^R(k) = \begin{pmatrix} \Sigma_{\uparrow\uparrow}^R(k) & \Sigma_{\uparrow\downarrow}^R(k) \\ \Sigma_{\downarrow\uparrow}^R(k) & \Sigma_{\downarrow\downarrow}^R(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma_0^R(k) + \Sigma_z^R(k) & \Sigma_x^R(k) - i\Sigma_y^R(k) \\ \Sigma_x^R(k) + i\Sigma_y^R(k) & \Sigma_0^R(k) - \Sigma_z^R(k) \end{pmatrix}, \quad (26)$$

である。それぞれを逆に解くと $\Sigma_0^R(k) = (\Sigma_{\uparrow\uparrow}^R(k) + \Sigma_{\downarrow\downarrow}^R(k))/2$ 、 $\Sigma_x^R(k) = (\Sigma_{\downarrow\uparrow}^R(k) + \Sigma_{\uparrow\downarrow}^R(k))/2$ 、 $\Sigma_y^R(k) = (\Sigma_{\downarrow\uparrow}^R(k) - \Sigma_{\uparrow\downarrow}^R(k))/2i$ 、 $\Sigma_z^R(k) = (\Sigma_{\uparrow\uparrow}^R(k) - \Sigma_{\downarrow\downarrow}^R(k))/2$ である。ラシュバ型の場合では $\Sigma_z^R(k) = 0$ である。自己エネルギーをベクトル表示に変換すると式 (25) は、

$$\begin{aligned} \hat{G}^R(k) &= \begin{pmatrix} \omega - (\varepsilon + \Sigma_0^R) - \alpha \left(g_z + \frac{\Sigma_z^R}{\alpha} \right) & -\alpha \left[\left(g_x + \frac{\Sigma_x^R}{\alpha} \right) - i \left(g_y + \frac{\Sigma_y^R}{\alpha} \right) \right] \\ -\alpha \left[\left(g_x + \frac{\Sigma_x^R}{\alpha} \right) + i \left(g_y + \frac{\Sigma_y^R}{\alpha} \right) \right] & \omega - (\varepsilon + \Sigma_0^R) + \alpha \left(g_z + \frac{\Sigma_z^R}{\alpha} \right) \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} \omega - \varepsilon' - \alpha g'_z & -\alpha(g'_x - ig'_y) \\ -\alpha(g'_x + ig'_y) & \omega - \varepsilon' + \alpha g'_z \end{pmatrix}^{-1}, \end{aligned} \quad (27)$$

となる。ここで、 $\varepsilon'(k) \equiv \varepsilon(\mathbf{k}) + \Sigma_0^R(k)$ 、 $g'(k) \equiv g(\mathbf{k}) + \text{Re} \boldsymbol{\Sigma}^R(k)/\alpha$ であり、それぞれ相互作用によって繰り込まれた形になっている。このように反対称スピン軌道相互作用の繰り込みは g ベクトルへの自己エネルギー補正によって定義される。式 (27) は ε' と g' を用いると式 (15) と同じ形で書けるが次のような、

$$\hat{G}^R(k) = \sum_{\lambda=\pm} \left(\frac{\hat{I} + \lambda \frac{g'}{|g'|} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2} \right) G_{\lambda}^R(k), \quad (28)$$

の形に変換するには注意が必要である。それは $\hat{\Sigma}^R(k)$ のエルミート性が常に保証されていないからである。そのために、単純にバンド表示 (対角化) にはできない。しかし、ここで自己エネルギーの非対角成分に対応する $\boldsymbol{\Sigma}^R(k)$ の虚部を無視する。なぜなら、フェルミ液体の低温では $\boldsymbol{\Sigma}^R(k) \propto T^2$

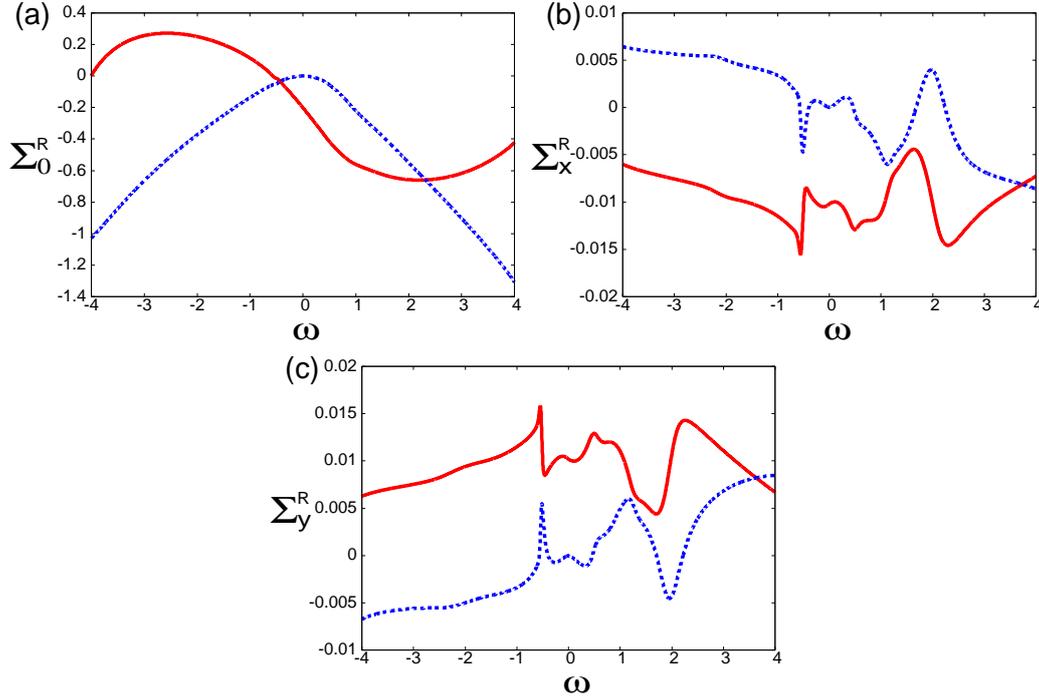


図 31 [110] 方向の $k = k_{F+}$ での 2 次摂動で計算された自己エネルギーの振動数依存性。ここでのパラメータは、 $t_1 = 1$ 、 $t_2 = 0$ 、 $\alpha = 0.1$ 、 $U = 4$ 、 $T = 0.01$ 、 $n = 0.8$ である。それぞれ (a) Σ_0^R 、(b) Σ_x^R 、(c) Σ_y^R であり実線が実部、破線が虚部である。ここではパデ近似を用いて計算した。

であり虚部は十分小さいからである。実際に図 31 で示されているように 2 次摂動で計算された自己エネルギーの虚部は $\omega \sim 0$ では無視できる。このように近似的に対角化することができ式 (28) が得られる。このことは 3 次摂動でも同様に成り立つ。そのため、 g' の定義でも自己エネルギーの実部だけを考慮している。対角化して得られた式 (28) の $G_\lambda^R(k)$ はバンド表示のグリーン関数で、

$$G_\lambda^R(k) = \frac{1}{\omega - \varepsilon'(k) - \lambda\alpha|g'(k)|} \quad (29)$$

である。

グリーン関数を用いて解析していくが、特に興味があるのはフェルミ面上での物理である。そのためにグリーン関数を $\omega \sim 0$ 近傍で展開する。そのために自己エネルギーが関係する $\Sigma_0^R(k) + \lambda\alpha|g'(k)|$ の部分を $\omega \sim 0$ 近傍で展開すると、

$$\begin{aligned} \Sigma_0^R(k) + \lambda\alpha|g'(k)| &\simeq \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0) + \left. \frac{\partial \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \omega + i\text{Im}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0) + i \left. \frac{\partial \text{Im}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \omega \\ &\quad + \lambda\alpha|g'(\mathbf{k}, 0)| + \lambda\alpha \left. \frac{\partial |g'(\mathbf{k}, \omega)|}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \omega, \end{aligned} \quad (30)$$

となる。フェルミ液体の自己エネルギーは $\omega \sim 0$ では $\Sigma(\omega) = -A\omega - iB\omega^2$ (A と B は実数) となるので自己エネルギーの虚部は ω^2 に比例する。ここでの Σ_0^R も図 31(a) から分かるように $\omega \sim 0$ で

は虚部が ω^2 に比例しているため 4 項目はゼロになる。ここからはこの項は無視する。式 (30) を式 (29) に代入すると $\omega \sim 0$ 近傍でのグリーン関数は、

$$D \equiv \left(1 - \frac{\partial \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} - \lambda\alpha \frac{\partial |g'(\mathbf{k}, \omega)|}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} \right) \omega - \left(\varepsilon(\mathbf{k}) + \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0) + \lambda\alpha |g'(\mathbf{k}, 0)| \right) - i\text{Im}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0), \quad (31)$$

とおくと、

$$G_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{1}{D} = \frac{z_\lambda(\mathbf{k})}{\omega - \varepsilon_\lambda^*(\mathbf{k}) + i\gamma_\lambda^*(\mathbf{k})}, \quad (32)$$

となる。ここで、

$$z_\lambda(\mathbf{k}) = \left(1 - \frac{\partial \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} - \lambda\alpha \frac{\partial |g'(\mathbf{k}, \omega)|}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} \right)^{-1}, \quad (33)$$

$$\varepsilon_\lambda^*(\mathbf{k}) = z_\lambda(\mathbf{k}) \left(\varepsilon(\mathbf{k}) + \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0) + \lambda\alpha |g'(\mathbf{k}, 0)| \right), \quad (34)$$

$$\gamma_\lambda^*(\mathbf{k}) = -z_\lambda(\mathbf{k}) \text{Im}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0), \quad (35)$$

であり、それぞれ $z_\lambda(\mathbf{k})$ は繰り込み因子、 $\varepsilon_\lambda^*(\mathbf{k})$ は準粒子のエネルギー、 $\gamma_\lambda^*(\mathbf{k})$ は準粒子のダンピングである。

10.3 有効質量

次にスピン分裂している λ バンドのフェルミ面上における準粒子の有効質量の説明に入る。その有効質量 m_λ^* は次の式から求まる。

$$\frac{m_\lambda^*}{m_\lambda} = \frac{\left(\frac{\partial \varepsilon_\lambda}{\partial k} \right)}{\left(\frac{\partial \varepsilon_\lambda^*}{\partial k} \right)}. \quad (36)$$

ここで m_λ は相互作用がないときの裸の質量である。そして準粒子のエネルギーの波数微分は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon_\lambda^*(\mathbf{k})}{\partial k} &= \frac{\partial z_\lambda(\mathbf{k})}{\partial k} \left(\varepsilon(\mathbf{k}) + \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0) + \lambda\alpha |g'(\mathbf{k}, 0)| \right) \\ &\quad + z_\lambda(\mathbf{k}) \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k} + \frac{\partial \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0)}{\partial k} + \lambda\alpha \frac{\partial |g'(\mathbf{k}, 0)|}{\partial k} \right). \end{aligned} \quad (37)$$

である。フェルミ面上を考えているので $k \rightarrow k_{F\lambda}$ とすると、 $\varepsilon(k_{F\lambda}) + \text{Re}\Sigma_0^R(k_{F\lambda}, 0) + \lambda\alpha |g'(k_{F\lambda}, 0)| = 0$ より、

$$\frac{\partial \varepsilon_\lambda^*(\mathbf{k})}{\partial k} \Big|_{k=k_{F\lambda}} = \left\{ z_\lambda(\mathbf{k}) \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k} + \frac{\partial \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0)}{\partial k} + \lambda\alpha \frac{\partial |g'(\mathbf{k}, 0)|}{\partial k} \right) \right\} \Big|_{k=k_{F\lambda}}, \quad (38)$$

となる。これを式 (36) に代入することにより、

$$\frac{m_\lambda^*}{m_\lambda} = \left[z_\lambda(\mathbf{k})^{-1} \left\{ \frac{\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \lambda \alpha \frac{\partial |g(\mathbf{k})|}{\partial \mathbf{k}}}{\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial \text{Re} \Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0)}{\partial \mathbf{k}} + \lambda \alpha \frac{\partial |g'(\mathbf{k}, 0)|}{\partial \mathbf{k}}} \right\} \right] \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_{F\lambda}}, \quad (39)$$

と得られる。このように準粒子の有効質量 m_λ^* は自己エネルギーの振動数微分と波数微分の部分からなることが分かる。自己エネルギーの振動数微分によって与えられる部分が ω -mass、 m_λ^ω であり、波数微分によって与えられる部分が k -mass、 m_λ^k である。それぞれを式で表すと、

$$\frac{m_\lambda^*}{m_\lambda} = \frac{m_\lambda^\omega}{m_\lambda} \times \frac{m_\lambda^k}{m_\lambda}, \quad (40)$$

$$\frac{m_\lambda^\omega}{m_\lambda} = z_\lambda(\mathbf{k}_{F\lambda})^{-1} = 1 - \frac{\partial \text{Re} \Sigma_0^R(\mathbf{k}_{F\lambda}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} - \lambda \alpha \frac{\partial |g'(\mathbf{k}_{F\lambda}, \omega)|}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0}, \quad (41)$$

$$\frac{m_\lambda^k}{m_\lambda} = \frac{\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \lambda \alpha \frac{\partial |g(\mathbf{k})|}{\partial \mathbf{k}}}{\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial \text{Re} \Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0)}{\partial \mathbf{k}} + \lambda \alpha \frac{\partial |g'(\mathbf{k}, 0)|}{\partial \mathbf{k}}} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_{F\lambda}}, \quad (42)$$

である。強相関電子系におけるフェルミ液体論では k -mass による繰り込みは無視されることが多い。それは、 k -mass による繰り込みは ω -mass による繰り込みに比べてとても小さく、準粒子の繰り込みはほとんど ω -mass によって決まるからである。このように k -mass はあまり考慮されないことが多いが、本研究のように空間反転対称性が破れている系ではこの k -mass による繰り込みが重要な役割を果たす。

次に本研究で用いた ω -mass と k -mass を求める際に出てくる自己エネルギーの振動数微分等の計算方法について説明する。繰り込まれた g ベクトルの振動数微分は具体的には次のように、

$$\frac{\partial |g'(\mathbf{k}, \omega)|}{\partial \omega} = \frac{1}{\alpha |g'(\mathbf{k}, \omega)|} g'(\mathbf{k}, \omega) \cdot \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega}, \quad (43)$$

と表され、ここでも自己エネルギーの振動数微分が現れる。興味があるのはフェルミ面上 $\omega = 0$ の値なので以下の近似方法を用いて求めた。 $\omega = 0$ での自己エネルギーは、

$$\Sigma_\alpha^R(\mathbf{k}, \omega = 0) \simeq \frac{\Sigma_\alpha(\mathbf{k}, \omega_n = \pi T) + \Sigma_\alpha(\mathbf{k}, \omega_n = -\pi T)}{2}, \quad (44)$$

のように松原表示の自己エネルギーの差分を取ることで得られる。次に自己エネルギーの振動数微分の計算方法について示す。クラマース・クローニツヒの関係式を用いて、その後に差分を取ることで次のようにして得られる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \text{Re} \Sigma_\alpha^R(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} &= \frac{\partial \text{Im} \Sigma_\alpha(\mathbf{k}, \omega_n)}{\partial \omega_n} \Big|_{\omega_n=0} \\ &\simeq \frac{\text{Im} \Sigma_\alpha(\mathbf{k}, \omega_n = \pi T) - \text{Im} \Sigma_\alpha(\mathbf{k}, \omega_n = -\pi T)}{2\pi T}. \end{aligned} \quad (45)$$

次節以降の数値計算結果はこの方法で計算したものである。最後にこの近似の妥当性について述べる。自己エネルギーを解析接続 ($i\omega_n \rightarrow \omega$) する方法としてはパデ近似がある。そのパデ近似を

用いて解析接続した場合との比較を行ったところほぼ同じ結果が得られることを確認している (図 31 の結果はパデ近似を用いている)。そのため、この近似方法は妥当であるといえる。

粒子数一定の計算のもとでは自己エネルギーによって化学ポテンシャルのシフトが起こる。本研究で行った自己エネルギーを計算する際の化学ポテンシャルの取り扱いについて述べる。ここでは、まず相互作用がない $U = 0$ の時の化学ポテンシャル μ_0 を求める。そして、この μ_0 を用いて自己エネルギーを計算する。最後に衣を着たグリーン関数を用いて化学ポテンシャルを決め直す。サイト当たりの粒子数密度 n は、

$$n = \sum_k (G_+(k) + G_-(k)) + 1, \quad (46)$$

から求まる。この式の導出は付録 A.2 に記述してある

10.4 フェルミ面の分裂幅

空間反転対称性が破れた系では反対称スピン軌道相互作用によってフェルミ面がスピン分裂する。ここでは、そのフェルミ面のスピン分裂幅についての説明をする。2 つに分裂したフェルミ面のそれぞれのフェルミ波数 $k_{F\lambda}$ はバンド表示のグリーン関数 (式 (29)) の特異点から決定される。つまり、次の式を満たす波数が λ バンドのフェルミ波数 $k_{F\lambda}$ である。

$$\varepsilon'(k_{F\lambda}, 0) + \lambda\alpha|g'(k_{F\lambda}, 0)| = 0. \quad (47)$$

この式から得られたフェルミ波数よりフェルミ面の分裂幅 Δk_F は

$$\Delta k_F = |k_{F+} - k_{F-}|, \quad (48)$$

と定義される。本論文では [110] 方向と [010] 方向での計算結果を示していくが、この意味を説明する。[110] 方向の場合に意味するのは原点 $(k_x, k_y) = (0, 0)$ から (π, π) の線上にあるフェルミ面のフェルミ波数 k_{F+} と k_{F-} の差を取ったものが [110] 方向のフェルミ面の分裂幅 Δk_F になる。同様に [010] 方向の場合は原点 $(k_x, k_y) = (0, 0)$ から $(0, \pi)$ の線上のフェルミ面を考えている。

次節以降で示す結果は式 (48) から数値計算によって求めたものであるが、解析計算によっても求めることができる。その解析式は、

$$\Delta k_F \simeq \frac{2\alpha|g'(k_F, 0)|}{|v^k(k_F, 0)|}, \quad (49)$$

である。ここで k_F は $\alpha = 0$ でのフェルミ波数である。また、 $v^k(k_F, \omega) = \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k} + \frac{\partial \text{Re}\Sigma_0^R(k, \omega)}{\partial k} \Big|_{k=k_F}$ であり、これは k -mass によって繰り込まれたフェルミ速度である。この解析式の詳しい導出は付録 B.2 に記述してある。この表式を用いた考察は 11.2 節の解析計算で行う。

11 2次摂動

この節では2次元ラシュバ・ハバード模型における2次摂動での計算結果を示す。まずは、この2次摂動の範囲で取り扱う自己エネルギーを紹介する。1次の自己エネルギーは定数であり、化学ポテンシャルに取り込まれるのでここでは無視する。よって、2次の自己エネルギーが弱結合領域で正当化される最低次の項になっている。その2次の自己エネルギー $\Sigma^{(2)}(k)$ のスケルトンダイアグラムは図32に示されている。これらのダイアグラムによる自己エネルギーを式で表すとそれぞれ、

$$\Sigma_{ss'}^{(2A)}(k) = U^2 \sum_q \chi_{s\bar{s}s'\bar{s}'}^{(0)}(q) G_{\bar{s}\bar{s}'}^{(0)}(k-q), \quad (50)$$

$$\Sigma_{ss'}^{(2B)}(k) = -U^2 \sum_q \chi_{s\bar{s}s'\bar{s}'}^{(0)}(q) G_{\bar{s}\bar{s}'}^{(0)}(k-q), \quad (51)$$

と書き表される。ここで

$$\chi_{s_1s_2s_3s_4}^{(0)}(q) = - \sum_k G_{s_1s_3}^{(0)}(k+q) G_{s_4s_2}^{(0)}(k), \quad (52)$$

である。ここでの k と q は $k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_n)$ 、 $q \equiv (\mathbf{q}, i\Omega_n)$ であり、それぞれフェルミオンの松原振動数 $\omega_n = (2n-1)\pi T$ とボソンの松原振動数 $\Omega_n = 2n\pi T$ である ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$)。また和の記号 \sum_k も省略形であり、省略しないで書くと $\sum_k = (T/N) \sum_{\mathbf{k}} \sum_n$ である。図32(2B)のダイアグラムは反対称スピン軌道相互作用がない場合 ($\alpha = 0$) には現れない。逆に言えば、図32(2B)のダイアグラムは反対称スピン軌道相互作用によって生じるもので、これが反対称スピン軌道相互作用の繰り込みに効いてくる。これまで行われてきた研究ではこの項を無視しているものもある [25] が本研究ではそれらを取り入れた解析を行う。

11.1 数値計算の結果

まずは、有効質量、反対称スピン軌道相互作用の繰り込み、スピン分裂したフェルミ面の分裂幅の数値計算の結果を示す。ここでの計算に用いたパラメーターを紹介する。反対称スピン軌道相互作用の大きさは $\alpha = 0.1$ とし温度が $T = 0.01$ での計算結果を示す。分散関係は簡単のために最近接項だけを取り入れる。つまり $(t_1, t_2) = (1, 0)$ である。この分散関係の場合にはラシュバ型の g ベクトルは $g(\mathbf{k}) = 2t_1(-\sin k_y, \sin k_x, 0) = (-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ のように速度で表される。この反対称スピン軌道相互作用と分散関係の関係がこの後示す結果において本質的な役割を果たす。

初めに ω -mass の計算結果を示す。図33にそのフィリング依存性の結果を示す。フェルミ液体論でよく知られているように有効質量は ω -mass を通して電子相関効果によって増強される。ハーフフィリング ($n = 1$) 近傍で特に増強されているのが分かる。これは $k = (\pi, 0)$ と $(0, \pi)$ のヴァン・ホープ特異点近傍であるため、状態密度が大きくなっているからである。また、ここではフェルミ

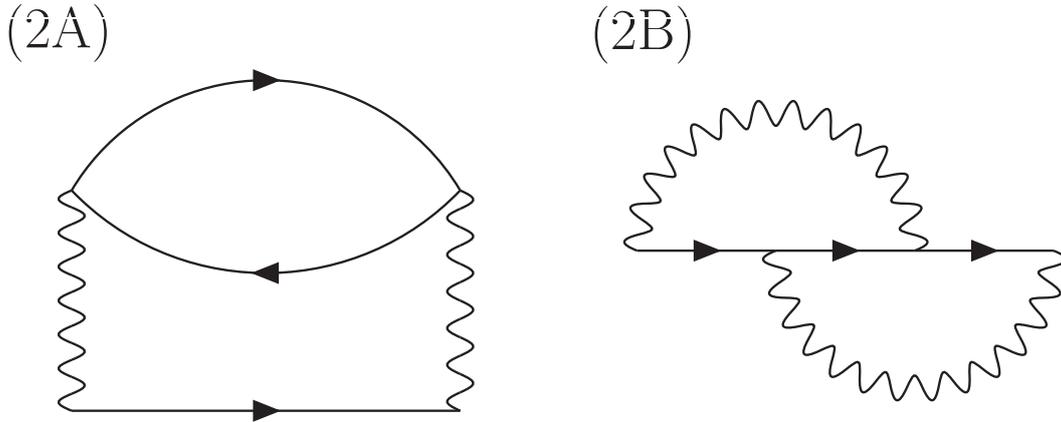


図 32 空間反転対称性が破れている系の自己エネルギーの2次のスケルトンダイアグラム。実線が裸のグリーン関数 $G_{ss'}^{(0)}(k)$ 、波線がクーロン相互作用 U をそれぞれ表している。

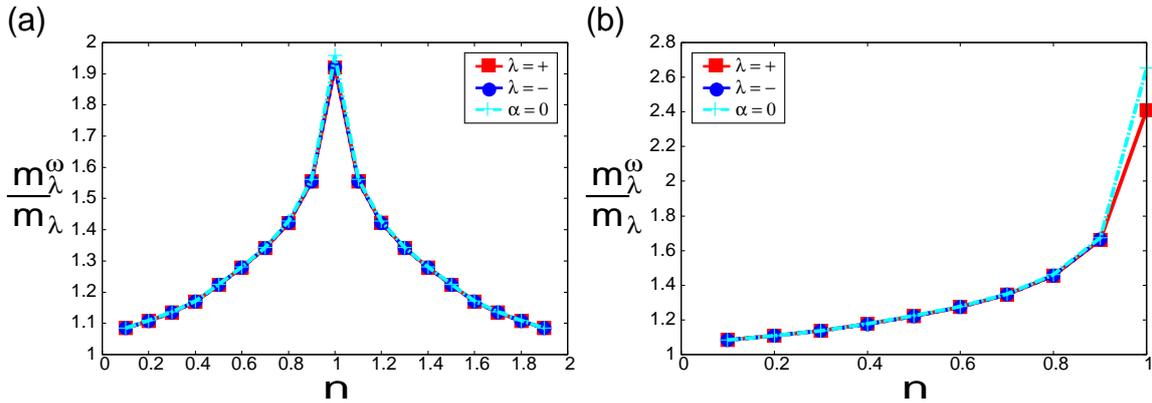


図 33 (a) [110]、(b) [010] 方向のフェルミ面上での ω -mass のフィリング依存性。相互作用の大きさは $U = 4$ である。ここではスピン分裂した2つの $\lambda = \pm$ バンドと反対称スピン軌道相互作用がない場合 ($\alpha = 0$) のフェルミ上での結果である。

エネルギーに比べて小さな反対称スピン軌道相互作用を仮定しているため、反対称スピン軌道相互作用は ω -mass に対してあまり影響を与えていない。図 33 の計算結果を見てもほとんど影響がないことが確認できる。このように小さな反対称スピン軌道相互作用では ω -mass のバンド依存性も小さい。

次に k -mass の計算結果を示す。そのフィリング依存性は図 34 に示されている。 k -mass は ω -mass とは対照的に電子相関効果によって抑制される。このように k -mass と ω -mass は有効質量に対して互いに逆の影響を与えるがトータルでの有効質量 (式 (40)) は電子相関効果によって重くなる。これは k -mass による繰り込みに比べて ω -mass による繰り込みの方が大きいからである。このような結果は一般的なフェルミ液体論での結果と変わらないが、ここではこの k -mass を無視しないことが重要である。 k -mass は ω -mass とは逆の振り舞いをするが同じように状態密度に大き

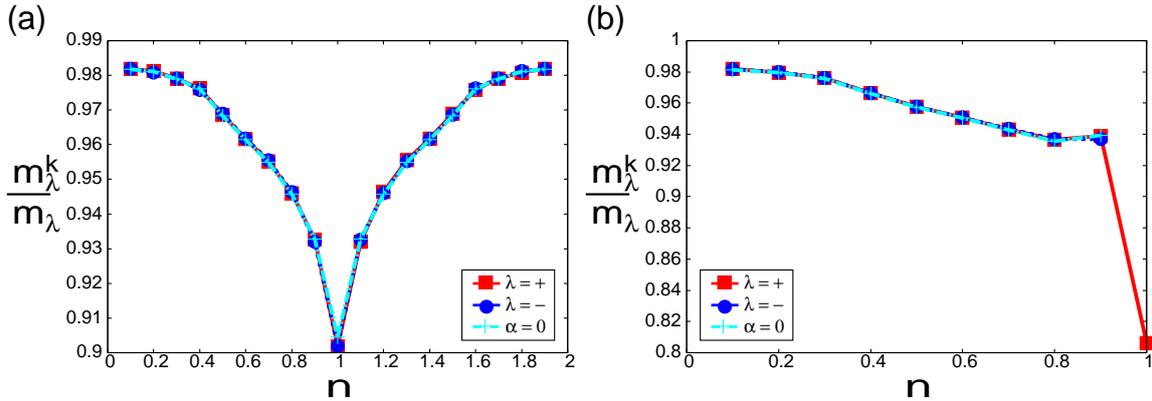


図 34 (a) [110]、(b) [010] 方向のフェルミ面上での k -mass のフィリング依存性。相互作用の大きさは $U = 4$ である。ここではスピンスplitした 2 つの $\lambda = \pm$ バンドと反対称スピ軌道相互作用がない場合 ($\alpha = 0$) のフェルミ上での結果である。

く依存しているのが分かる。また、バンド依存性もほとんどないことが分かる。 $|\alpha| \ll 1$ において、この ω -mass と k -mass の主な起源は図 32(2A) で表されている $\hat{\Sigma}^{(2A)}(k)$ の対角成分である。

次に電子相関効果による反対称スピ軌道相互作用の繰り込みを見ていく。そのために裸の g ベクトルで規格化された $|g'(k, \omega = 0)|/|g(k)|$ を図 35 に示す。電子相関効果によって反対称スピ軌道相互作用が増強されているのが分かる。これは定義からも分かるように自己エネルギーの非対角成分である $\Sigma(k)$ によって増強されている (図 41(c) から分かる)。このように空間反転対称性が破れている強相関電子系を研究するにあたって、自己エネルギーの非対角成分 $\Sigma(k)$ を考慮することが本質的であることが分かる。図 36 に示されているようにこの反対称スピ軌道相互作用の繰り込みは異方的である。一般的に大きな繰り込みはフェルミ面近傍で起こっている。また、 g ベクトルの向きも電子相関効果によって変化する。しかしながら、弱結合領域に基づく摂動論であるため、ここではその変化はとても小さい。そのため、強結合領域ではスピ構造が電子相関効果によって大きく変化するかもしれない。このことから、反対称スピ軌道相互作用によって起こる現象を取り扱う理論では電子相関効果は考慮されるべきである。

次に反対称スピ軌道相互作用によってスピンスplitしたフェルミ面の分裂幅 Δk_F を見ていく。単純に考えれば、電子相関効果によって反対称スピ軌道相互作用が繰り込まれて大きくなっているため、それに比例してスピンスplitしたフェルミ面の分裂幅も大きくなるはずである。しかしながら、図 37 で示されるようにフェルミ面の分裂幅は電子相関効果によってほとんど変化していない。ここで図 37 の縦軸は反対称スピ軌道相互作用の繰り込みのスケール、具体的には図 35 の縦軸と同じスケールに合わせている。このようにこのスケールでは、フェルミ面の分裂幅における電子相関の影響は見えない。つまり、反対称スピ軌道相互作用の繰り込みはフェルミ面の分裂幅を小さくする何らかの影響によって打ち消されていると考えられる。その何らかの影響というのが k -mass による繰り込みである。次の節ではこのことについて解析的に示していく。

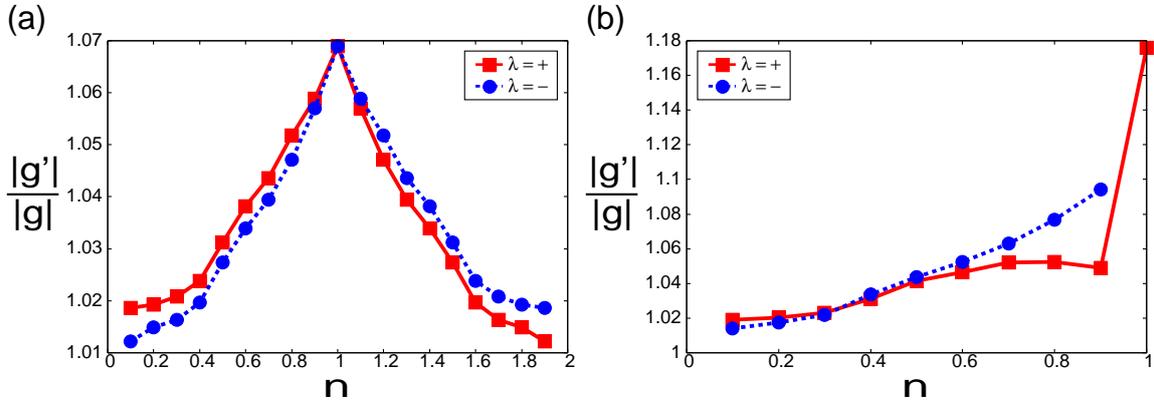


図 35 (a) [110]、(b) [010] 方向のフェルミ面上での反対称スピン軌道相互作用の繰り込み $|g'(k, \omega=0)|/|g(k)|$ のフィリング依存性。相互作用の大きさは $U = 4$ である。ここではスピン分裂した 2 つの $\lambda = \pm$ バンドのフェルミ上での結果である。

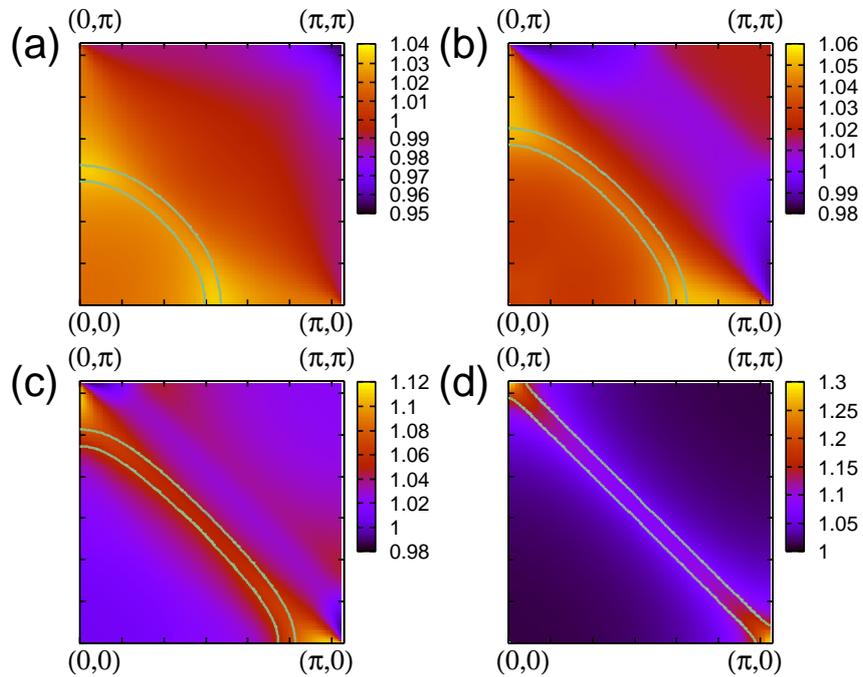


図 36 反対称スピン軌道相互作用の繰り込み $|g'(k, \omega=0)|/|g(k)|$ の波数依存性。相互作用の大きさは $U = 4$ である。ここではフィリングが (a) $n = 0.4$ 、(b) 0.6 、(c) 0.8 、(d) 1.0 の結果を示している。実線はスピン分裂しているフェルミ面である。

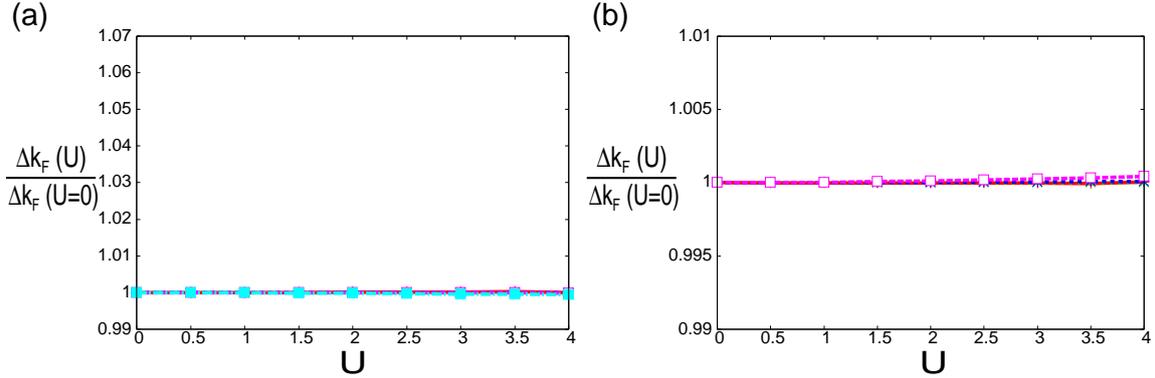


図 37 (a) [110]、(b) [010] 方向のスピンスplitしたフェルミ面の分裂幅 Δk_F の相互作用依存性。ここではフィリングが $n=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ の結果 (b) は $n=0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ を示しているが、電子相関効果の影響が見られない。縦軸は反対称スピ軌道相互作用の繰り込みのスケールであり、図 35 の縦軸と同じスケールに合わせた。

11.2 解析計算の結果

前の節の数値計算で得られたスピンスplitしたフェルミ面の分裂幅が電子相関効果の影響を受けないことについて、ここでは解析計算を行い議論する。この節では反対称スピ軌道相互作用に関する最低次の項を見ていく。これは反対称スピ軌道相互作用が小さな領域で正当化されるが、実際の多くの空間反転対称性が破れた金属では $\alpha|g(k)| \ll \varepsilon_F$ が実現している。スピンスplitしたフェルミ面の分裂幅の解析式は式 (49) でも紹介したように、

$$\Delta k_F \simeq \frac{2\alpha|g'(\mathbf{k}_F, 0)|}{|v^k(\mathbf{k}_F, 0)|}, \quad (53)$$

で表される (この式は反対称スピ軌道相互作用がフェルミエネルギーより十分小さい $\alpha \ll \varepsilon_F$ の条件のもとで導出される)。 $v^k(\mathbf{k}_F, \omega)$ は k -mass によって繰り込まれたフェルミ速度である。このようにフェルミ面の分裂幅 Δk_F は k -mass と反対称スピ軌道相互作用の繰り込みの影響を受ける。ここでは k -mass の繰り込みと反対称スピ軌道相互作用の繰り込みが図 37 のように互いに打ち消しあうことを明らかにする。そのために反対称スピ軌道相互作用 α に関して最低次だけを考慮する α についての摂動展開を行う。最終的には $\alpha \rightarrow 0$ の極限での Δk_F を求める。

まずは、 $\alpha \rightarrow 0$ の極限での裸のグリーン関数を求める。相互作用のないバンド表示でのグリーン関数は、

$$G_\lambda^{(0)}(k) = \frac{1}{\omega - \varepsilon(k) - \lambda\alpha|g(k)|}, \quad (54)$$

である。この節では遅延グリーン関数を意味する R の記号を省略する。これを $\alpha \sim 0$ で展開す

ると、

$$\frac{\partial G_\lambda^{(0)}}{\partial \alpha} = \lambda G_\lambda^{(0)} |g| G_\lambda^{(0)}, \quad (55)$$

$$\frac{\partial^2 G_\lambda^{(0)}}{\partial \alpha^2} = 2G_\lambda^{(0)} |g| G_\lambda^{(0)} |g| G_\lambda^{(0)}, \quad (56)$$

より、

$$G_\lambda^{(0)} \simeq G^{(0)} + \lambda G^{(0)} |g| G^{(0)} \alpha + G^{(0)} |g| G^{(0)} |g| G^{(0)} \alpha^2 + \dots, \quad (57)$$

となる。ここで、 $G^{(0)}$ は $\alpha = 0$ のグリーン関数、

$$G^{(0)}(k) = \frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{k})}, \quad (58)$$

である。よって、 α の2次以上を無視すると、

$$G_+^{(0)} + G_-^{(0)} = 2G^{(0)}, \quad (59)$$

$$G_+^{(0)} - G_-^{(0)} = 2G^{(0)} |g| G^{(0)} \alpha. \quad (60)$$

となる。これを用いるとスピン表示の裸のグリーン関数は、

$$G_{\uparrow\uparrow}^{(0)}(k) = G^{(0)}(k), \quad (61)$$

$$G_{\uparrow\downarrow}^{(0)}(k) = G^{(0)}(k) \alpha (g_x(\mathbf{k}) - i g_y(\mathbf{k})) G^{(0)}(k), \quad (62)$$

$$G_{\downarrow\uparrow}^{(0)}(k) = G^{(0)}(k) \alpha (g_x(\mathbf{k}) + i g_y(\mathbf{k})) G^{(0)}(k), \quad (63)$$

$$G_{\downarrow\downarrow}^{(0)}(k) = G^{(0)}(k), \quad (64)$$

と表される。ここではラシュバ型を考えているので $g_z = 0$ とした。このように α の1次までを考慮すると、 α に依存するのは $G_{\uparrow\downarrow}^{(0)}$ と $G_{\downarrow\uparrow}^{(0)}$ の非対角成分だけである。自己エネルギーについてもこのグリーン関数を用いて同様に α の1次まで考慮する。そのとき、図32のダイアグラムは $\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{(2A)}(k)$ と $\Sigma_{\downarrow\downarrow}^{(2A)}(k)$ (図38)、つまり $\Sigma_0^{(2A)}(k)$ が α の0次となる。 α の1次としては $\Sigma_{\uparrow\downarrow}^{(2B)}(k)$ と $\Sigma_{\downarrow\uparrow}^{(2B)}(k)$ (図39)、つまり $\Sigma_x^{(2B)}(k)$ と $\Sigma_y^{(2B)}(k)$ を考えれば良い。ここで図38と図39では、これから示す解析式での Δk_F が相互作用に対して一定になることを導出するため変数を式(50)、(51)から変更している。ちなみに、図32の残りのダイアグラムは $\Sigma_{\uparrow\downarrow}^{(2A)}(k)$ と $\Sigma_{\downarrow\uparrow}^{(2A)}(k)$ が α の3次であり、 $\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{(2B)}(k)$ と $\Sigma_{\downarrow\downarrow}^{(2B)}(k)$ は α の2次になるので、これらは無視する。

この α の1次までのグリーン関数と自己エネルギーを用いて $v^k(k)$ と $g'(k)$ を具体的に計算していく。初めに k -mass により繰り込まれた速度 v^k から求めていく。定義より、 $\alpha \rightarrow 0$ の極限を取ると、

$$\begin{aligned} v^k(k) &= \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial \text{Re} \Sigma_0^R(k)}{\partial \mathbf{k}} + \lambda \alpha \frac{\partial |g'(k)|}{\partial \mathbf{k}} \\ &\rightarrow \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial \text{Re} \Sigma_0^R(k)}{\partial \mathbf{k}} \quad (\alpha \rightarrow 0), \end{aligned} \quad (65)$$

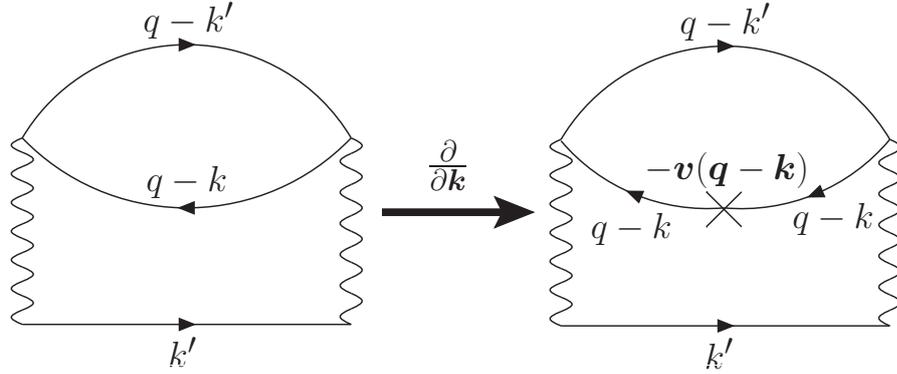


図 38 図 32(2A) の α の 0 次のダイアグラム ($\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{(2A)}(k)$ と $\Sigma_{\downarrow\downarrow}^{(2A)}(k)$) とそれを k 微分したダイアグラム。ここでの実線は $G^{(0)}(k)$ を表す。

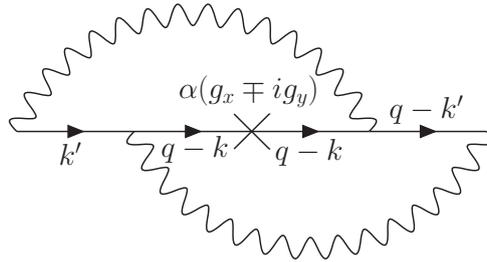


図 39 図 32(2B) の α の 1 次のダイアグラム。ここでの実線は $G^{(0)}(k)$ を表す。符号は - が $\Sigma_{\downarrow\downarrow}^{(2B)}(k)$ 、+ が $\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{(2B)}(k)$ である。

となる。また、 α の 1 次までを考慮すると自己エネルギーは、

$$\Sigma_0(k) = \frac{\Sigma_{\uparrow\uparrow}(k) + \Sigma_{\downarrow\downarrow}(k)}{2} \rightarrow \frac{\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{(2A)}(k) + \Sigma_{\downarrow\downarrow}^{(2A)}(k)}{2} = \Sigma_{\uparrow\uparrow}^{(2A)}(k) \quad (\alpha \rightarrow 0), \quad (66)$$

であるから、

$$\begin{aligned} v^k(k) &\simeq \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k} + \frac{\partial \text{Re} \Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{R}(2A)}(k)}{\partial k} \\ &= \left(v_x(k) + \frac{\partial \text{Re} \Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{R}(2A)}(k)}{\partial k_x}, v_y(k) + \frac{\partial \text{Re} \Sigma_{\uparrow\uparrow}^{\text{R}(2A)}(k)}{\partial k_y} \right), \end{aligned} \quad (67)$$

となる。 $\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{(2A)}(k)$ の k 微分は図 38 より、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Sigma_{\uparrow\uparrow}^{(2A)}(k)}{\partial \mathbf{k}} &= U^2 \sum_q \left\{ - \sum_{k'} G_{\downarrow\downarrow}^{(0)}(q-k') \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} G_{\downarrow\downarrow}^{(0)}(q-k) \right\} G_{\uparrow\uparrow}^{(0)}(k') \\
&\rightarrow U^2 \sum_q \left\{ - \sum_{k'} G^{(0)}(q-k') \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} G^{(0)}(q-k) \right\} G^{(0)}(k') \quad (\alpha \rightarrow 0) \\
&= U^2 \sum_q \left\{ \sum_{k'} G^{(0)}(k') G^{(0)}(q-k') \right\} G^{(0)}(q-k)^2 \mathbf{v}(q-k) \\
&= U^2 \sum_q \phi(q) G^{(0)}(q-k)^2 \mathbf{v}(q-k), \tag{68}
\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\phi(q) \equiv \sum_{k'} G^{(0)}(k') G^{(0)}(q-k'), \tag{69}$$

であり、 $v_i(\mathbf{k}) = \partial \varepsilon(\mathbf{k}) / \partial k_i$ である。よって、 k -mass により繰り込まれた速度は、

$$v_x^k(\mathbf{k}) = v_x(\mathbf{k}) + U^2 \text{Re} \sum_q \phi(q) G^{(0)}(q-k)^2 v_x(q-k), \tag{70}$$

$$v_y^k(\mathbf{k}) = v_y(\mathbf{k}) + U^2 \text{Re} \sum_q \phi(q) G^{(0)}(q-k)^2 v_y(q-k), \tag{71}$$

となる。

次に繰り込まれた反対称スピン軌道相互作用 g' を求める。定義より、 $\alpha \rightarrow 0$ の極限を考えると

$$g'(k) = g(\mathbf{k}) + \frac{\text{Re} \Sigma^R(k)}{\alpha} \rightarrow g(\mathbf{k}) + \frac{\partial \text{Re} \Sigma^R(k)}{\partial \alpha} \quad (\alpha \rightarrow 0). \tag{72}$$

となる。 α の 1 次まで考慮すると自己エネルギー Σ^R は、

$$\begin{aligned}
\Sigma(k) = (\Sigma_x(k), \Sigma_y(k)) &= \left(\frac{\Sigma_{\downarrow\uparrow}(k) + \Sigma_{\uparrow\downarrow}(k)}{2}, \frac{\Sigma_{\downarrow\uparrow}(k) - \Sigma_{\uparrow\downarrow}(k)}{2i} \right) \\
&\rightarrow \left(\frac{\Sigma_{\downarrow\uparrow}^{(2B)}(k) + \Sigma_{\uparrow\downarrow}^{(2B)}(k)}{2}, \frac{\Sigma_{\downarrow\uparrow}^{(2B)}(k) - \Sigma_{\uparrow\downarrow}^{(2B)}(k)}{2i} \right) \quad (\alpha \rightarrow 0), \tag{73}
\end{aligned}$$

である。よって、

$$\begin{aligned}
g'(k) &\simeq g(\mathbf{k}) + \frac{\partial \text{Re} \Sigma^{R(2B)}(k)}{\partial \alpha} \\
&= \left(g_x(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \alpha} (\text{Re} \Sigma_{\downarrow\uparrow}^{R(2B)}(k) + \text{Re} \Sigma_{\uparrow\downarrow}^{R(2B)}(k)), g_y(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \alpha} (\text{Im} \Sigma_{\downarrow\uparrow}^{R(2B)}(k) - \text{Im} \Sigma_{\uparrow\downarrow}^{R(2B)}(k)), 0 \right), \tag{74}
\end{aligned}$$

となる。 $\Sigma_{\uparrow\downarrow}^{(2B)}(k)$ 、 $\Sigma_{\downarrow\uparrow}^{(2B)}(k)$ の α 微分を計算すると図 39 より、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Sigma_{\uparrow\downarrow}^{(2B)}(k)}{\partial \alpha} &= U^2 \frac{\partial}{\partial \alpha} \sum_q \sum_{k'} G_{\downarrow\downarrow}^{(0)}(q-k') G_{\uparrow\downarrow}^{(0)}(q-k) G_{\uparrow\uparrow}^{(0)}(k') \\ &\rightarrow U^2 \frac{\partial}{\partial \alpha} \sum_q \left\{ \sum_{k'} G^{(0)}(k') G^{(0)}(q-k') \right\} G^{(0)}(q-k) \alpha (g_x(\mathbf{q}-\mathbf{k}) - i g_y(\mathbf{q}-\mathbf{k})) G^{(0)}(q-k) \\ & \hspace{20em} (\alpha \rightarrow 0) \\ &= U^2 \sum_q \phi(q) G^{(0)}(q-k)^2 (g_x(\mathbf{q}-\mathbf{k}) - i g_y(\mathbf{q}-\mathbf{k})), \end{aligned} \quad (75)$$

$$\frac{\partial \Sigma_{\downarrow\uparrow}^{(2B)}(k)}{\partial \alpha} \rightarrow U^2 \sum_q \phi(q) G^{(0)}(q-k)^2 (g_x(\mathbf{q}-\mathbf{k}) + i g_y(\mathbf{q}-\mathbf{k})) \quad (\alpha \rightarrow 0), \quad (76)$$

となる。よって、反対称スピン軌道相互作用の繰り込みは、

$$g'_x(k) = g_x(\mathbf{k}) + U^2 \text{Re} \sum_q \phi(q) G^{(0)}(q-k)^2 g_x(\mathbf{q}-\mathbf{k}), \quad (77)$$

$$g'_y(k) = g_y(\mathbf{k}) + U^2 \text{Re} \sum_q \phi(q) G^{(0)}(q-k)^2 g_y(\mathbf{q}-\mathbf{k}), \quad (78)$$

となる。このように式 (70)、(71) と式 (77)、(78) を見比べるとフェルミ速度と反対称スピン軌道相互作用は共にとてもよく似た形で繰り込まれることが分かる。

ここで g ベクトルが $g(\mathbf{k}) = C(-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ のラシュバ型の場合を考える (C は定数)。このとき、フェルミ速度と反対称スピン軌道相互作用の繰り込みは同じ形なる。この場合での式 (77) と (78) は、

$$g'_x(k) = -C v_y^k(k), \quad (79)$$

$$g'_y(k) = C v_x^k(k), \quad (80)$$

となる。つまり、 $|g'(k)| = C |v^k(k)|$ が成り立ち、式 (49) のフェルミ面の分裂幅 Δk_F は、

$$\Delta k_F \simeq \frac{2\alpha |g'(\mathbf{k}_F, 0)|}{|v^k(\mathbf{k}_F, 0)|} = 2C\alpha, \quad (81)$$

となる。このように、

$$\Delta k_F \simeq \frac{2\alpha |g'(\mathbf{k}_F, 0)|}{|v^k(\mathbf{k}_F, 0)|} = \frac{2\alpha |g(\mathbf{k}_F, 0)|}{|v(\mathbf{k}_F)|}, \quad (82)$$

となるのでスピン分裂したフェルミ面の分裂幅は電子相関効果の影響を受けない。このような結果になるのは、 g ベクトルが繰り込まれた分だけ、 k -mass が軽くなり有効速度が大きくなっているからである。その両方の寄与が等しくなり、フェルミ面の分裂幅が相互作用に依らなくなる。ここで重要なことは g ベクトルがフェルミ速度で表されていることである。まさに、11.1 節のラシュバ・ハバード模型を用いた数値計算では g ベクトルがフェルミ速度で表されている。また、ここでの解析計算は $\alpha \rightarrow 0$ の極限を仮定して行い、有限の α では完全な打ち消しにはならない。しかしなが

ら、11.1節で示した $\alpha = 0.1$ でのフェルミ面の分裂幅の数値計算の結果 (図 37) を見ると、ほぼ完全に相互作用の影響を打ち消しているのが分かる。

g ベクトルがフェルミ速度で表される場合にフェルミ面の分裂幅が相互作用に依らないと述べたが、逆に言い換えれば g ベクトルがフェルミ速度で表されない場合には電子相関効果の影響を受けるということである。そこで数値計算によってそれを確かめる。このような条件を満たすためにラシュバ型の g ベクトル $g(\mathbf{k}) = 2t_1(-\sin k_y, \sin k_x, 0)$ に対して、分散関係のパラメーターを $(t_1, t_2) = (1, 0.3)$ とする。次近接項 t_2 により $g(\mathbf{k}) \not\propto (-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ となり、 g ベクトルはフェルミ速度で表されない。この場合のフェルミ面の分裂幅の計算結果を図 40 に示す。予想されるようにフェルミ面の分裂幅は相互作用の影響を受ける。この電子相関効果による影響の受け方はバンド構造に依存する。次近接項 t_2 により粒子・正孔対称性が破れるため、フェルミ面の分裂幅の繰り込みも粒子・正孔対称性が破れた振る舞いをする。ここでの図 40 では電子的フェルミ面の時はフェルミ面の分裂幅は電子相関効果によって大きくなり、正孔的フェルミ面の時は小さくなる。実際に解析式を見ると反対称スピン軌道相互作用の繰り込みの式 (77) と (78) は、

$$g'_x(k) = -\sin k_y - U^2 \text{Re} \sum_q \phi(q) G^{(0)}(q-k)^2 \sin(q_y - k_y), \quad (83)$$

$$g'_y(k) = \sin k_x + U^2 \text{Re} \sum_q \phi(q) G^{(0)}(q-k)^2 \sin(q_x - k_x), \quad (84)$$

となる。一方でフェルミ速度の式 (70) と (71) は、

$$\begin{aligned} v_x^k(k) &= 2t_1 \left(\sin k_x + U^2 \text{Re} \sum_q \phi(q) G^{(0)}(q-k)^2 \sin(q_x - k_x) \right) + (t_2 \text{の項}) \\ &= 2t_1 g'_y(k) + (t_2 \text{の項}), \end{aligned} \quad (85)$$

$$\begin{aligned} v_y^k(k) &= 2t_1 \left(\sin k_y + U^2 \text{Re} \sum_q \phi(q) G^{(0)}(q-k)^2 \sin(q_y - k_y) \right) + (t_2 \text{の項}) \\ &= -2t_1 g'_x(k) + (t_2 \text{の項}), \end{aligned} \quad (86)$$

となる。このように t_2 の項により、反対称スピン軌道相互作用とフェルミ速度の繰り込みが一致しなくなり、フェルミ面の分裂幅が相互作用の影響を受けるようになる。

最後に有効質量、反対称スピン軌道相互作用の繰り込み、スピン分裂したフェルミ面の分裂幅に対する図 32 の各ダイアグラムからの寄与を見ていく。図 41(a)、(b) から分かるように、 ω -mass と k -mass は $\Sigma_0^{(2A)}(k)$ のダイアグラムから主に決まる。一方で反対称スピン軌道相互作用の繰り込みは図 41(c) に示されるように $\Sigma^{(2B)}(k)$ のダイアグラムから決まる。 $\alpha = 0$ のときにも存在する $\Sigma_0^{(2A)}(k)$ が有効質量を決め、反対称スピン軌道相互作用によって生じる $\Sigma^{(2B)}(k)$ が反対称スピン軌道相互作用に影響を与えるという妥当な結果である。反対称スピン軌道相互作用 α の二次以上を無視した解析計算の結果とも一致する。また、図 41(d) のフェルミ面の分裂幅を見ると、 g ベクトルがフェルミ速度で表される時には、反対称スピン軌道相互作用と k -mass による繰り込みがほぼ一致し、互いに電子相関の影響を打ち消し合う。逆に g ベクトルがフェルミ速度で表されない場合には反対称スピン軌道相互作用と k -mass による繰り込みは一致していない。

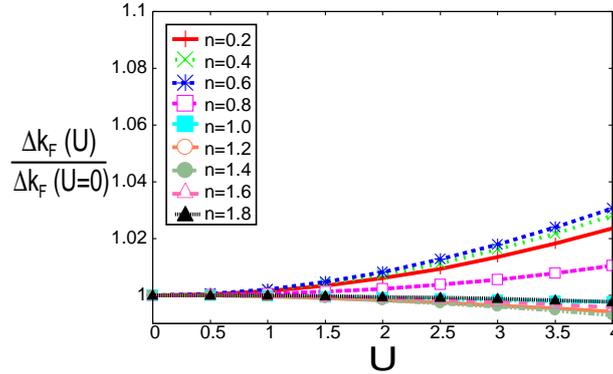


図 40 [110] 方向のスピンスplitしたフェルミ面の分裂幅 Δk_F の相互作用依存性。ここでのフィリングは上から $n = 0.6, 0.4, 0.2, 0.8, 1.0, 1.8, 1.6, 1.2, 1.4$ の結果を示している。分散関係のパラメータは $(t_1, t_2) = (1, 0.3)$ であり、 g ベクトルがフェルミ速度で表されない場合である。

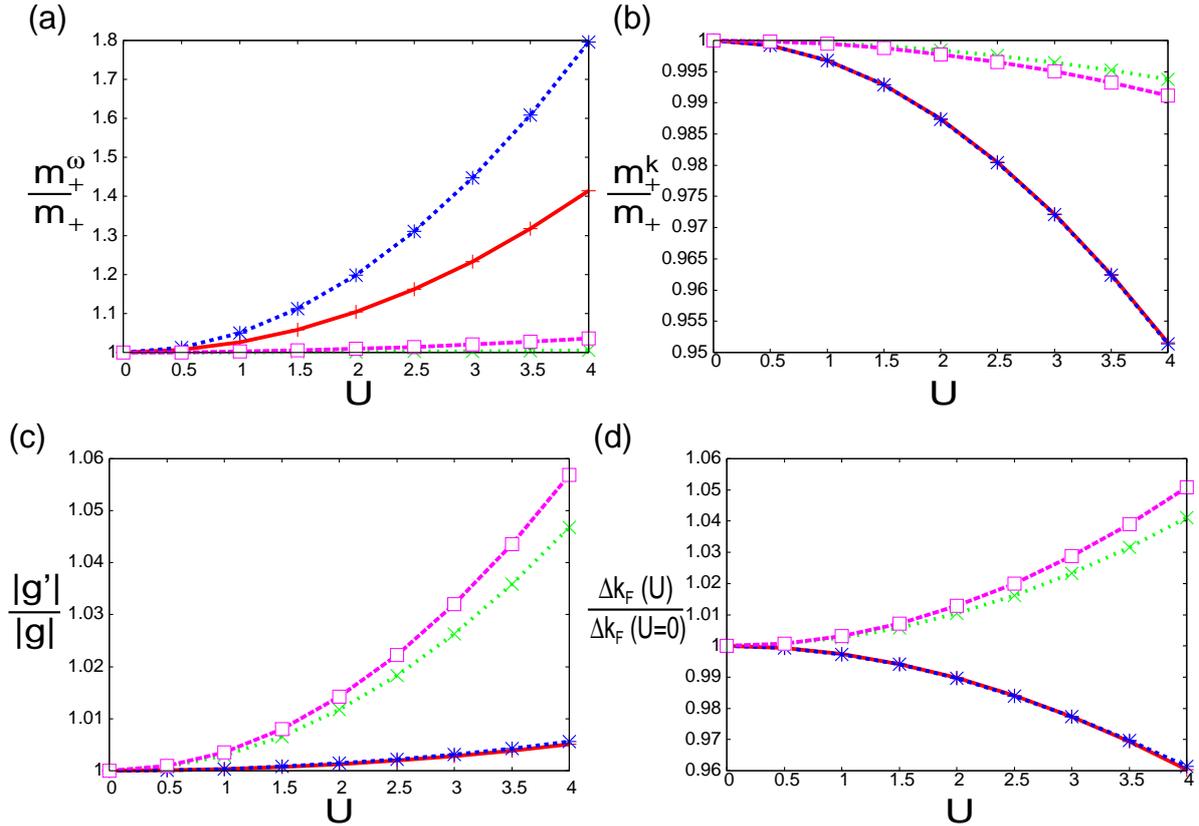


図 41 (a) ω -mass, (b) k -mass, (c) 反対称スピノ軌道相互作用の繰り込み g' , (d) スピンスplitしたフェルミ面の分裂幅 Δk_F の $\Sigma^{(2A)}$ と $\Sigma^{(2B)}$ それぞれのダイアグラムからの寄与。フィリングは全て $n = 0.8$ であり (a)~(c) は $\lambda = +$ バンドのフェルミ面での結果である。ここで、 $\Sigma^{(2A)}$ からと $\Sigma^{(2B)}$ からの寄与を表す赤線と緑線では 11.1 節と同じパラメータを用い、 $g(\mathbf{k}) \propto (-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ を満足する。一方、 $\Sigma^{(2A)}$ からと $\Sigma^{(2B)}$ からの寄与を表す青線と紫線は図 40 と同じパラメータを用い、 $g(\mathbf{k}) \propto (-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ である。

12 3 次摂動

前の節では 2 次摂動での計算結果を示した。この節では電子相関効果の繰り込みがより高次の摂動ではどうなるかを調べる。そこで高次の摂動として 3 次摂動での計算を行う。2 次摂動の場合と同様にして、有効質量、反対称スピン軌道相互作用の繰り込み、スピン分裂したフェルミ面の分裂幅を求め、2 次摂動と 3 次摂動の計算結果を比較し議論する。

まず初めに 3 次摂動で新たに出てくる自己エネルギーの 3 次の項を紹介する。空間反転対称性が破れている系における自己エネルギーの 3 次のスケルトンダイアグラムを図 42 に表す。これらのダイアグラムは 2 次摂動の時と同様に $\alpha \rightarrow 0$ の極限を考えると α の次数に関して分類される。3 次のダイアグラム $\Sigma_{\sigma\sigma'}^{(3X)}$ は内部にスピンの自由度を持つが、ここで考えるのは $\Sigma_{\sigma\sigma'}^{(3X)}$ に含まれる α の最低次の項のことである。例えば、 $\Sigma_{\sigma\sigma'}^{(3A)}$ であれば、 $\Sigma_{\uparrow\uparrow}^{(3A)}$ は 2 種類ある (式 (87) の s'' の自由度)。 $s'' = \uparrow$ では α の 0 次になり、もう 1 つの $s'' = \downarrow$ は 4 次である。同様に $\Sigma_{\downarrow\downarrow}^{(3A)}$ も 1 つが α の 0 次でもう 1 つは 4 次である。残りの $\Sigma_{\uparrow\downarrow}^{(3A)}$ と $\Sigma_{\downarrow\uparrow}^{(3A)}$ は全て 3 次である。つまり $\Sigma^{(3A)}$ では α の最低次は 0 次であり、その 0 次の項が主要な働きをする。このように考えると図 42 の 10 個のダイアグラムでは $\Sigma^{(3A)}$ と $\Sigma^{(3B)}$ の 2 つが α の 0 次分類される。これらは空間反転対称性が破れていない場合にも存在することからも分かる。残りの 8 個が空間反転対称性が破れている場合のみ考慮するダイアグラムである。 $\Sigma^{(3C)}$ 、 $\Sigma^{(3F)\sim(3J)}$ の 6 つは α の 1 次であり、 $\Sigma^{(3D)}$ と $\Sigma^{(3E)}$ の 2 つは α の 2 次になる。よって、 α の 2 次以上である $\Sigma^{(3D)}$ と $\Sigma^{(3E)}$ は他の 8 個のダイアグラムに比べて電子相関効果の影響をほとんど与えない。

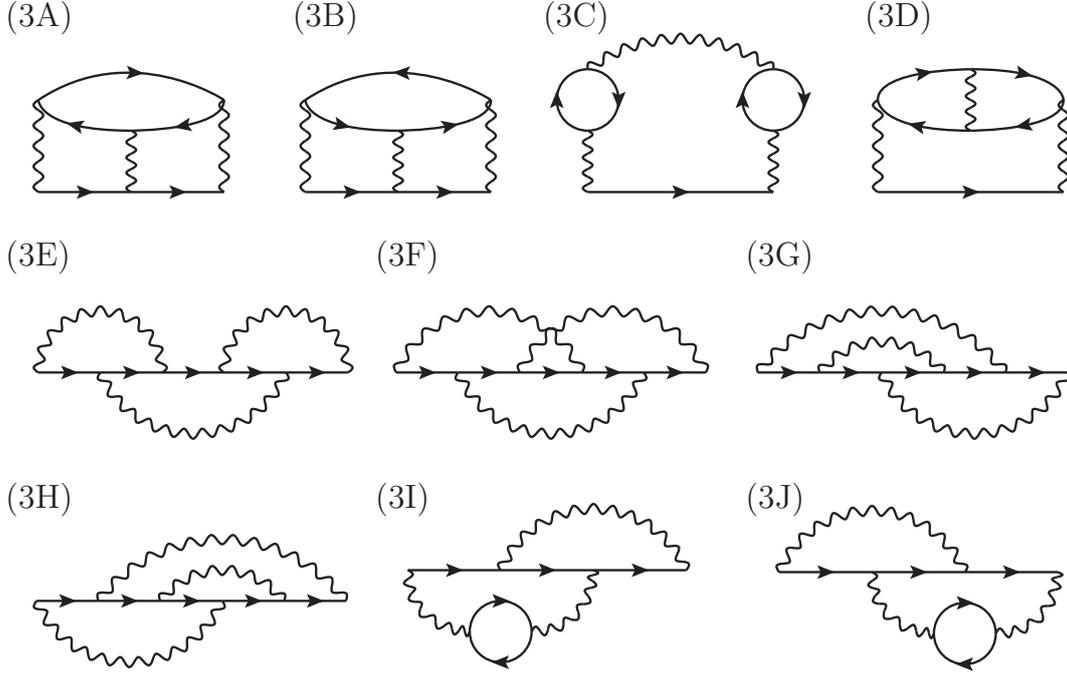


図 42 空間反転対称性が破れている系の自己エネルギーの 3 次のスケルトンダイアグラム。

それぞれのダイアグラムを式で表すと次のようになる。

$$\Sigma_{ss'}^{(3A)}(k) = U^3 \sum_q \sum_{s''} \chi_{s\bar{s}s''\bar{s}'}^{(0)}(q) \chi_{s''\bar{s}'s'\bar{s}}^{(0)}(q) G_{\bar{s}\bar{s}'}^{(0)}(k-q) \quad (87)$$

$$\Sigma_{ss'}^{(3B)}(k) = U^3 \sum_q \sum_{s''} \phi_{s\bar{s}'s''\bar{s}}^{(0)}(q) \phi_{s''\bar{s}'s'\bar{s}'}^{(0)}(q) G_{s'\bar{s}}^{(0)}(q-k) \quad (88)$$

$$\Sigma_{ss'}^{(3C)}(k) = -U^3 \sum_q \sum_{s''} \chi_{s\bar{s}s''\bar{s}'}^{(0)}(q) \chi_{\bar{s}'\bar{s}''s'\bar{s}}^{(0)}(q) G_{ss''}^{(0)}(k-q) \quad (89)$$

$$\Sigma_{ss'}^{(3D)}(k) = U^3 \sum_q \sum_{s''} \chi_{s\bar{s}s''\bar{s}'}^{(0)}(q) \chi_{s''\bar{s}'s'\bar{s}}^{(0)}(q) G_{ss'}^{(0)}(k-q) \quad (90)$$

$$\Sigma_{ss'}^{(3E)}(k) = -U^3 \sum_q \sum_{s''} \chi_{s\bar{s}s''\bar{s}'}^{(0)}(q) \chi_{\bar{s}'\bar{s}''s'\bar{s}}^{(0)}(q) G_{\bar{s}\bar{s}'}^{(0)}(k-q) \quad (91)$$

$$\Sigma_{ss'}^{(3F)}(k) = -U^3 \sum_q \sum_{s''} \phi_{s\bar{s}'s''\bar{s}}^{(0)}(q) \phi_{s''\bar{s}'s'\bar{s}'}^{(0)}(q) G_{\bar{s}'\bar{s}}^{(0)}(q-k) \quad (92)$$

$$\Sigma_{ss'}^{(3G)}(k) = -U^3 \sum_q \sum_{s''} \chi_{s\bar{s}s''\bar{s}'}^{(0)}(q) \chi_{s''\bar{s}'s'\bar{s}}^{(0)}(q) G_{\bar{s}\bar{s}'}^{(0)}(k-q) \quad (93)$$

$$\Sigma_{ss'}^{(3H)}(k) = -U^3 \sum_q \sum_{s''} \chi_{s\bar{s}s''\bar{s}'}^{(0)}(q) \chi_{s''\bar{s}'s'\bar{s}}^{(0)}(q) G_{ss'}^{(0)}(k-q) \quad (94)$$

$$\Sigma_{ss'}^{(3I)}(k) = U^3 \sum_q \sum_{s''} \chi_{s\bar{s}s''\bar{s}'}^{(0)}(q) \chi_{s''\bar{s}'s'\bar{s}}^{(0)}(q) G_{ss'}^{(0)}(k-q) \quad (95)$$

$$\Sigma_{ss'}^{(3J)}(k) = U^3 \sum_q \sum_{s''} \chi_{s\bar{s}s''\bar{s}'}^{(0)}(q) \chi_{s''\bar{s}'s'\bar{s}}^{(0)}(q) G_{\bar{s}\bar{s}'}^{(0)}(k-q), \quad (96)$$

ここで $\chi_{s_1 s_2 s_3 s_4}^{(0)}(q)$ と $\phi_{s_1 s_2 s_3 s_4}^{(0)}(q)$ は、

$$\chi_{s_1 s_2 s_3 s_4}^{(0)}(q) = - \sum_k G_{s_1 s_3}^{(0)}(k+q) G_{s_4 s_2}^{(0)}(k), \quad (97)$$

$$\phi_{s_1 s_2 s_3 s_4}^{(0)}(q) = \sum_k G_{s_1 s_3}^{(0)}(q-k) G_{s_4 s_2}^{(0)}(k), \quad (98)$$

である。全てのダイアグラムは畳み込み積分の形になっているので3次摂動の項も高速フーリエ変換を使って計算できる。

ここからは、 $\lambda = +$ のバンドのフェルミ面での計算結果を示していく。分散関係は 11.1 節と同じ $(t_1, t_2) = (1, 0)$ として計算する。まずは有効質量から見ていく。図 43 に ω -mass、図 44 に k -mass の結果を示す。反対称スピン軌道相互作用がないハバードモデルでは3次の項が2次の項を部分的に打ち消すことが示されている [76]。この場合も同様に2次摂動の結果と比較すると、 ω -mass と k -mass の繰り込みが3次の項によって抑制されているのが分かる。また、ハーフフィリング $n = 1$ においては、3次の項は繰り込みに影響を与えていない。これは粒子・正孔対称性によって $\Sigma^{(3A)}$ と $\Sigma^{(3B)}$ が互いに打ち消し合うためである (図 48、49 から確認できる) [76]。

次に反対称スピン軌道相互作用の繰り込みとフェルミ面の分裂幅を見ていく。図 45 に反対称スピン軌道相互作用の繰り込みを示す。反対称スピン軌道相互作用の繰り込みが3次の項によって抑制されているのが分かる。図 46 には3次摂動でのフェルミ面の分裂幅の結果を示す。3次の項を考慮した場合にも、2次摂動の場合と同様にフェルミ面の分裂幅は電子相関効果の影響を受けない。このように、2次摂動の場合だけではなく、相互作用 U の各次数において反対称スピン軌道相互作用と k -mass の繰り込みが互いに打ち消し合う。ただし、 g ベクトルが $g(\mathbf{k}) = (-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ のようにフェルミ速度で表されるときである。これらの結果から、フェルミ面の分裂幅は U の大きさに依らずに電子相関効果の影響を受けないと予想される。

次に分散関係のパラメーターを図 40 の場合のように $(t_1, t_2) = (1, 0.3)$ と選ぶ。この時、フェルミ面の分裂幅は図 47 に示されているように電子相関効果によって繰り込まれる。このように3次摂

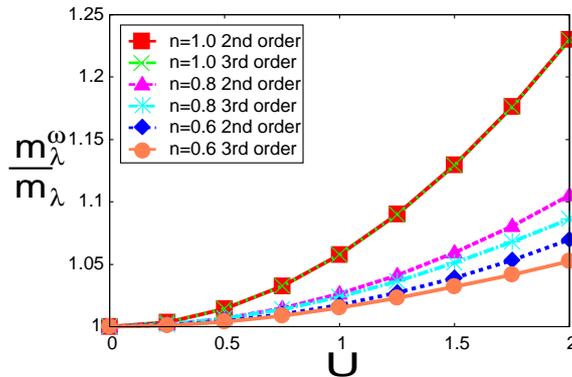


図 43 [110] 方向の $\lambda = +$ バンドにおける ω -mass の相互作用 U 依存性。反対称スピン軌道相互作用の大きさは $\alpha = 0.1$ である。 $n = 1.0, 0.8, 0.6$ における 2 次摂動と 3 次摂動の結果を示す。

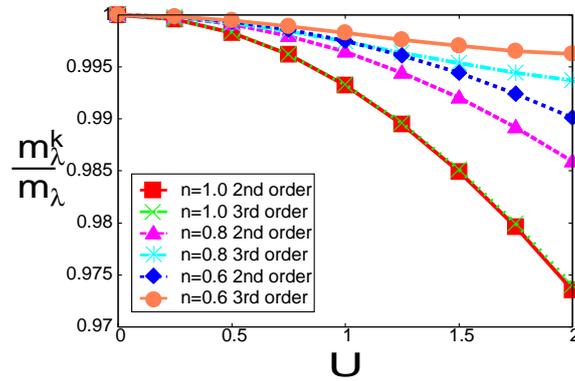


図 44 [110] 方向の $\lambda = +$ バンドにおける k -mass の相互作用 U 依存性。反対称スピン軌道相互作用の大きさは $\alpha = 0.1$ である。 $n = 1.0, 0.8, 0.6$ における 2 次摂動と 3 次摂動の結果を示す。

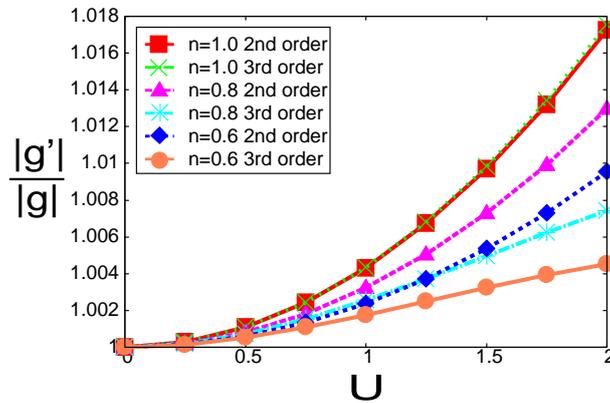


図 45 [110] 方向の $\lambda = +$ バンドにおける反対称スピン軌道相互作用の繰り込みの相互作用 U 依存性。反対称スピン軌道相互作用の大きさは $\alpha = 0.1$ である。 $n = 1.0, 0.8, 0.6$ における 2 次摂動と 3 次摂動の結果を示す。

動の場合でも 2 次摂動と定性的に同じ結果が得られる。ただし、3 次摂動では 2 次摂動に比べ電子相関効果の影響は抑制されている。

この節の最後に図 42 の 3 次の各ダイアグラムからの寄与をまとめる。ここでは粒子数が $n=0.8$ と 1.0 の場合の結果を示し、分散関係のパラメータは $(t_1, t_2) = (1, 0)$ である。つまり、 g ベクトルは $g(\mathbf{k}) = (-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ を満足する。まず、初めに有効質量を見ていく。図 48、49 から分かるように $\Sigma^{(3A)}$ と $\Sigma^{(3B)}$ が有効質量に大きな影響を与える。また、図 48(b) と 49(b) では、 $n=1$ での粒子・正孔対称性のために 3 次の項の影響が互いに打ち消し合うのが確認できる。反対称スピン軌道相互作用の繰り込みに主な影響を与えるのは $\Sigma^{(3C)}$ 、 $\Sigma^{(3F)\sim(3J)}$ であることが図 50 から分かる。反対称スピン軌道相互作用においても、粒子・正孔対称性がある場合には 3 次の項は互いに打ち消し合う (図 50(b))。この節の初めに自己エネルギーのダイアグラムを反対称スピン軌道相互作用 α の次数で分類したが、その結果とも対応している。有効質量は α の 0 次である $\Sigma^{(3A)}$ と $\Sigma^{(3B)}$ によっ

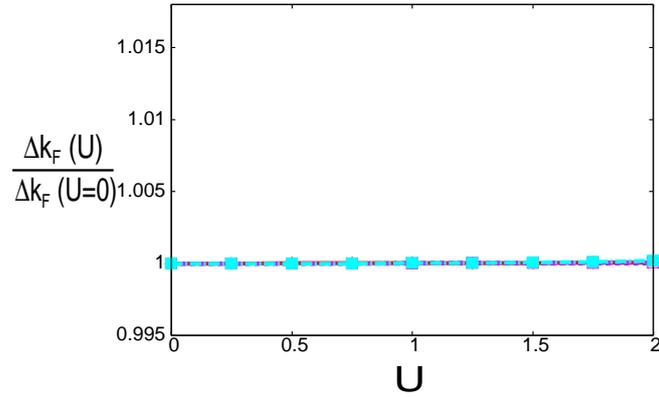


図 46 3次摂動における [110] 方向のスピンスplitしたフェルミ面の分裂幅 Δk_F の相互作用依存性。ここではフィリングが $n=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ の結果を示している。縦軸は反対称スピン軌道相互作用の繰り込みのスケールであり、図 45 の縦軸を元にスケールしている。

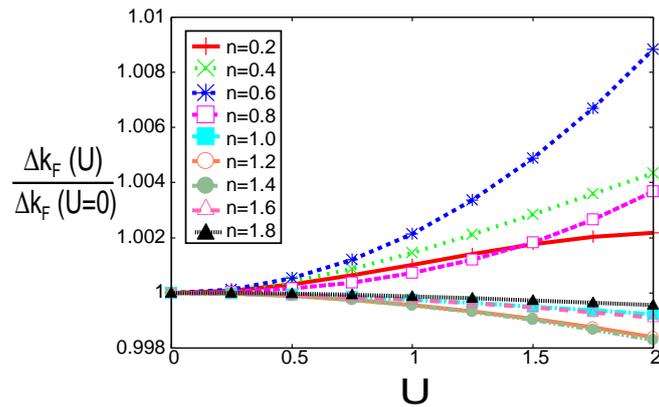


図 47 3次摂動における [110] 方向のスピンスplitしたフェルミ面の分裂幅 Δk_F の相互作用依存性。ここでのフィリングは $U=2$ において上から $n=0.6, 0.4, 0.8, 0.2, 1.8, 1.0, 1.6, 1.2, 1.4$ の結果を示している。分散関係のパラメータは $(t_1, t_2) = (1, 0.3)$ であり、 g ベクトルがフェルミ速度で表されない場合である。

て主に決まり、 α の 1 次である $\Sigma^{(3C)}$ 、 $\Sigma^{(3F)\sim(3J)}$ が反対称スピン軌道相互作用の繰り込みを主に決めている。一方で α の 2 次以上である $\Sigma^{(3D)}$ と $\Sigma^{(3E)}$ は有効質量、反対称スピン軌道相互作用のどちらにもほとんど影響を与えていないため、無視してもよいことが分かる。3 次の各ダイアグラムからの寄与を全て合わせると、フェルミ面の分裂幅では粒子・正孔対称性に関わらずに電子相関効果を打ち消しているのが図 51 から分かる。

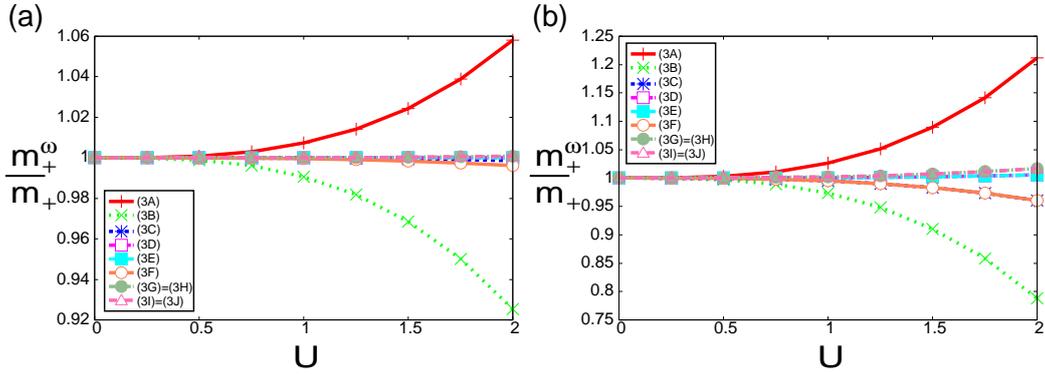


図 48 3 次の各ダイアグラム 1 つのみを考慮した [110] 方向の ω -mass。粒子数は (a) $n = 0.8$ 、(b) $n = 1.0$ である。分散関係のパラメータは $(t_1, t_2) = (1, 0)$ であり g ベクトルはフェルミ速度で表される。反対称スピン軌道相互作用の大きさは $\alpha = 0.1$ である。 $\Sigma^{(3G)}$ と $\Sigma^{(3H)}$ 、それから $\Sigma^{(3I)}$ と $\Sigma^{(3J)}$ はそれぞれ同じ振る舞いを示す。

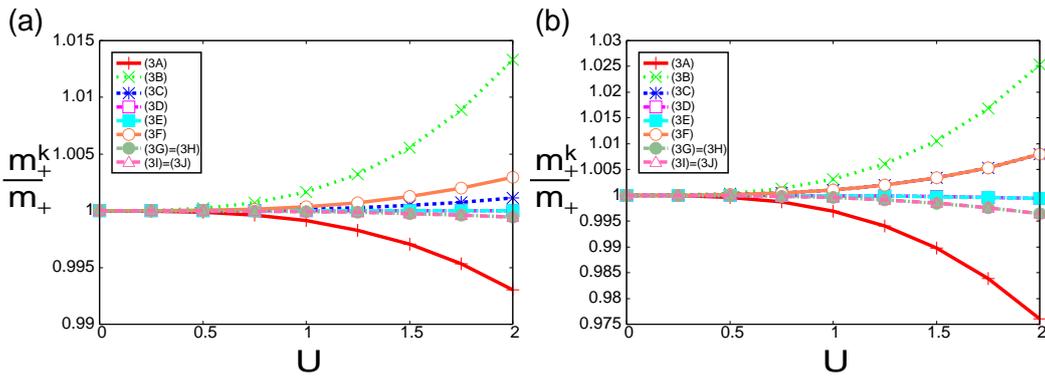


図 49 3 次の各ダイアグラム 1 つのみを考慮した [110] 方向の k -mass。粒子数は (a) $n = 0.8$ 、(b) $n = 1.0$ である。用いたパラメータは図 48 と同じである。

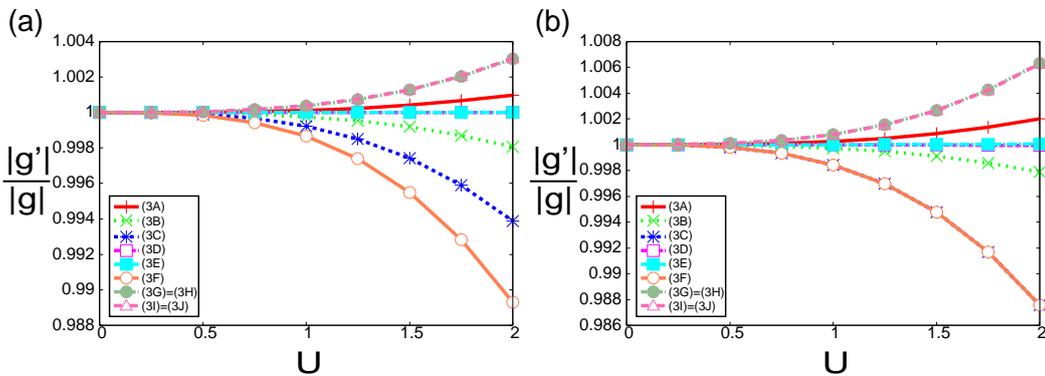


図 50 3 次の各ダイアグラム 1 つのみを考慮した [110] 方向の反対称スピン軌道相互作用の繰り込み。粒子数は (a) $n = 0.8$ 、(b) $n = 1.0$ である。用いたパラメータは図 48 と同じである。

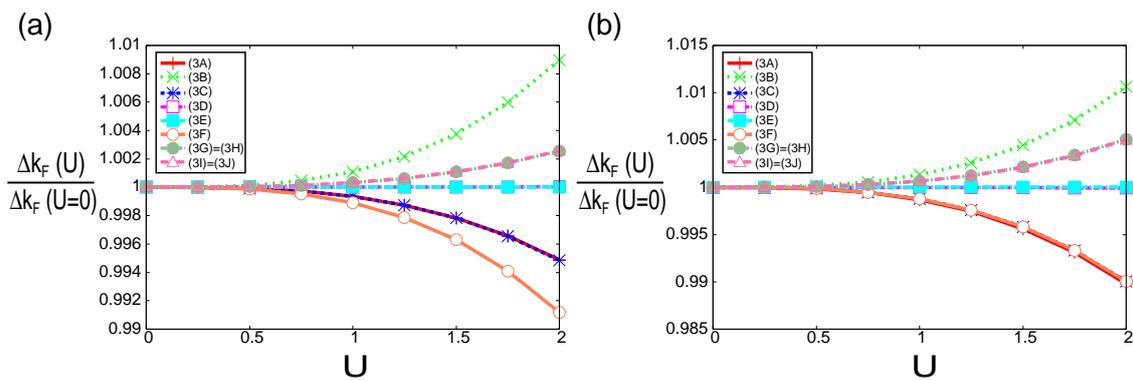


図 51 3 次の各ダイアグラム 1 つのみを考慮した [110] 方向のフェルミ面の分裂幅。粒子数は (a) $n = 0.8$ 、(b) $n = 1.0$ である。用いたパラメーターは図 48 と同じである。

13 第 III 部のまとめと議論

最後にこの第 III 部の内容についてのまとめを行う。この第 III 部では空間反転対称性が破れた系のフェルミ液体のミニマル模型である 2 次元ラシュバ・ハバード模型を用いて電子相関効果を調べた。具体的には有効質量、反対称スピン軌道相互作用の繰り込み、スピン分裂したフェルミ面の分裂幅を摂動論に基づいて計算した。そこで電子相関効果が反対称スピン軌道相互作用を増強させることを示した。しかし、反対称スピン軌道相互作用によってスピン分裂するフェルミ面の分裂幅は電子相関効果の影響をほとんど受けないことが分かった。

2 次摂動では、数値計算と解析計算の両方を行った。その両方のフェルミ面の分裂幅において、電子相関効果によって増強した反対称スピン軌道相互作用が k -mass による繰り込みによって、打ち消されることを示した。このような理由によりフェルミ面の分裂幅 Δk_F は電子相関効果による繰り込みが起こらない。この反対称スピン軌道相互作用と k -mass の繰り込みはラシュバ型スピン軌道相互作用の g ベクトルが $g(\mathbf{k}) = C(-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ のようにフェルミ速度で表される場合には完全に打ち消し合う。このような条件が成り立たない場合にはフェルミ面の分裂幅において有限の繰り込みが起こる。しかし、完全な打ち消し合いが起こらないだけであって、部分的には打ち消すので、フェルミ面の分裂幅の電子相関効果の影響はそんなに大きくはない。

2 次摂動より高次の 3 次摂動の数値計算も行った。これにより 2 次摂動の結果が妥当であることを示した。一般的に、3 次の項は摂動論で主要な項である 2 次の項の影響を部分的に抑制することが知られている [76]。その場合と同じように本研究でも 3 次の項は有効質量と反対称スピン軌道相互作用の繰り込みを抑制するように働く。ただし、フェルミ面の分裂幅は 3 次摂動の場合にも $g(\mathbf{k}) = C(-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ を満足していれば、電子相関効果の影響をほとんど受けない。このように、フェルミ面の分裂幅が電子相関効果に対して強固であることは、2 次摂動の場合だけに起こる特別な結果ではなくて、強相関領域でも同様のメカニズムで起こると予想される。

ここで示した結果はラシュバ型スピン軌道相互作用の場合であったが、ここで得られた結果はラシュバ型以外の反対称スピン軌道相互作用でも同様の結果が得られる。例えば、 g ベクトルが $g(\mathbf{k}) = C(v_x(\mathbf{k}), v_y(\mathbf{k}), 0)$ で表される場合において、電子相関効果は反対称スピン軌道相互作用を増強させるが、一方でフェルミ面の分裂幅にはほとんど影響を与えないことを確認している。このような反対称スピン軌道相互作用は D_n や C_1 や C_2 の点群に分類される結晶構造で許される。例えば、空間反転対称性が破れている重い電子系超伝導体の UIr [77] などが挙げられる。一般的に、反対称スピン軌道相互作用の g ベクトルが準粒子の速度で表されるときにはフェルミ面の分裂幅は電子相関効果の影響を受けない。この条件は空間反転対称性が破れた系の多くの理論研究で採用されている模型で満足している。ここでその例をいくつか挙げていく。1 つ目にヘテロ構造で形成される 2 次元電子ガスの研究 [12, 13] がある。ここでは、分散関係が $\varepsilon(\mathbf{k}) = k^2/2m$ 、ラシュバ型スピン軌道相互作用が $g(\mathbf{k}) = (-k_y, k_x, 0)$ で表される模型に基づいて研究されている [78, 79]。つまり、この時に $g(\mathbf{k}) = m(-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ の関係が満たされているのが分かる。また、大きさを制御できる人工的なスピン軌道相互作用の冷却原子気体 [80] でもこの条件が成り立っている。他にも 1、2、3

次元系のラシュバ・ハバードモデルを用いた研究 [22,57,68,69,73] でも、この条件が満たされている。一方で、 T_d の点群に分類される結晶では、この条件は満たされない。なぜなら、このような場合に g ベクトルはドレッセルハウス型 $g(\mathbf{k}) = (k_x(k_y^2 - k_z^2), k_y(k_z^2 - k_x^2), k_z(k_x^2 - k_y^2))$ [21] になり、ブリルアンゾーンの Γ 点近くでは波数の 3 次で表されるので g ベクトルはフェルミ速度では表されない。

この g ベクトルとフェルミ速度の関係、 $g(\mathbf{k}) = C(-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ は軌道縮退が残る系でも成り立たなくなる。多軌道模型に基づくラシュバ型スピン軌道相互作用の微視的な導出 [22–24, 74, 75] によると、大きな結晶場によって軌道縮退が解ける場合には近似的にその関係が満たされる。しかし、それ以外の場合では準粒子の速度と g ベクトルの両方共に複雑な波数依存性になるため、 $g(\mathbf{k}) = C(-v_y(\mathbf{k}), v_x(\mathbf{k}), 0)$ のように線形な形では表されない。実際に Sr_2RuO_4 の [001] 界面 [74] や $\text{SrTiO}_3/\text{LaAlO}_3$ の界面 [75] では一般的なラシュバ型スピン軌道相互作用とは大きく異なるスピン構造になる。例として Sr_2RuO_4 の [001] 界面での計算結果 [74] を図 52 に示す。図 52 の左図が軌道縮退が残らない場合であり、この時 g ベクトルはフェルミ速度に近い形で記述される。一方で軌道縮退が残る図 52 の右図では、 g ベクトルの構造が大きく違うのが分かる。この場合、 g ベクトルはフェルミ速度で記述されない。他には、 SrTiO_3 の表面の 2 次元電子ガスにおいてキュービック・ラシュバ型スピン軌道相互作用が観測されている [81]。その反対称スピン軌道相互作用は理論から t_{2g} 軌道の電子の軌道自由度によって生じる可能性が報告されている [82]。この時、フェルミ面の分裂幅の大きさはスピン構造と合わせて電子相関効果の影響を受けているはずである。また、ラシュバ・多軌道ハバード模型やラシュバ・周期アンダーソン模型での電子相関効果も興味深く、これらは今後の課題に挙げられる。密度汎関数法に基づく GW 近似 [83] で見られるように結晶場の繰り込みを通して反対称スピン軌道相互作用は繰り込まれると予想される。

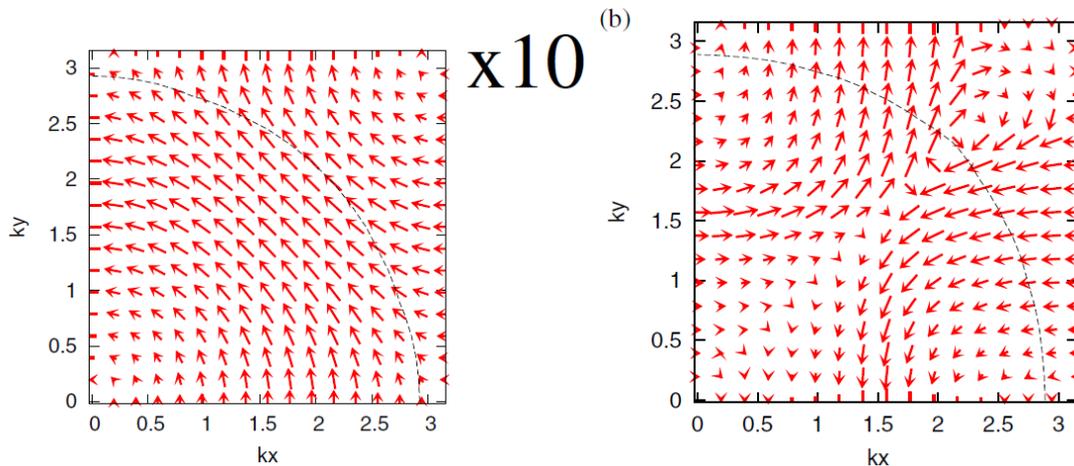


図 52 多軌道模型から導出した Sr_2RuO_4 の [001] 界面の反対称スピン軌道相互作用 [74]。矢印の方向は g ベクトルの向きを、長さは g ベクトルの大きさを表している。点線は γ バンドのフェルミ面を表す。左：軌道縮退が残らない場合。右：軌道縮退が残る場合。

最後に局所的に空間反転対称性が破れた系について触れる。3.6 節でも紹介したようにこの系では大局的な空間反転対称性は保たれているが、原子に注目すると局所的に空間反転対称性が破れている。この場合には本論文で議論してきたようなユニットセル内で一様な反対称スピン軌道相互作用の代わりにユニットセル内で非一様な反対称スピン軌道相互作用が現れる。多層系ではスタaggeredな反対称スピン軌道相互作用が現れ、これにより磁気電気効果 [39] やエキゾチックな超伝導 [34, 41–44] が引き起こされる。本論文でこれまでに示してきたように、このようなスタaggeredな反対称スピン軌道相互作用も電子相関効果によって増強されることが期待される。スタaggeredな反対称スピン軌道相互作用が物性に現れるかどうかは副格子間のホッピングとの競合によって決まる。そのため、スタaggeredな反対称スピン軌道相互作用の繰り込みを計算することも重要な課題である。

付録 A 数値計算の詳細

A.1 FFT による畳み込み積分の数値計算

ここでは自己エネルギーを計算する際に用いた FFT(高速フーリエ変換)の方法について紹介する。ここでは例として次のような U の 2 次の自己エネルギーを考える。

$$\Sigma(k) = \sum_q \left\{ \sum_{k'} G_1(k' + q) G_2(k') \right\} G_3(k - q). \quad (99)$$

簡単のために、ここでは係数の U^2 や符号を省略した。まず、

$$\chi(q) = \sum_{k'} G_1(k' + q) G_2(k') = \int G_1(k' + q) G_2(k') dk', \quad (100)$$

として、これを求めるところから始める。この $\chi(q)$ のフーリエ変換は、

$$\begin{aligned} \chi(x) &= \int \chi(q) e^{-iqx} dq \\ &= \iint G_1(k' + q) G_2(k') e^{-iqx} dq dk' \\ &= \int G_1(k' + q) e^{-i(k'+q)x} dq \int G_2(k') e^{ik'x} dk' \dots (*) \\ &= G_1(x) \int G_2(k') e^{-ik' \times (-x)} dk' \\ &= G_1(x) G_2(-x), \end{aligned} \quad (101)$$

となる。ここで、 $G_2(k') \equiv G'(-k')$ とすると、(*) は、

$$\begin{aligned} \chi(x) &= \int G_1(k' + q) e^{-i(k'+q)x} dq \int G'(-k') e^{-i \times (-k')x} dk' \\ &= G_1(x) G'(x). \end{aligned} \quad (102)$$

となるので、

$$\chi(q) = \int \chi(x) e^{iqx} dx = \int G_1(x) G'(x) e^{iqx} dx, \quad (103)$$

となる。このように $\chi(q)$ は 2 つのグリーン関数 $G(k)$ をフーリエ変換して、その積をフーリエ逆変換することで求まる。 $G'(x)$ は、

$$G'(x) = \int G'(k') e^{-ik'x} dk' = \int G_2(-k') e^{-ik'x} dk'. \quad (104)$$

つまり、 $G'(x)$ は $G_2(-k')$ のフーリエ変換になっている。もし、 $G_i(-k) = G_i^*(k)$ が成り立つのであれば、 $G'(k) = G_i^*(k)$ になるので、 $G'(x)$ は $G_i^*(k)$ のフーリエ変換になる。この条件は $G(k) = (i\omega_n -$

$\varepsilon(\mathbf{k})^{-1}$ の場合には成り立つ。しかし、反対称スピン軌道相互作用がある場合には $G_i(\mathbf{k}) \neq G_i^*(-\mathbf{k})$ となるので注意が必要である。同様に、

$$\Sigma(\mathbf{k}) = \sum_q \chi(q) G_3(\mathbf{k} - q) = \int \chi(q) G_3(\mathbf{k} - q) dq, \quad (105)$$

を考える。このフーリエ変換は、

$$\begin{aligned} \Sigma(x) &= \int \Sigma(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}x} d\mathbf{k} \\ &= \int \chi(q) e^{-iqx} dq \int G_3(\mathbf{k} - q) e^{-i(\mathbf{k}-q)x} d\mathbf{k} \\ &= \chi(x) G_3(x), \end{aligned} \quad (106)$$

となるので、

$$\Sigma(\mathbf{k}) = \int \Sigma(x) e^{i\mathbf{k}x} dx = \int \chi(x) G_3(x) e^{i\mathbf{k}x} dx, \quad (107)$$

となる。

プログラムのアルゴリズムは、

1. $G_1(\mathbf{k})$ 、 $G'(\mathbf{k})(= G_2(-\mathbf{k}))$ をそれぞれフーリエ変換して、 $G_1(x)$ 、 $G'(x)$ を得る。
2. $G_1(x)G'(x)$ をフーリエ逆変換して、 $\chi(q)$ を得る。
3. $\chi(q)$ の振動数成分を +1 シフトする。 $\omega_{\text{old}}=(1,2,3,\dots,n-1,n) \rightarrow \omega_{\text{new}}=(n,1,2,\dots,n-2,n-1)$ のように並び替える。
4. $\chi(q)$ 、 $G_3(\mathbf{k})$ それぞれをフーリエ変換して、 $\chi(x)$ 、 $G_3(x)$ を得る。
5. $\chi(x)G_3(x)$ をフーリエ逆変換して、 $\Sigma(\mathbf{k})$ を得る。

となる。このようにして自己エネルギーは計算される。 U の 3 次以上も同様にして計算される。

A.2 サイト当たりの粒子数密度 n の導出

ここではサイト当たりの粒子数密度 n の導出を行う。まずグリーン関数の定義より、

$$G(\mathbf{k}, \tau) = -\langle T_\tau c_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle, \quad (108)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow +0} G(\mathbf{k}, \tau) = -\langle c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle = -(1 - \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle) = -1 + n_{\mathbf{k}}, \quad (109)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow -0} G(\mathbf{k}, \tau) = \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle = n_{\mathbf{k}}, \quad (110)$$

である。これらの式から、 $\tau = 0$ でのバンド表示のグリーン関数は、

$$G_\lambda(\mathbf{k}, 0) = \frac{1}{2} \left\{ \lim_{\tau \rightarrow +0} G_\lambda(\mathbf{k}, \tau) + \lim_{\tau \rightarrow -0} G_\lambda(\mathbf{k}, \tau) \right\} = n_{\lambda\mathbf{k}} - \frac{1}{2}, \quad (111)$$

となる。ここで、 $n_{\lambda\mathbf{k}}$ は運動量 \mathbf{k} の λ バンドの粒子数密度である。また、フーリエ変換の式から、

$$G_\lambda(\mathbf{k}, 0) = T \sum_n G_\lambda(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (\tau = 0 \text{ より } e^{-i\omega_n \tau} = 1), \quad (112)$$

であるから、式 (111)、(112) より、

$$n_{\lambda k} = \frac{1}{2} + T \sum_{\mathbf{n}} G_{\lambda}(\mathbf{k}, i\omega_{\mathbf{n}}), \quad (113)$$

が成り立つ。以上より、 λ バンドの粒子数密度は、

$$n_{\lambda} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\lambda k} = \frac{1}{2} + \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{n}} G_{\lambda}(\mathbf{k}, i\omega_{\mathbf{n}}), \quad (114)$$

で表されるから、スピン分裂した 2 つのバンドを合わせた全粒子数は、

$$n = 1 + \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{n}} (G_{+}(\mathbf{k}, i\omega_{\mathbf{n}}) + G_{-}(\mathbf{k}, i\omega_{\mathbf{n}})), \quad (115)$$

となる。

付録 B 解析計算の詳細

B.1 空間反転対称性が破れている系のグリーン関数の導出

ここでは、相互作用がない場合 ($U = 0$) のグリーン関数のスピン表示からバンド表示への変換方法を説明する。まず初めに、式 (11) の H_0 の行列表示 \hat{H}_0 をユニタリ行列 \hat{U} で対角化する。

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{C}^\dagger \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{H}_0 \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{C} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Gamma}^\dagger \begin{pmatrix} \varepsilon + \alpha|\mathbf{g}| & 0 \\ 0 & \varepsilon - \alpha|\mathbf{g}| \end{pmatrix} \hat{\Gamma}. \end{aligned} \quad (116)$$

ここで、

$$\hat{\Gamma}^\dagger = \hat{C}^\dagger \hat{U} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & \gamma_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \hat{U}, \quad (117)$$

$$\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2|\mathbf{g}|(|\mathbf{g}| + g_z)}} \begin{pmatrix} |\mathbf{g}| + g_z & -g_x + ig_y \\ g_x + ig_y & |\mathbf{g}| + g_z \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} u_{\uparrow\uparrow} & u_{\uparrow\downarrow} \\ u_{\downarrow\uparrow} & u_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (118)$$

である。これらより、

$$c_{\mathbf{k}s} = \sum_{\lambda=\pm} u_{s\lambda}(\mathbf{k}) \gamma_{\mathbf{k}\lambda}, \quad (119)$$

$$c_{\mathbf{k}s}^\dagger = \sum_{\lambda=\pm} u_{s\lambda}^*(\mathbf{k}) \gamma_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger, \quad (120)$$

$$u_{s\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2|\mathbf{g}|(|\mathbf{g}| + g_z)}} \left\{ (|\mathbf{g}| + g_z) \delta_{s\lambda} + (-sg_x + ig_y)(1 - \delta_{s\lambda}) \right\}, \quad (121)$$

となる。これらを用いると 1 粒子グリーン関数は定義より、

$$\begin{aligned} G_{ss'}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau c_{\mathbf{k}s}(\tau) c_{\mathbf{k}s'}^\dagger \rangle \\ &= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau \left(\sum_{\lambda} u_{s\lambda}(\mathbf{k}) \gamma_{\mathbf{k}\lambda}(\tau) \right) \left(\sum_{\lambda'} u_{s'\lambda'}^*(\mathbf{k}) \gamma_{\mathbf{k}\lambda'}^\dagger \right) \rangle \\ &= \sum_{\lambda\lambda'} u_{s\lambda} u_{s'\lambda'}^* \times \left(- \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau \gamma_{\mathbf{k}\lambda}(\tau) \gamma_{\mathbf{k}\lambda'}^\dagger \rangle \right) \\ &= \sum_{\lambda\lambda'} u_{s\lambda} u_{s'\lambda'}^* \frac{\delta_{\lambda\lambda'}}{i\omega_n - \varepsilon_\lambda(\mathbf{k})} \\ &= \sum_{\lambda} u_{s\lambda} u_{s'\lambda}^* \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_\lambda(\mathbf{k})}, \end{aligned} \quad (122)$$

と表される。ここで、 $c_{\mathbf{k}s}(\tau) = \exp(H_0\tau) c_{\mathbf{k}s} \exp(-H_0\tau)$ 、 $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) + \lambda\alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})|$ である。また、式 (121) より、

$$u_{s\lambda} u_{s'\lambda}^* = \left(\frac{\hat{I} + \lambda \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2} \right)_{ss'}. \quad (123)$$

となる。また、バンド表示の 1 粒子グリーン関数 $G_\lambda^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ は定義より、

$$G_\lambda^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau \gamma_{\mathbf{k}\lambda}(\tau) \gamma_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \rangle = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_\lambda(\mathbf{k})}, \quad (124)$$

となる。以上より式 (15)、

$$\hat{G}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \sum_{\lambda=\pm} \left(\frac{\hat{I} + \lambda \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2} \right) G_\lambda^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n), \quad (125)$$

が導出される。

B.2 フェルミ面の分裂幅 Δk_F の導出

ここでは反対称スピン軌道相互作用によってスピン分裂したフェルミ面の分裂幅の解析式の導出を行う。反対称スピン軌道相互作用の大きさ α がフェルミエネルギーに比べて十分小さいという仮定のもとで計算を行う。この条件は多くの空間反転対称性が破れている金属で実現している。まず、 $\alpha = 0$ の場合のフェルミ波数 k_F を求める。 $\alpha = 0$ のグリーン関数は、

$$G^R(k) = \frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_0^R(k)}, \quad (126)$$

であるから、フェルミ波数 k_F は、

$$\varepsilon(k_F) + \text{Re}\Sigma_0^R(k_F, 0) = 0, \quad (127)$$

を満たす式から求まる。次に $\alpha \neq 0$ の場合のフェルミ波数 $k_{F\lambda}$ を求める。バンド表示のグリーン関数は、

$$G_\lambda^R(k) = \frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_0^R(k) - \lambda\alpha|\mathbf{g}'(k)|}, \quad (128)$$

である。準粒子のエネルギー $\varepsilon_\lambda^*(\mathbf{k})$ は、

$$\varepsilon_\lambda^*(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}) - \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, \varepsilon_\lambda^*(\mathbf{k})) - \lambda\alpha|\mathbf{g}'(\mathbf{k}, \varepsilon_\lambda^*(\mathbf{k}))| = 0, \quad (129)$$

を満たす。フェルミ面を考えているので $\varepsilon_\lambda^*(\mathbf{k}) = 0$ とすると、

$$\varepsilon(\mathbf{k}) + \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0) + \lambda\alpha|\mathbf{g}'(\mathbf{k}, 0)| = 0, \quad (130)$$

となる。次に $\mathbf{k} \sim k_F$ で各項を展開していく。これは α を十分小さいとしているので、 $\alpha \neq 0$ のフェルミ波数が $\alpha = 0$ での値に比べて大きく変化していないからである。1 次の項まで考慮すると、

$$\begin{aligned} & \varepsilon(k_F) + \left. \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=k_F} \cdot (\mathbf{k} - k_F) + \text{Re}\Sigma_0^R(k_F, 0) + \left. \frac{\partial \text{Re}\Sigma_0^R(\mathbf{k}, 0)}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=k_F} \cdot (\mathbf{k} - k_F) \\ & + \lambda\alpha|\mathbf{g}'(k_F, 0)| + \lambda\alpha \left. \frac{\partial |\mathbf{g}'(\mathbf{k}, 0)|}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=k_F} \cdot (\mathbf{k} - k_F) = 0. \end{aligned} \quad (131)$$

となる。ここで、式 (127) から、第 1 項目と第 3 項目が消える。よって、

$$v_\lambda^k(\mathbf{k}_F, 0) \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_F) + \lambda\alpha |g'(\mathbf{k}_F, 0)| = 0, \quad (132)$$

である。ここで、 $v_\lambda^k(\mathbf{k}_F, \omega)$ は k -mass によって繰り込まれた速度で、

$$v_\lambda^k(\mathbf{k}_F, \omega) = \left. \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_F} + \left. \frac{\partial \text{Re} \Sigma_0^R(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_F} + \lambda\alpha \left. \frac{\partial |g'(\mathbf{k}, \omega)|}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_F}. \quad (133)$$

である。1 と 2 項目に比べて 3 項目は g' の k 依存性が小さいとすれば無視できる。その場合には $v_\lambda^k \rightarrow v^k$ となる。式 (132) の解は $k_{F\lambda}$ であるから、

$$v_\lambda^k(\mathbf{k}_F, 0) \cdot (\mathbf{k}_{F\lambda} - \mathbf{k}_F) + \lambda\alpha |g'(\mathbf{k}_F, 0)| = 0, \quad (134)$$

となる。よって、 λ バンドでのフェルミ波数は、

$$\mathbf{k}_{F\lambda} = \mathbf{k}_F - \lambda\alpha \frac{|g'(\mathbf{k}_F, 0)|}{v_\lambda^k(\mathbf{k}_F, 0)}, \quad (135)$$

となる。以上よりスピン分裂したフェルミ面の分裂幅は、

$$\Delta k_F = |\mathbf{k}_{F+} - \mathbf{k}_{F-}| = \alpha |g'(\mathbf{k}_F, 0)| \left(\frac{1}{|v_+^k(\mathbf{k}_F, 0)|} + \frac{1}{|v_-^k(\mathbf{k}_F, 0)|} \right), \quad (136)$$

となる。 $v_\lambda^k \rightarrow v^k$ の場合は、

$$\Delta k_F = |\mathbf{k}_{F+} - \mathbf{k}_{F-}| = \frac{2\alpha |g'(\mathbf{k}_F, 0)|}{|v^k(\mathbf{k}_F, 0)|}, \quad (137)$$

となる。また、相互作用がない $U = 0$ で同様の計算を行うと、

$$\Delta k_F = |\mathbf{k}_{F+} - \mathbf{k}_{F-}| = \frac{2\alpha |g(\mathbf{k}_F)|}{|v(\mathbf{k}_F)|}, \quad (138)$$

となる。

謝辞

本論文をまとめるにあたり、多くの方々の御協力を頂きました。皆様に心より感謝申し上げます。

指導教官の柳瀬陽一准教授には学部4年生の後期から博士前期、後期課程と長い間、丁寧かつ熱心な研究のご指導を賜りました。本当に有り難うございました。大野義章教授、奥西巧一准教授、金鋼准教授からは物性コロキウムなどで研究についての色々な質問を頂きました。これにより今まで気付いていなかった事柄に気付くことができました。学位論文審査員である摂待力生教授、武田直也教授には数多くの有益なご指摘を頂きました。局所的な空間反転対称性の破れの研究においてスイス連邦工科大学チューリッヒ校のManfred Sigrist教授には共同研究者として有益な意見を頂きました。ここに感謝の意を表します。

新潟大学物性理論研究室の皆様にも感謝の意を申し上げます。山田武見氏には電子相関効果の研究において計算方法など、様々な助言を頂きました。物性理論研究室を卒業された柳有起氏、山川洋一氏にも学会等で研究に対する有益な助言を頂きました。また、同じ柳瀬研究室に所属している吉田智大氏、高松周平氏、中村康晴氏、人見尚典氏、渡辺達也氏、それから卒業された川辺俊介氏、小野澤景介氏には大変お世話になりました。皆様のゼミなどでの発表は大変勉強になりました。それから物性理論研究室の他の皆様にも感謝致します。

同期である吉田智大氏、新井優太氏、吉川丈夫氏、金山雅人氏、関川直毅氏にも感謝致します。皆様のおかげで、楽しい大学院生活を過ごすことができました。

最後にこれまでの生活を支えてくれた家族に感謝致します。

論文リスト

1. *Spin Susceptibility in Non-centrosymmetric Superconductors with Topological Transition of Fermi Surfaces*
D. Maruyama and Y. Yanase: J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 82, pp. 084704.1-5 (5pages), 2013.
(第 II 部に対応)
2. *Non-centrosymmetric Superconductors with Topological Transition of Fermi Surfaces*
D. Maruyama and Y. Yanase: JPS Conf. Proc. Vol. 3, pp. 015034.1-6 (6pages), 2014.
(第 II 部に対応)

その他参考論文

1. *Superconductivity without Local Inversion Symmetry; Multi-layer Systems*
D. Maruyama, M. Sigrist, and Y. Yanase: J. Phys.: Conf. Ser. Vol. 400, pp. 022069.1-4 (4pages), 2012.
2. *Locally Non-centrosymmetric Superconductivity in Multilayer Systems*
D. Maruyama, M. Sigrist, and Y. Yanase: J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 81, pp. 034702.1-11 (11pages), 2012.
(参考文献 [34])
3. *Spin-orbit Coupling in Multilayer Superconductors with Charge Imbalance*
D. Maruyama, M. Sigrist, and Y. Yanase: J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 82, pp. 043703.1-5 (5pages), 2013.
(参考文献 [38])
4. パリティの局所的な破れが誘起するエキゾチック超伝導
吉田智大, 丸山大輔, 柳瀬陽一: 固体物理 第 49 巻第 3 号, pp. 109-124 (16pages), 2014.
(参考文献 [44])
5. *Superconductors with Staggered Non-centrosymmetry*
M. Sigrist, D. F. Agterberg, M. H. Fischer, J. Goryo, F. Loder, S.-H. Rhim, D. Maruyama, Y. Yanase, T. Yoshida, and S. J. Youn: J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 83, pp. 061014.1-8 (8pages), 2014.
(参考文献 [43])

参考文献

- [1] S. Murakami, N. Nagaosa, and S. C. Zhang: *Science* **301** (2003) 1348.
- [2] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald: *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 126603.
- [3] X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Park, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa, and Y. Tokura: *Nature* **465** (2010) 901.
- [4] Y. Togawa, T. Koyama, K. Takayanagi, S. Mori, Y. Kousaka, J. Akimitsu, S. Nishihara, K. Inoue, A. S. Ovchinnikov, and J. Kishine: *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 107202.
- [5] E. Bauer and M. Sigrist: *Non-Centrosymmetric Superconductors: Introduction and Overview (Lecture Notes in Physics)* (2012).
- [6] P. A. Frigeri: 博士論文 (2006).
- [7] E. I. Rashba: *Sov. Phys. Solid State* **1** (1959) 368.
- [8] E. Bauer, G. Hilscher, H. Michor, C. Paul, E. W. Scheidt, A. Griбанov, Y. Seropegin, H. Noël, M. Sigrist, and P. Rogl: *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 027003.
- [9] N. Kimura, K. Ito, K. Saitoh, Y. Umeda, H. Aoki, and T. Terashima: *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 247004.
- [10] I. Sugitani, Y. Okuda, H. Shishido, T. Yamada, A. Thamizhavel, E. Yamamoto, T. D. Matsuda, Y. Haga, T. Takeuchi, R. Settai, and Y. Ōnuki: *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** (2006) 043703.
- [11] K. Ishizaka, M. S. Bahramy, H. Murakawa, M. Sakano, T. Shimojima, T. Sonobe, K. Koizumi, S. Shin, H. Miyahara, A. Kimura, K. Miyamoto, T. Okuda, H. Namatame, M. Taniguchi, R. Arita, N. Nagaosa, K. Kobayashi, Y. Murakami, R. Kumai, Y. Kaneko, Y. Onose, and Y. Tokura: *Nat. Mater.* **10** (2011) 521.
- [12] A. Ohtomo and H. Y. Hwang: *Nature* **427** (2004) 423.
- [13] K. Ueno, H. Shimotani, H. Yuan, J. Ye, M. Kawasaki, and Y. Iwasa: *J. Phys. Soc. Jpn.* **83** (2014) 032001.
- [14] M. Shimozawa, K. Goh, S. R. Endo, R. Kobayashi, T. Watashige, Y. Mizukami, H. Ikeda, H. Shishido, Y. Yanase, T. Terashima, T. Shibauchi, and Y. Matsuda: *Phys. Rev. Lett.* **112** (2014) 156404.
- [15] R. Winkler: *Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (2003).
- [16] T. Okuda and A. Kimura: *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** (2013) 021002.
- [17] T. Hirahara, T. Nagao, I. Matsuda, G. Bihlmayer, E. V. Chulkov, Y. M. Koroteev, P. M. Echenique, M. Saito, and S. Hasegawa: *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 146803.
- [18] Y. Ōnuki and R. Settai: *Non-Centrosymmetric Superconductors: Introduction and Overview (Lecture Notes in Physics)* (2012) Chap. 6.
- [19] K. Togano, P. Badica, Y. Nakamori, S. Orimo, H. Takeya, and K. Hirata: *Phys. Rev. Lett.* **93**

- (2004) 247004.
- [20] P. Badica, T. Kondo, and K. Togano: *J. Phys. Soc. Jpn.* **74** (2005) 1014.
- [21] G. Dresselhaus: *Phys. Rev.* **100** (1955) 580.
- [22] Y. Yanase and M. Sigrist: *J. Phys. Soc. Jpn.* **77** (2008) 124711.
- [23] 柳瀬陽一、播磨尚朝: *固体物理* **46** (2011) 283.
- [24] 柳瀬陽一、播磨尚朝: *固体物理* **47** (2012) 101.
- [25] S. Fujimoto: *J. Phys. Soc. Jpn.* **76** (2007) 034712.
- [26] S. Fujimoto: *J. Phys. Soc. Jpn.* **76** (2007) 051008.
- [27] 藤本聡: *日本物理学会誌* **63** (2008) 18.
- [28] S. Fujimoto and S. K. Yip: *Non-Centrosymmetric Superconductors: Introduction and Overview (Lecture Notes in Physics)* (2012) Chap. 8.
- [29] 村上修一: *日本物理学会誌* **62** (2007) 2.
- [30] 井上克也、岸根順一郎: *日本結晶学会誌* **53** (2011) 339.
- [31] 林信彦、M. Sigrist: *固体物理* **41** (2006) 631.
- [32] P. A. Frigeri, D. F. Agterberg, and M. Sigrist: *New J. Phys.* **6** (2004) 115.
- [33] K. V. Samokhin: *Phys. Rev. B* **76** (2007) 094516.
- [34] D. Maruyama, M. Sigrist, and Y. Yanase: *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** (2012) 034702.
- [35] H. Shishido, T. Shibauchi, K. Yasu, T. Kato, H. Kontani, T. Terashima, and Y. Matsuda: *Science* **327** (2010) 980.
- [36] Y. Mizukami, H. Shishido, T. Shibauchi, M. Shimozawa, S. Yasumoto, D. Watanabe, M. Yamashita, H. Ikeda, T. Terashima, H. Kontani, and Y. Matsuda: *Nat.Phys.* **7** (2011) 849.
- [37] H. Mukuda, M. Abe, Y. Araki, Y. Kitaoka, K. Tokiwa, T. Watanabe, A. Iyo, H. Kito, and Y. Tanaka: *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 087001.
- [38] D. Maruyama, M. Sigrist, and Y. Yanase: *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** (2013) 043703.
- [39] Y. Yanase: *J. Phys. Soc. Jpn.* **83** (2014) 014703.
- [40] S. K. Goh, Y. Mizukami, H. Shishido, D. Watanabe, S. Yasumoto, M. Shimozawa, M. Yamashita, T. Terashima, Y. Yanase, T. Shibauchi, A. I. Buzdin, and Y. Matsuda: *Phys. Rev. Lett.* **109** (2012) 157006.
- [41] T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase: *Phys. Rev. B* **86** (2012) 134514.
- [42] T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase: *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** (2013) 074714.
- [43] M. Sigrist, D. F. Agterberg, M. H. Fischer, J. Goryo, F. Loder, S.-H. Rhim, D. Maruyama, Y. Yanase, T. Yoshida, and S. J. Youn: *J. Phys. Soc. Jpn.* **83** (2014) 061014.
- [44] 吉田智大、丸山大輔、柳瀬陽一: *固体物理* **49** (2014) 109.
- [45] R. Khasanov, I. L. Landau, C. Baines, F. La Mattina, A. Maisuradze, K. Togano, and H. Keller: *Phys. Rev. B* **73** (2006) 214528.
- [46] H. Q. Yuan, D. F. Agterberg, N. Hayashi, P. Badica, D. Vandervelde, K. Togano, M. Sigrist, and M. B. Salamon: *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 017006.

- [47] M. Nishiyama, Y. Inada, and G.-q. Zheng: Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 047002.
- [48] H. Takeya, M. ElMassalami, S. Kasahara, and K. Hirata: Phys. Rev. B **76** (2007) 104506.
- [49] T. Yokoya, T. Muro, I. Hase, H. Takeya, K. Hirata, and K. Togano: Phys. Rev. B **71** (2005) 092507.
- [50] M. Nishiyama, Y. Inada, and G.-q. Zheng: Phys. Rev. B **71** (2005) 220505.
- [51] H. Takeya, K. Hirata, K. Yamaura, K. Togano, M. El Massalami, R. Rapp, F. A. Chaves, and B. Ouladdiaf: Phys. Rev. B **72** (2005) 104506.
- [52] D. C. Peets, G. Eguchi, M. Kriener, S. Harada, S. M. Shamsuzzamen, Y. Inada, G.-Q. Zheng, and Y. Maeno: Phys. Rev. B **84** (2011) 054521.
- [53] S. Harada, J. J. Zhou, Y. G. Yao, Y. Inada, and G.-q. Zheng: Phys. Rev. B **86** (2012) 220502.
- [54] Y. Yanase and M. Sigrist: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 124709.
- [55] S. P. Mukherjee and T. Takimoto: Phys. Rev. B **86** (2012) 134526.
- [56] H. Shimahara: J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 024703.
- [57] Y. Yanase and M. Sigrist: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 043712.
- [58] K.-W. Lee and W. E. Pickett: Phys. Rev. B **72** (2005) 174505.
- [59] T. Shishidou and T. Oguchi: preprint (2012).
- [60] N. Kimura, K. Ito, H. Aoki, S. Uji, and T. Terashima: Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 197001.
- [61] R. Settai, Y. Miyauchi, T. Takeuchi, F. Lévy, I. Sheikin, and Y. Ōnuki: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 073705.
- [62] Y. Tada, N. Kawakami, and S. Fujimoto: Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 267006.
- [63] Y. Tada, N. Kawakami, and S. Fujimoto: Phys. Rev. B **81** (2010) 104506.
- [64] Y. Okuda, Y. Miyauchi, Y. Ida, Y. Takeda, C. Tonohiro, Y. Oduchi, T. Yamada, N. Duc Dung, T. D. Matsuda, Y. Haga, T. Takeuchi, M. Hagiwara, K. Kindo, H. Harima, K. Sugiyama, R. Settai, and Y. Ōnuki: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 044708.
- [65] T. Takimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 113706.
- [66] Y. Tada, N. Kawakami, and S. Fujimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 054707.
- [67] T. Takimoto and P. Thalmeier: J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 103703.
- [68] T. Yokoyama, S. Onari, and Y. Tanaka: Phys. Rev. B **75** (2007) 172511.
- [69] K. Yada, S. Onari, Y. Tanaka, and J.-i. Inoue: Phys. Rev. B **80** (2009) 140509.
- [70] S. Hayami, H. Kusunose, and Y. Motome: Phys. Rev. B **90** (2014) 024432.
- [71] S. Hayami, H. Kusunose, and Y. Motome: Phys. Rev. B **90** (2014) 081115.
- [72] T. Hitomi and Y. Yanase: J. Phys. Soc. Jpn. **83** (2014) 114704.
- [73] F. Goth and F. F. Assaad: arXiv:1406.7293 .
- [74] Y. Yanase: J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 044711.
- [75] Y. Nakamura and Y. Yanase: J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 083705.
- [76] Y. Yanase, T. Jujo, T. Nomura, H. Ikeda, T. Hotta, and K. Yamada: Phys. Rep. **1** (2003) 387.
- [77] T. Akazawa, H. Hidaka, H. Kotegawa, T. C. Kobayashi, T. Fujiwara, E. Yamamoto, Y. Haga,

参考文献

- R. Settai, and Y. Ōnuki: J. Phys. Soc. Jpn. **73** (2004) 3129.
- [78] K. Michaeli, A. C. Potter, and P. A. Lee: Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 117003.
- [79] D. F. Agterberg, E. Babaev, and J. Garaud: Phys. Rev. B **90** (2014) 064509.
- [80] V. Galitski and I. B. Spielman: Nature **49** (2013) 494.
- [81] H. Nakamura, T. Koga, and T. Kimura: Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 206601.
- [82] Z. Zhong, A. Tóth, and K. Held: Phys. Rev. B **87** (2013) 161102.
- [83] I. P. Rusinov, I. A. Nechaev, S. V. Eremeev, C. Friedrich, S. Blügel, and E. V. Chulkov: Phys. Rev. B **87** (2013) 205103.