



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	二重量子井戸における反平行スピホール流のボルツマン方程式に基づく運動論的研究
Author(s)	石川, 俊也
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第15171号
Issue Date	2022-09-26
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k15171
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/89351
Type	doctoral thesis
File Information	Toshiya_Ishikawa.pdf



令和4年度 博士論文

二重量子井戸における反平行スピホール流の
ボルツマン方程式に基づく運動論的研究

北海道大学大学院 工学院 応用物理学専攻

物性物理工学研究室

石川 俊也

概要

近年、電子が持つ電荷の自由度とスピンの自由度の両方を利用し、新奇現象の開拓やデバイスへの工学的な応用を目指すスピントロニクスにおいて数多くの研究が進められている。スピントロニクスでスピン自由度を効率的に利用するためにはスピン偏極の生成が必須である。非磁性体においてもスピン偏極を生成できる代表的な現象にスピンホール効果がある。スピンホール効果は、物質中のスピン軌道相互作用によって、印加電場と垂直な方向に純粋スピン流が生じる現象であり、スピン流は試料端での蓄積によりスピン偏極を生成する。このスピン偏極は磁場をスピンの向きに垂直に印加し Hanle 効果と呼ばれるスピンのダイナミクスを測定することで観測されている。

また最近になり、擬スピンをエレクトロニクスに応用する擬スピントロニクスについても研究が進められている。擬スピンとは任意の二準位系をスピンと同様にパウリ行列で表した自由度である。擬スピンをもつ系の代表例は原子層グラフェンであり、副格子の擬スピンやバレー擬スピンを活用する擬スピントロニクスが盛んに研究されている。擬スピントロニクスが始まる以前にも二重量子井戸という擬スピン系がすでに研究されていた。二重量子井戸は半導体量子井戸を2層積層した構造で、2つの層それぞれに局在する2状態を擬スピンと捉えることができる。

擬スピンとスピンは数学的にはパウリ行列で記述されるという共通点を持つが、制御性には顕著な違いがある。スピンは直接電氣的に制御することができないが、擬スピンは電子の電荷の自由度に対応するので直接電氣的に制御することが可能である。そこで擬スピンを通してスピンを電氣的に制御することができれば効率的なスピンの制御を実現できると期待される。そのためにはスピンと擬スピンを結合することが必要である。本研究ではスピン・擬スピン間の結合をもつ二重量子井戸を提案するとともに、その結合を通してスピンの電氣的制御が可能であることを理論的に示した。以下に本研究の成果を三項目に分けて記述する。

第一に、二重量子井戸において2つの井戸のスピン流が逆向きになるようにしてスピンと擬スピンを結合させることを提案した。この反平行スピン流はスピンとともに擬スピンを運んでいる。なぜなら2つの井戸それぞれに局在する状態を擬スピンの上向きと下向きに対応させると反平行スピン流は擬スピンの第3成分を持つからである。この反平行スピン流では擬スピンの第3成分の大きさを変えるとスピン流の大きさも同時に変化する。この機構を活用してスピン流を擬スピンを通して電氣的に制御することが本研究の提案である。さらに本研究では、この反平行スピン流を生成する方法を考案した。スピン流を生成する機構として外因性スピンホール効果の機構の一つである skew 散乱を考えた。skew 散乱は不純物由来のスピン軌道相互作用によって生じる非対称散乱で、左折と右折の確率差がスピンに依存することにより電流に垂直にスピン流が生じる。skew 散乱によるスピン流は不純物ポテンシャルが十分に弱い場合不純物ポテンシャルの3乗に比例し不純物ポテンシャルの正負でスピン流の向きが反対になる。この依存性を利用して一方の井戸に斥力ポテンシャルを持つ不純物を、もう一方の井戸に引力ポテンシャルを持つ不純物を導入することで反平行スピン流を生成することを提案した。

第二に、上記の系において直流電流によって生じるスピンホール流を擬スピンの電氣的操作により制御する方法を提案した。電場を井戸に垂直に印加することで2つの井戸の間にポテンシャル差 Δ_V を設け

ることができるが、この Δ_V は擬スピンの作用する磁場であり、二層の差で表されるので第 3 成分である。 Δ_V は擬スピンの第 3 成分の偏極を作るので反平行スピン流を強める。一方、二層間のトンネル結合 Δ_{SAS} は擬スピンの作用する磁場の第 1 成分であり、擬スピンを第 1 軸のまわりに歳差させるので擬スピンの第 3 成分とともに反平行スピン流を弱める。このように Δ_{SAS} による抑制が働いているなかで Δ_V を変化させることにより反平行スピン流を制御できることを明らかにした。また、交流電流の場合について、スピンホール流を交流振動数により制御する方法を提案した。擬スピンは Δ_{SAS} により第 1 軸のまわりに歳差しているため、この歳差の振動数に交流振動数を合わせると共鳴が起こり反平行スピン流が増大することを示した。

第三に、このように擬スピンを介したスピンホール流の電氣的制御可能性を追究する中で、二重量子井戸における擬スピンのダイナミクスを解明した。直流の場合については、スピンホール流の擬スピン成分が Hanle 効果の方程式に従うことを示し、不純物散乱が緩和項に寄与することを明らかにした。また交流の場合については、スピンホール流の擬スピン成分がサイクロトロン共鳴を記述する方程式と同じ形の方程式に従うことを示し、減衰の機構はサイクロトロン共鳴の場合と同じく不純物散乱による運動量緩和であることを明らかにした。

以下に、本論文の構成について述べる。

第 1 章では、スピントロニクスと擬スピントロニクスに関する研究背景を概説し、二重量子井戸においてスピンと擬スピンを運ぶスピン・擬スピン流という概念を導入する。

第 2 章では、系のハミルトニアンやスピン流の計算方法について述べる。スピン流の計算には半古典的な輸送方程式であるボルツマン方程式を用いるが、本研究では擬スピンのコヒーレンスを取り入れるため分布関数のサブバンド間非対角要素を考慮して分布関数の方程式を導出した。さらに分布関数を擬スピン成分に展開し、各成分が従う方程式に書き換えた。

第 3 章では、分布関数の擬スピン成分が従う方程式を解くことにより、スピン・擬スピン流の伝導率を計算した。直流でのスピン・擬スピン流については Δ_{SAS} , Δ_V , 不純物散乱による緩和時間の関数として伝導率のふるまいを明らかにした。交流でのスピン・擬スピン流については伝導率の絶対値と偏角の交流振動数依存性を明らかにした。

第 4 章では、分布関数の擬スピン成分が従う方程式からスピン・擬スピン流の運動方程式を導出した。この運動方程式から、直流でのスピン・擬スピン流のダイナミクスはスピンに対する Hanle 効果と同じ形の方程式によって記述されることを明らかにした。このスピン・擬スピン流の方程式の緩和項には、不純物散乱による緩和と擬スピンのデコヒーレンスが独立に働くことを見出した。また、交流でのスピン・擬スピン流の運動方程式は古典的なサイクロトロン共鳴の方程式と同型であることを明らかにした。サイクロトロン運動が擬スピンの歳差運動に置き換わるが、減衰はともに不純物散乱による緩和によるという共通点も見出した。

第 5 章では、スピン・擬スピン流の観測方法を示す。直流によるスピン・擬スピン流の観測については非局所電圧の測定と動的核スピン偏極の測定を提案した。交流については、反平行スピン流によるスピン蓄積の磁気光学測定を提案した。

第 6 章では、本研究をまとめ、展望と課題を示す。

目次

第 1 章	序論	7
1.1	スピントロニクスと擬スピントロニクス	7
1.1.1	スピントロニクスの概要	7
1.1.2	スピン軌道相互作用	8
1.1.3	スピン角運動量演算子	9
1.1.4	擬スピン	10
1.1.5	擬スピントロニクスの概要	10
1.1.6	スピントロニクスと擬スピントロニクスの融合	10
1.2	スピンホール効果	12
1.2.1	概要	12
1.2.2	外因性スピンホール効果	13
1.3	二重量子井戸におけるスピン・擬スピン流	13
1.4	スピン・擬スピン流の発現・消失のクロスオーバー	14
1.5	スピン・擬スピン流の交流応答	16
1.6	目的と構成	16
1.6.1	構成	16
第 2 章	モデルと計算方法	18
2.1	概要	18
2.2	ハミルトニアン	19
2.2.1	無摂動ハミルトニアン	19
2.2.2	摂動ハミルトニアン	21
2.3	Boltzmann 方程式	22
2.3.1	歳差項・衝突項	22
2.3.2	デコヒーレンス	25
2.3.3	Boltzmann 方程式	25
2.4	密度行列の解	26
2.4.1	擬スピンによる展開	26
2.4.2	電場について 0 次の項	28
2.4.3	電場について 1 次の項	29
第 3 章	結果	31
3.1	概要	31

3.2	スピン・擬スピン流の伝導率	31
3.2.1	スピン・擬スピン流の定義	31
3.2.2	エネルギースケールについての仮定	32
3.2.3	スピン・擬スピン流の伝導率の解析式	32
3.3	直流電場について	33
3.3.1	$\omega_V = 0, \tau_{ps}^{-1} = 0$ の場合	33
3.3.2	$\omega_V = 0, \tau_{ps}^{-1} \neq 0$ の場合	34
3.3.3	$\omega_V \neq 0, \tau_{ps}^{-1} = 0$ の場合	35
3.3.4	$\omega_V \neq 0, \tau_{ps}^{-1} \neq 0$ の場合	36
3.4	交流電場について	36
3.4.1	$\omega_V = 0, \tau_{ps}^{-1} = 0$ の場合	37
3.4.2	$\omega_V = 0, \tau_{ps}^{-1} \neq 0$ の場合	38
3.4.3	$\omega_V \neq 0, \tau_{ps}^{-1} = 0$ の場合	38
第 4 章	スピン・擬スピン流の運動方程式	44
4.1	スピン・擬スピン流の運動方程式	44
4.1.1	直流電場の場合：Hanle 効果	45
4.1.2	交流電場の場合：サイクロトロン共鳴	47
第 5 章	スピン・擬スピン流の実験的観測方法	49
5.1	直流でのスピン・擬スピン流の発現・消失のクロスオーバー	49
5.2	交流でのスピン・擬スピン流の共鳴	50
第 6 章	結論と展望・課題	52
6.1	結論	52
6.2	今後の課題と展望	53
6.2.1	今後の課題	53
6.2.2	今後の展望	53
付録 A	密度行列	55
A.1	概要	55
A.2	1 電子系	55
A.3	多電子系	56
A.4	相互作用のない多電子系	57
A.5	遷移確率	58
A.5.1	相互作用表示	58
A.5.2	時間発展演算子の級数展開	58
A.5.3	T 行列	59
A.5.4	単位時間当たりの遷移確率	60
A.6	密度行列の運動方程式	60
A.7	分布関数の時間変化と遷移確率	61

付録 B	グラフェンのバレースピン	63
B.1	ハニカム格子系の電子状態	63
付録 C	有効質量近似	66
C.1	概要	66
C.2	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動	66
C.3	Kane 模型	68
C.4	Rashba スピン軌道相互作用	69
C.5	Rashba スピン軌道相互作用がある二次元電子系の固有状態	71
付録 D	Boltzmann 方程式と電気伝導度	73
D.1	概要	73
D.2	Boltzmann 方程式	73
D.2.1	波束の運動	73
D.2.2	Boltzmann 方程式	74
D.2.3	緩和時間近似	74
D.3	電子系の電気伝導	75
D.4	緩和時間近似をこえて	76
付録 E	スピンホール効果	77
E.1	概要	77
E.2	外因性スピンホール効果	77
E.2.1	Boltzmann 方程式	77
E.3	内因性スピンホール効果	80
付録 F	磁場中における 2 次元電子系	82
F.1	概要	82
F.2	古典論	82
F.2.1	サイクロトロン運動	82
F.2.2	サイクロトロン共鳴	83
F.2.3	Hall 効果	83
F.3	Landau 量子化	84
F.3.1	ハミルトニアン	84
F.3.2	電場が存在する場合の議論	86
F.3.3	状態密度	87
F.4	整数量子 Hall 効果	87
F.5	分数量子ホール効果	90
F.6	二層系の擬スピンを考慮した研究	90
付録 G	衝突項の計算	92
G.1	$J_{\mathbf{k}\sigma}^n(t)$ の導出	92
G.2	$J_{\mathbf{k}\sigma}^1(t)$ の計算	93

G.3	$J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t)$ の計算	94
G.4	$J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t)$ の計算	95

第 1 章

序論

この章ではまず、本研究の背景であるスピントロニクスと擬スピントロニクスについて簡単にまとめ、本研究の動機について述べる。本研究は、半導体二重量子井戸の左の層と右の層に、それぞれ逆符号のポテンシャルを持つ不純物をドーピングした系を考える。井戸面内に電場を印加すると、不純物由来のスピノ軌道相互作用によって、左の層と右の層で逆向きにスピノ流が生じる。反平行に流れるスピノ流は、左右の井戸の基底状態を用いて定義される二層の擬スピノを運ぶ流れと見なすことができる。これを本論文ではスピノ・擬スピノ流と呼び、そのダイナミクスについて研究を行なった。その後、計算する物理量と生じる現象について簡単に述べる。最後に、本研究の目的と構成を述べる。

1.1 スピントロニクスと擬スピントロニクス

1.1.1 スピントロニクスの概要

近年、電子が持つ電荷の自由度とスピノの自由度を同時に利用し、新奇現象の開拓やデバイスへの工学的な応用を図ろうとする分野が盛んに研究されている。このような新しいエレクトロニクスのことをスピントロニクスと呼び、金属や半導体を舞台に盛んに研究が行われている [1]。歴史的にはスピントロニクスの研究が脚光を浴びたのは巨大磁気抵抗効果の発見 [2, 3]、トンネル磁気抵抗効果の発見 [4] であり、これらは直ちに磁気センサーなどの応用に結びついた。今日ではさらに研究が進み、磁気ランダムアクセスメモリなど、スピノの流れを素子に電氣的に注入することで情報の書き込みを行うデバイスの提案などが

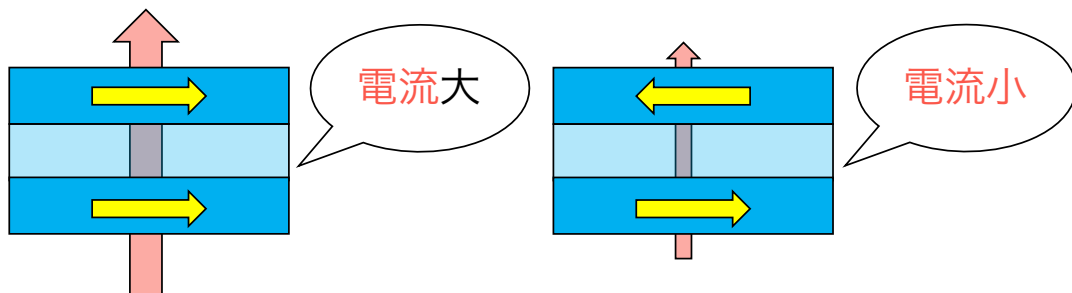


図 1.1: 磁気ランダムアクセスメモリの概念図。強磁性体の磁化の向きで電流の ON/OFF の状態が変化する。

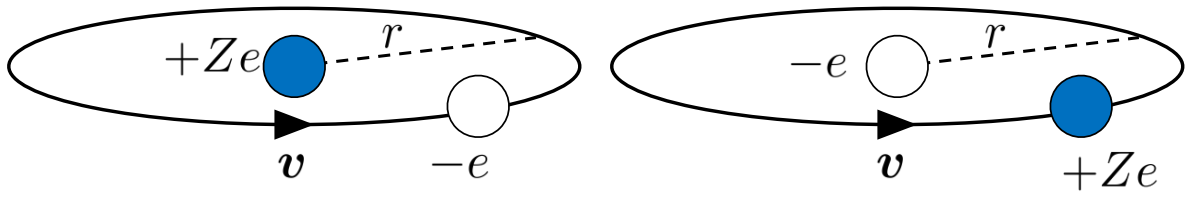


図 1.2: 古典的なスピン軌道相互作用の導出．左が原子核が静止した座標系で描いたもので，右が電子が静止した座標系で描いたもの．

行われている．磁気ランダムアクセスメモリは，強磁性体/絶縁体/強磁性体の三層構造のセルからなる素子を多数並べて配置したものである（図 1.1）．各素子の強磁性体のスピンの平行/反平行により，各素子の電気抵抗の値が大きく変化する．この効果を利用して，電気抵抗が小さい素子を“1”，抵抗が大きい素子を“0”に対応させて，1 ビットの情報を書き込むことが可能になる．また，半導体デバイスとしての応用例としてスピン FET がある．ソースとドレイン端子に強磁性体を接合させ，ソース側からスピン偏極した電流を 2 次元電子系に注入するとき，2 次元電子系中の電子スピンの向きをゲート電極によって制御することにより，ドレイン側の強磁性体の磁化の向きと同じ向きのスピンをもつ電子のみを選択的に透過させることができるというデバイスである．

このようなデバイスの提案には，磁化の自由度を利用するため，強磁性体金属が主に用いられてきた．しかしこれまでに培ってきた集積技術や微細加工の技術を利用できることを考えると，非磁性半導体におけるスピントロニクス分野で将来的に大きな応用の可能性が考えられる．このような物質においてスピントロニクスの研究を行うためには，スピン偏極を物質中に作り出すことが必要になる．非磁性体でスピン偏極を作り出す現象として，Edelstein によって理論的に提案された電流誘起スピン偏極 [5] や，現象の予言自体は古くから知られていたスピンホール効果がある．これらの現象で重要な相互作用がスピン軌道相互作用である．

1.1.2 スピン軌道相互作用

本来，スピン軌道相互作用は相対論的量子力学の取り扱いから生じる相互作用である．しかしここでは理解しやすい原子でのスピン軌道相互作用について古典的な描像を紹介する．質量 m ，電荷 $-e$ ($e > 0$) をもつ電子が電荷 Ze の原子核から距離 r の位置を速度 $\mathbf{v}$ で円運動しているとする（図 1.2）．電子とともに動く座標系から見ると，電荷 Ze の原子核が速度 $\mathbf{v}$ で円運動していると考えることができる．この円運動している原子核が電子の位置に作る磁場は，ビオ・サバールの法則から

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0 Ze}{4\pi} \frac{\hbar \mathbf{l}}{mr^3} \quad (1.1)$$

で与えられる．ここで μ_0 は真空の透磁率^{*1}であり，また $\hbar \mathbf{l} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v}$ は古典的な軌道角運動量である．この磁場と電子スピン $\mathbf{s}$ の間の Zeeman 相互作用によるエネルギー E_{SOI} は

$$\begin{aligned} E_{\text{SOI}} &\propto \mathbf{B} \cdot \mathbf{s}, \\ &= \frac{\mu_0 Ze}{4\pi} \frac{\hbar}{mr^3} \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}. \end{aligned} \quad (1.2)$$

^{*1} 本論文では，一貫して SI 単位系を考える．

これがスピン軌道相互作用によるエネルギーと理解される．相対論的量子力学によれば正しいスピン軌道相互作用 H_{SOI} は

$$H_{\text{SOI}} = \frac{\mu_0 Z e}{4\pi} \frac{\hbar}{2mr^3} \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \quad (1.3)$$

と与えられる．式 (1.3) をクーロン力による電場 $\mathbf{E}$ で書き直すと

$$H_{\text{SOI}} = \frac{-e\hbar}{2mc^2} \mathbf{s} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{E}). \quad (1.4)$$

c は光速， $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ は運動量である．電場 $\mathbf{E}$ を静電ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ の勾配で表せば

$$H_{\text{SOI}} = \frac{\hbar}{2mc^2} \mathbf{s} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla V(\mathbf{r})). \quad (1.5)$$

また， $\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ として

$$\begin{aligned} H_{\text{SOI}} &= \frac{\hbar^2}{4mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla V(\mathbf{r})), \\ &= \frac{\eta}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla V(\mathbf{r})) \end{aligned} \quad (1.6)$$

ここで $\eta = \frac{\hbar^3}{4mc^2}$ である．一般にポテンシャル $V(\mathbf{r})$ が与えられた場合のスピン軌道相互作用も式 (1.6) と同じ形で与えられる．半導体中の伝導電子に働くスピン軌道相互作用についての導出は付録 C に与えた．いずれにしろ，電子スピンが運動量 $\mathbf{p}$ とポテンシャルの勾配 ∇V の外積に比例する有効磁場を感じる効果がスピン軌道相互作用である．スピン軌道相互作用は真空中においても働く相互作用であるが，物質中のスピン軌道相互作用は系の構造を工夫することによって，真空中の値に比べて桁違いに大きくなることもあり，実際に非磁性体を組み合わせた量子井戸構造においてもスピン偏極が実験的に観測されている．

1.1.3 スピン角運動量演算子

量子力学では古典系とは異なり，物理量は一つの数値をとる変数ではなく，例えば演算子などで表される．前節で古典的に導入した電子スピンも量子力学では演算子として定義される．ここでスピン角運動量演算子についての定義を簡潔に述べる．スピン角運動量演算子 $\hat{s}_i$ は，次の交換関係を満たす演算子として定義される．

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{s}_k. \quad (1.7)$$

ここで ϵ_{ijk} は $(ijk) = (123)$ の偶置換の場合 1，奇置換の場合 -1 ，それ以外は 0 をとる記号である．スピン演算子は $\hat{s}_i$ は $\hat{s}^2 \equiv \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + \hat{s}_3^2$ と交換するので同時固有状態を持つ．通常 $\hat{s}^2$ と $\hat{s}_3$ の同時固有状態を考え，これを $|s, m_s\rangle$ と表すと

$$\begin{aligned} \hat{s}^2 |s, m_s\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle, \\ \hat{s}_3 |s, m_s\rangle &= \hbar m_s |s, m_s\rangle \end{aligned} \quad (1.8)$$

という関係がある．ここで電子スピンの場合は $s = \frac{1}{2}$ ， $m_s = \pm \frac{1}{2}$ であり，量子数 s は省略して記すことが多く，本論文の以下の記述もそれに倣う．ここで $|m_s = \frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle$ ， $|m_s = -\frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle$ と表記し，さらに $\hat{s}_i = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i$ を満たす演算子としてパウリ行列 $\hat{\sigma}_i$ を導入する．パウリ行列は， $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ を用いて

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_1 &= |\uparrow\rangle \langle \downarrow| + |\downarrow\rangle \langle \uparrow|, \\ \hat{\sigma}_2 &= -i |\uparrow\rangle \langle \downarrow| + i |\downarrow\rangle \langle \uparrow|, \\ \hat{\sigma}_3 &= |\uparrow\rangle \langle \uparrow| - |\downarrow\rangle \langle \downarrow| \end{aligned} \quad (1.9)$$

と表すことができる。

1.1.4 擬スピン

式 (1.9) のパウリ行列は z 成分を対角化する基底を用いて構成されているが、一般にこの基底は任意の状態でもよい。今、状態 $|+\rangle$ と $|-\rangle$ で構成される二準位系のハミルトニアンを H とする。状態 $|\pm\rangle$ に対するエネルギー固有値を $\pm\delta$ とすると、シュレーディンガー方程式は

$$H|\pm\rangle = \pm\delta|\pm\rangle \quad (1.10)$$

となる（複合同順）。今、状態 $|\pm\rangle$ を基底にして、次のようにパウリ行列を構成することができる。

$$\begin{aligned} \hat{\tau}_1 &= |+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|, \\ \hat{\tau}_2 &= -i|+\rangle\langle-| + i|-\rangle\langle+|, \\ \hat{\tau}_3 &= |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| \end{aligned} \quad (1.11)$$

式 1.11 で定義されたパウリ行列は状態 $|\pm\rangle$ で張られる空間においてスピン角運動量演算子のように振る舞う。そこで、任意の二準位系に対する演算子をスピン角運動量と同様に記述したものを擬スピンと呼ぶ。

1.1.5 擬スピントロニクスの概要

近年、擬スピンを利用して新奇現象の探索・工学的な応用を目指す、擬スピントロニクスという研究分野が発達してきている [6]。擬スピンは任意の二準位系において定義できるが、特に精力的に研究されている系がグラフェンに代表される原子層物質系である（図 1.3）。

以下、グラフェンにおける擬スピンについて述べ、擬スピントロニクスの代表的な研究分野であるバレートロニクスについて簡潔に述べる。グラフェンの電子状態の詳細については付録 B において述べた。

グラフェンは一つの炭素原子から 3 つの sp^2 軌道間の σ 結合と、1 つの p_z 軌道間の π 結合からなっている。 σ 結合は炭素原子が存在する平面でハニカム格子を作り、 π 結合はその平面に垂直に存在している。ハニカム格子の単位胞の中には 2 つの炭素原子が存在し、その炭素原子を A サイト、B サイトと呼ぶ。電子が A サイトに存在するか、B サイトに存在するかという自由度は擬スピンとして扱える。

また、グラフェンの分散関係は K 点と K' 点で厳密に接していて、その近傍では分散関係が円錐状になる。これをディラックコーンと呼ぶ。また、この谷になったバンド下端のことをバレーと呼ぶ。従ってグラフェンでは K バレーと K' バレーの二つのバレーがあることになる。電子がどちらのバレー近傍に所属しているかを表す自由度として、バレー自由度が定義される。このバレー自由度もまた擬スピンの一例であり、バレー自由度に由来する擬スピンの角運動量に注目した研究領域はバレートロニクスと呼ばれ、擬スピントロニクスの中でも特に活発に研究が行われている（包括的な報告がたとえば [6] にある）。

1.1.6 スピントロニクスと擬スピントロニクスの融合

スピントロニクスおよび擬スピントロニクスの研究はそれぞれ盛んに行われている。しかしそれらを同時に扱った研究、特に擬スピンとスピンの間のカップリングを通じてスピン偏極や擬スピン偏極を電氣的に制御しようとする研究は基礎研究の段階にある。例えば擬スピントロニクスにおいて最も精力的に研究が行われているグラフェンではスピン軌道相互作用が小さく、スピンに依存した現象を観測することが難しい。

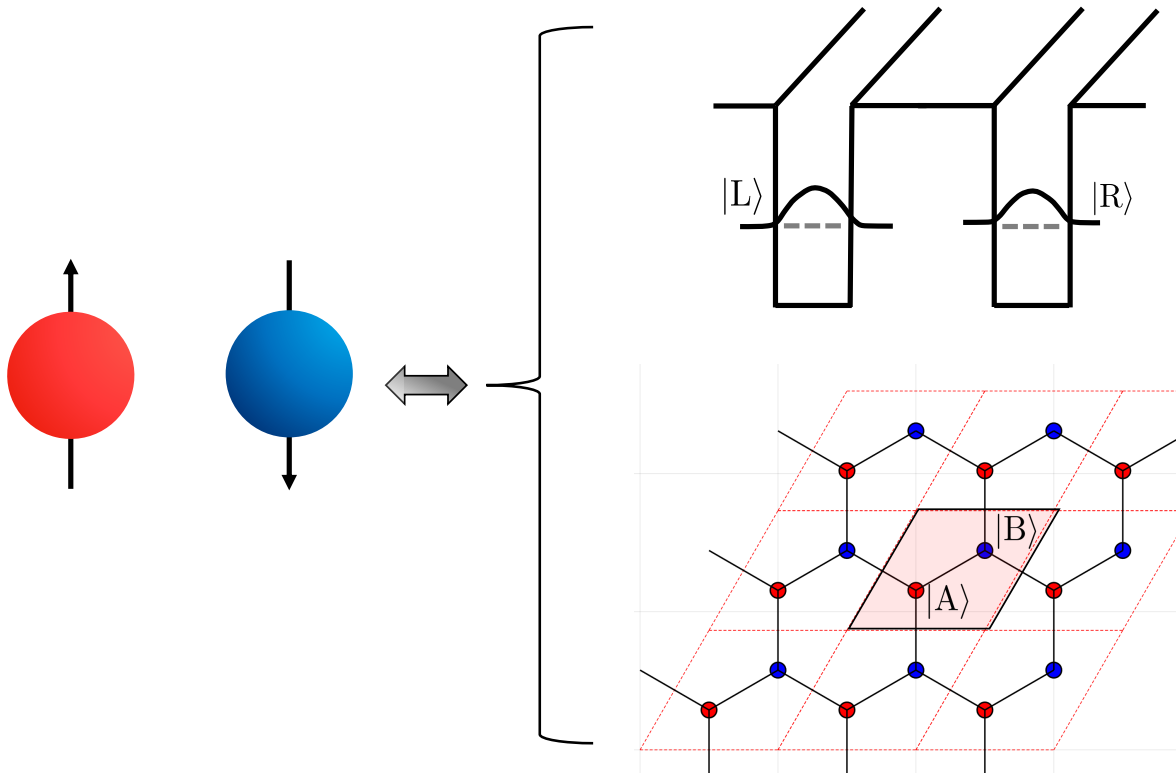


図 1.3: 擬スピンの概念図. 量子力学における任意の二準位系は, 準位を構成する二つの状態を基底にして, スピンと同様にパウリ行列を構成できる. Bilayer の例は, 二重量子井戸の各井戸に局在した状態 $|L\rangle$, $|R\rangle$ を擬スピンと見なした場合を表している. 原子層物質グラフェンの例では, 単位胞 (右下の赤い網掛け部分) 中の二つの原子 $|A\rangle$, $|B\rangle$ に強く束縛された状態を擬スピンとみなすことができる. また, 波数空間ではバレー擬スピンという擬スピンも存在する.

このような問題を解決するために, 例えばシリコン原子の原子層物質であるシリセンなどで研究が行われている. シリセンはシリコンの原子層物質であり, グラフェンを構成する炭素原子と比較すると, 原子番号が大きく, スピン軌道相互作用は大きくなる. また, ハニカム格子の物質ではあるが, バックル構造を持っているため原子層面に垂直な方向に電場を印加することでスピン軌道相互作用の大きさを制御することができ, これに伴いエネルギー分散関係も変化する. 電場の大きさを大きくするにつれて, シリセンは絶縁体から金属, そして再び絶縁体へと相転移することが知られていて, この事情を反映し, 光吸収におけるバレー選択則に特異な振る舞いが見られることが理論的に予言されている [7]. しかしこれらの先駆的な研究も実際のデバイスへの応用にはまだ結びついておらず, 基礎研究の段階にある.

スピンと擬スピンの結合しているような物理量は, どちらかの自由度を制御することでもう一方の自由度も同時に制御することができる. このうちスピンを制御するためには, 古くから磁場が用いられてきた. しかし磁場を印加すると系の時間反転対称性が破られてしまうため, 電場による制御を行う方が望ましい. 一方擬スピンは系のパラメータや電場によって制御できる擬スピン自由度を系に付与することが容易なため, 擬スピン自由度に働きかけることによりスピン偏極やスピン流の大きさを電氣的に制御できる可能性がある.

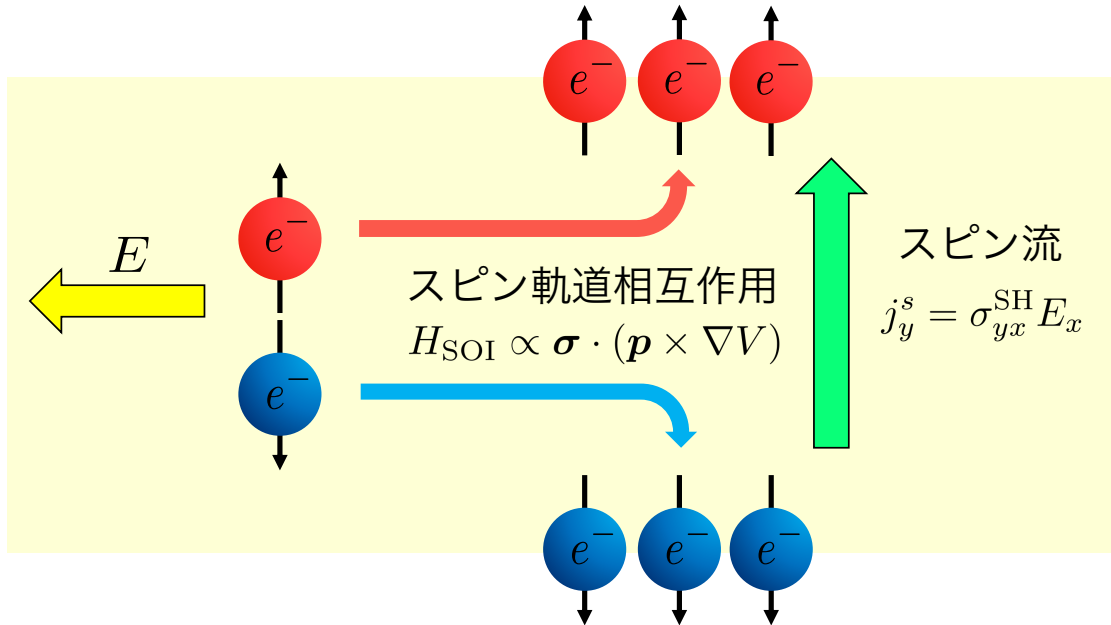


図 1.4: 外因性スピントラ効果の概念図。試料中に電場を印加し、電子を駆動する。電子は、試料中の不純物により散乱を受けるが、不純物由来のスピントラ相互作用がはたらき、電子スピンの向きによって、散乱方向が異なる。これによって、印加した電場と垂直方向に、スピントラ（スピントラ流）が生じる。

1.2 スピントラ効果

1.2.1 概要

非磁性体中にスピントラ、およびスピントラ偏極生成する方法として知られている代表的な現象の一つに、スピントラ効果がある [8, 9, 10] (図 1.4)。物質に電場を印加し電子を駆動すると、物質中のスピントラ相互作用によって電場と垂直な方向に純粋スピントラが生じる。発生したスピントラが試料端に到達すると、スピントラ蓄積が生じる。この現象は磁場中で試料に電場を印加すると試料の端に電荷の蓄積が生じるホール効果とよく似ているため、スピントラ効果と名付けられた。しかしスピントラ効果の原因は物質中のスピントラ相互作用であり、磁場や磁化がなくても生じることがホール効果と異なる点である。スピントラ効果は現象の予言自体は古くから理論的に提案がなされていたが [11, 12]、微細加工の技術が発展していなかったことと、そもそも現象の重要性そのものがあまり認識されていなかった。しかし 21 世紀に入り半導体中の多バンド効果に由来するスピントラ効果の理論的発見、そして実験技術の発展により光学的にスピントラ効果に由来するスピントラ偏極が実験的に観測されるようになり、スピントラ効果はスピントロニクスの研究の中でも重要な役割を果たすようになった [1]。

スピントラ効果は、スピントラ相互作用が系の不純物に由来する外因性機構のもの [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17] と多バンド効果に由来する内因性機構のもの [18, 19] に大別される。理論的研究が先行している中、二十世紀に入ると外因性スピントラ効果に由来すると考えられるスピントラ偏極の実験的観測がなされた [20, 21, 22, 23, 24]。次いで、内因性スピントラ効果に由来するスピントラ偏極の実験的観測が行われた [25]。本研究では、外因性スピントラ効果によるスピントラを考える。

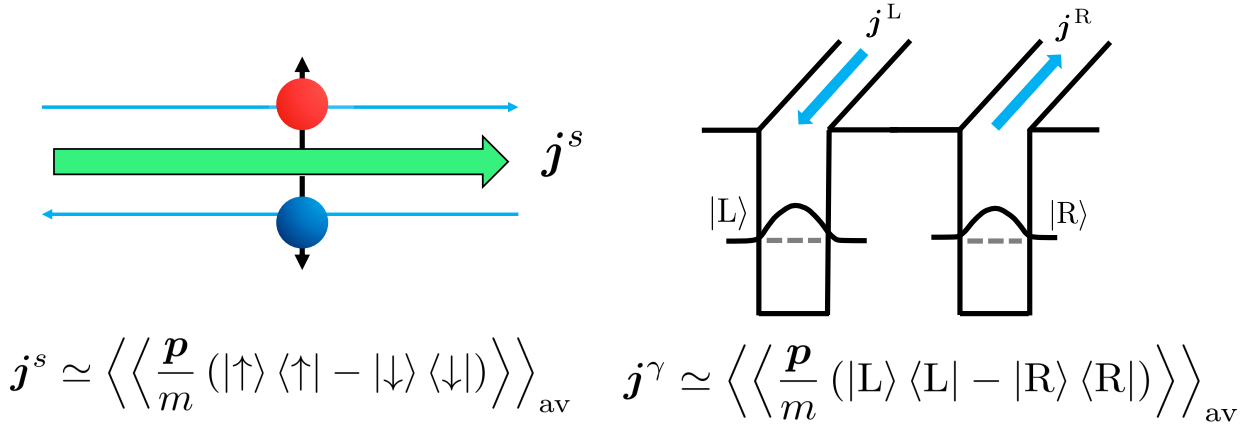


図 1.5: スピン流と擬スピン流の概念図. スピン流は, 右に走るスピナップの電子の流れと, 左に走るスピンドウンの電子の流れの差で定義される. 同様に擬スピン流も, 擬スピンのアップに対応する電子の流れと擬スピンのダウンに対応する電子の流れの差で定義できる. この二つを同時に考えることで, 例えば擬スピンを運ぶ電子の流れをスピン流に置き換えることで, スピンと擬スピンを同時に運ぶ流れであるスピン・擬スピン流を定義することができる.

1.2.2 外因性スピンホール効果

外因性スピンホール効果の機構は2つあり, それぞれ skew 散乱 [26, 27, 28] と side jump [29, 30, 31, 32] と呼ばれる. これらは強磁性体中における異常ホール効果の研究でも, 不純物との衝突によって異常ホール効果の機構として知られている [33, 34]. skew 散乱と side jump のどちらの機構が支配的になるかは, 系の不純物濃度によって決まっており, 不純物濃度が大きくなるにつれて, side jump の効果が支配的になることが知られている. 本研究では, 運動量緩和時間が長い, skew 散乱が支配的な系を考え, side jump の効果は無視する. skew 散乱はスピン軌道相互作用について1次, 不純物ポテンシャルについて3次の効果が最低次の効果であり, 本研究では最低次の効果を考える. 付録 E 節において, 単一量子井戸系を想定して skew 散乱と side jump 両方の寄与を考えた時のスピンホール伝導率の計算を掲載した.

1.3 二重量子井戸におけるスピン・擬スピン流

本研究では, 二重量子井戸の左の井戸と右の井戸にそれぞれ逆符号の不純物をドーピングする系を考える. このような系は井戸層が GaAs の場合不純物として Si と Be を選べばよく, 実際にこのような構造が作成されている [35]. skew 散乱によるスピン流は不純物ポテンシャルの3次の効果であるため, 今の系では, 左の層と右の層で skew 散乱によるスピンホール流が2次元電子系面内で逆向きに流れる [16, 36]. ここで左の層のスピン流 j^{sL} と右の層のスピン流 j^{sR} の差 $j^{sL} - j^{sR}$ は, スピンと同時に擬スピンを運んでいる流れであると見なすことができる. これはスピン流 j^s が上向きスピンの流れと下向きスピンの流れの差 $j^\uparrow - j^\downarrow$ で定義されるように, 左の層の流れと右の層の流れの差 $j^L - j^R$ は, 基底 $|L\rangle$, $|R\rangle$ によって定義される擬スピンを運ぶ流れであるとみなせるためである (図 1.5). ここで $|L\rangle$, $|R\rangle$ はそれぞれ左の層と右の層における z 方向の基底状態である. 2次元電子系が2枚ある時, それぞれの電子系に局在した状態を擬スピンと捉える研究は既に行われている [6, 37, 38] が, この擬スピンとスピンを同時に

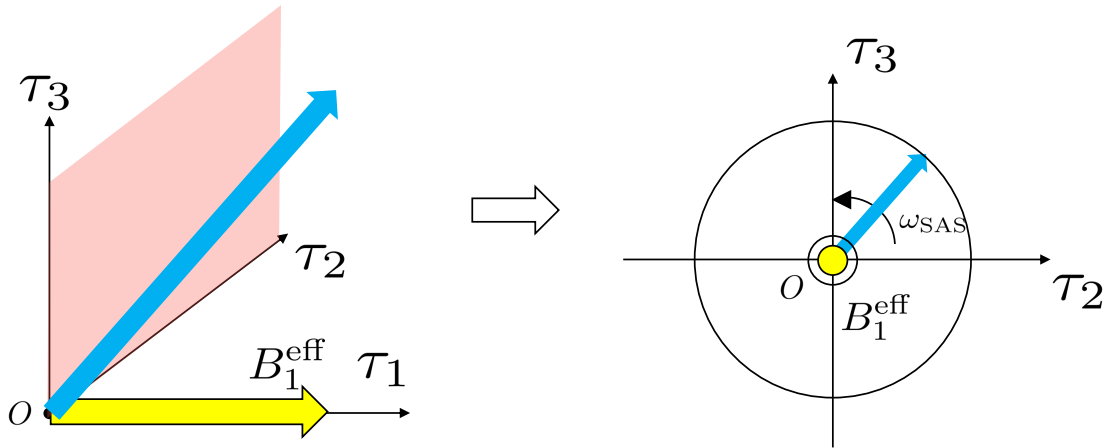


図 1.6: 擬スピン空間における歳差運動. 図では, τ_1 方向に印加された擬磁場の周りに擬スピンの歳差運動を描いている. 後に見るように, $|L\rangle, |R\rangle$ を基底とする空間では, Δ_{SAS} のハミルトニアンは実際に τ_1 方向に印加された擬磁場とみなすことができる.

扱った輸送現象の研究はされていなかった. 本研究で定義するスピン・擬スピン流は, スピンと擬スピンを同時に運ぶ流れであるため, 擬スピンの運動を電氣的に制御することによりスピン流の大きさを変化させることができる可能性を示唆している.

1.4 スピン・擬スピン流の発現・消失のクロスオーバー

二重量子井戸の左右の層にそれぞれ逆符号のポテンシャルを持つ不純物をドーブし, skew 散乱によるスピン流を逆向きに生じさせる. 左の層のスピン流と右の層のスピン流の差は擬スピンを運ぶ流れになるが, この流れの大きさを考える際は, 二層が結合しているか否かが重要になる. 左の層と右の層が空間的に近く, 二層が結合している時は井戸の成長方向の状態は対称状態 $|G\rangle$ と反対称状態 $|E\rangle$ を形成する. 二層の結合の強さは, 対称状態と反対称状態の間のエネルギー差 Δ_{SAS} で記述される. さらに, Δ_{SAS} を振動数に換算して $\Delta_{\text{SAS}} = \hbar\omega_{\text{SAS}}$ となるような振動数 ω_{SAS} を導入する. このようにすると, 二層の結合は振動数 ω_{SAS} による擬スピンの歳差運動と捉えることができる (図 1.6). 左の層と右の層が空間的に遠く二層が結合していない時は, 片方の層で他方の層の効果を感じることなく, それぞれの層でスピン流が流れている. しかし二層が結合しているときは電子が二層を歳差運動することで, 各層においてもスピン流が流れなくなる (図 1.7). すなわち, 今の系においては skew 散乱によるスピンホール効果でスピン・擬スピン流が“生成”され, また電子が ω_{SAS} の振動数で二層を“歳差”することによって, スピン・擬スピン流の消失が生じ, スピン・擬スピン流が発現している状態から消失している状態へクロスオーバーが起きる (図 1.8). しかし, $\Delta_{\text{SAS}} = \hbar\omega_{\text{SAS}}$ がどのような値の時にこのクロスオーバーが生じるかが明らかになっていない.

二層系における研究は量子 Hall 効果の分野で精力的に行われてきた. この詳細は付録 F で述べるが, 二層系では一層系では生じなかった, 分数量子 Hall 効果が生じる相と生じない相の間で相転移が起き, その境界が Δ_{SAS} の大きさによって決まっている. 分数量子 Hall 効果は多体の相互作用によって生じる. 多体の相互作用の代表的なものが電子間相互作用である. 二重量子井戸系では, 同じ層面内の電子との電

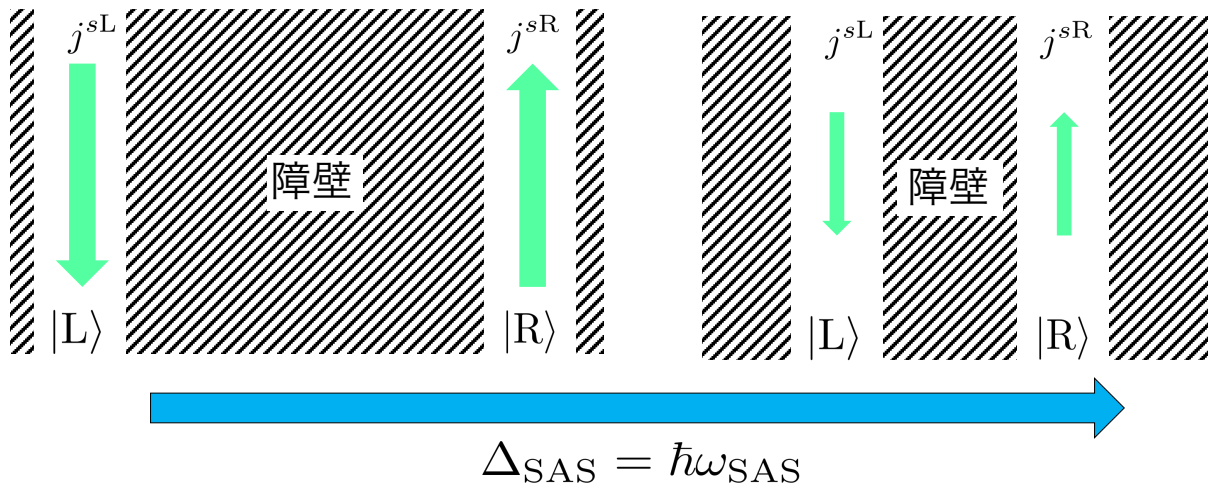


図 1.7: 実空間におけるスピン・擬スピン流のクロスオーバーの概念図. 二層間の障壁が厚く結合が弱い場合, 二層は独立した単独の層と近似でき, それぞれの層でスピン流が流れる. しかし二層間の障壁が薄く結合が強い場合, 逆向きに流れるスピン流が混合し, スピン流の大きさはそれぞれの層においても小さくなり, 結合が強い極限では流れなくなる.

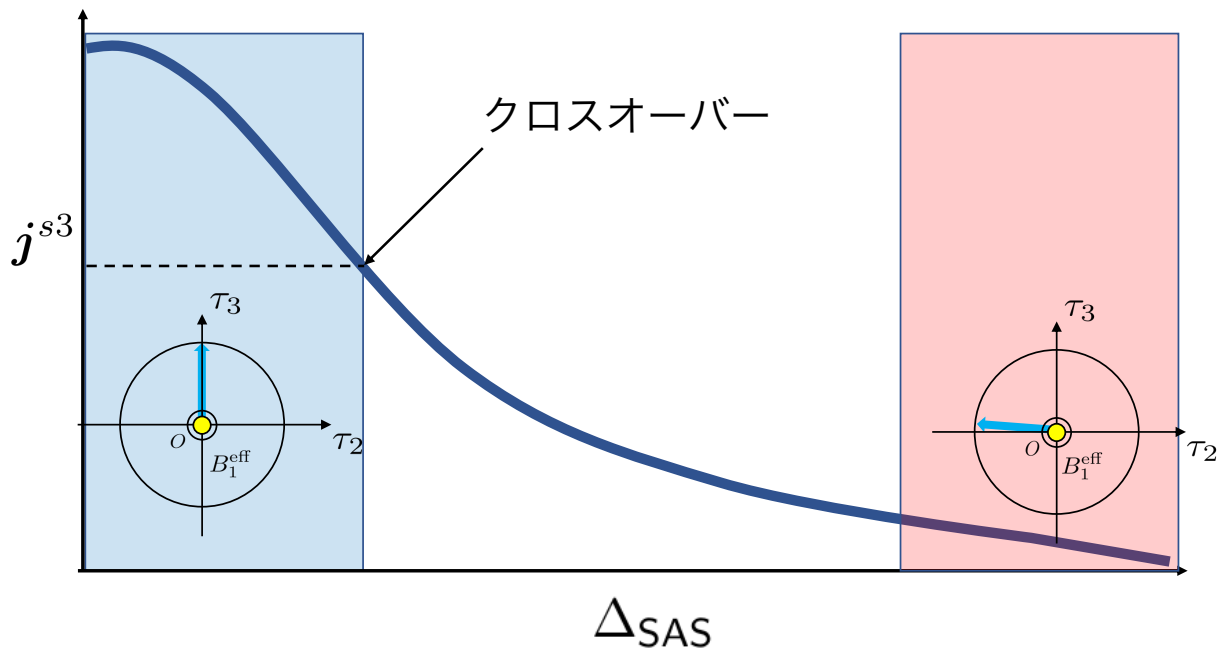


図 1.8: スピン・擬スピン流のクロスオーバーの模式図. Δ_{SAS} が小さく二層の結合が弱い場合は, 左の層のスピン流 j^{sL} と右の層のスピン流 j^{sR} はゼロでない値を持つが, Δ_{SAS} が大きく二層の結合が強い場合は $j^{sL} - j^{sR} = j^{s3}$ はゼロに漸近していく. このクロスオーバーが起きる時の Δ_{SAS} が何によって決まっているかが不明である.

子間相互作用のほかに、他の層の電子との電子間相互作用が存在する。 Δ_{SAS} を変化させると量子 Hall 効果を起こす状態と起こさない状態の間で相転移が生じる。このように、 Δ_{SAS} を変化させることで現象の発現・消失が移り変わる場合、どのような値でその移り変わりが起こるかを突き止められれば、 Δ_{SAS} がこの系においてどのような役割をしているかが明確になる。本研究は一体問題のため相転移は生じないが、代わりに現象のクロスオーバーが生じる。例えばこのクロスオーバーが Δ_{SAS} と温度のエネルギー $k_B T$ が釣り合った時に生じたとすると、このクロスオーバーは対称状態と反対称状態の電子数の変化によってクロスオーバーが生じていることを意味する。

本研究では、 Δ_{SAS} を変化させることで、二層が結合しておらず反平行のスピン流が流れる場合から、二層が結合しスピン流が消失する場合へのクロスオーバーを理論的に調べ、このクロスオーバーにおける Δ_{SAS} の役割を明らかにする。これが本論文の目的の一つである。本研究では、時間スケールの候補として、不純物散乱から生じる運動量緩和時間、skew 散乱による時定数の他に、有限温度における擬スピンのデコヒーレンス時間 τ_{ps} を考える。また、不純物散乱における準位幅の効果は考えない。

1.5 スピン・擬スピン流の交流応答

次に、電子を駆動する電場を振動数 ω の交流電場にした場合を考える。今、系には固有の振動数 ω_{SAS} が存在するため、 ω と ω_{SAS} が特定の関係を満たした時にスピン・擬スピン流は電場と共鳴し、スピン・擬スピン流の大きさがピークを持つ場合があると期待される (図 1.9)。しかし今の場合、スピン流と擬スピン流の大きさがピークを持つことが直感的に明らかであるが、偏角の振る舞いに関しては予測ができない。

また、一口に共鳴が起きるといっても、共鳴のタイプには例えば力学的共鳴や強磁性共鳴など、いくつか種類があり、どのようなタイプの共鳴なのかが不明である。共鳴のタイプを決定するためには、スピン・擬スピン流の大きさを求めるだけでなく、スピン・擬スピン流の運動方程式を導く必要がある。

1.6 目的と構成

以上より、本論文ではスピン・擬スピン流のダイナミクスを、印加する電場が直流の場合と交流の場合の二つの状況で考える。直流電場を印加した場合の結果は交流電場を印加した場合の結果において $\omega \rightarrow 0$ の極限を取ることによって得ることができるため、理論的にはスピン・擬スピン流を交流電場を印加した場合について計算する。

直流電場を印加した時、二重量子井戸に形成される二枚の 2 次元電子系に逆向きに流れる反平行スピンホール流について、 Δ_{SAS} を変化させた時に生じる発現・消失のクロスオーバーについて理論的に調べ、このクロスオーバーが生じる時の Δ_{SAS} が何によって決まっているかを明らかにする。

また、交流電場を印加した時は、スピン・擬スピン流の大きさについて共鳴によるピークが生じることを確認し、さらに偏角の ω 依存性を求める。さらにスピン・擬スピン流の運動方程式を求め、この共鳴のタイプを同定する。

1.6.1 構成

この論文の構成を述べる。

2 章ではモデルと計算方法について説明する。まずモデルハミルトニアンを提示する。無摂動部分の固

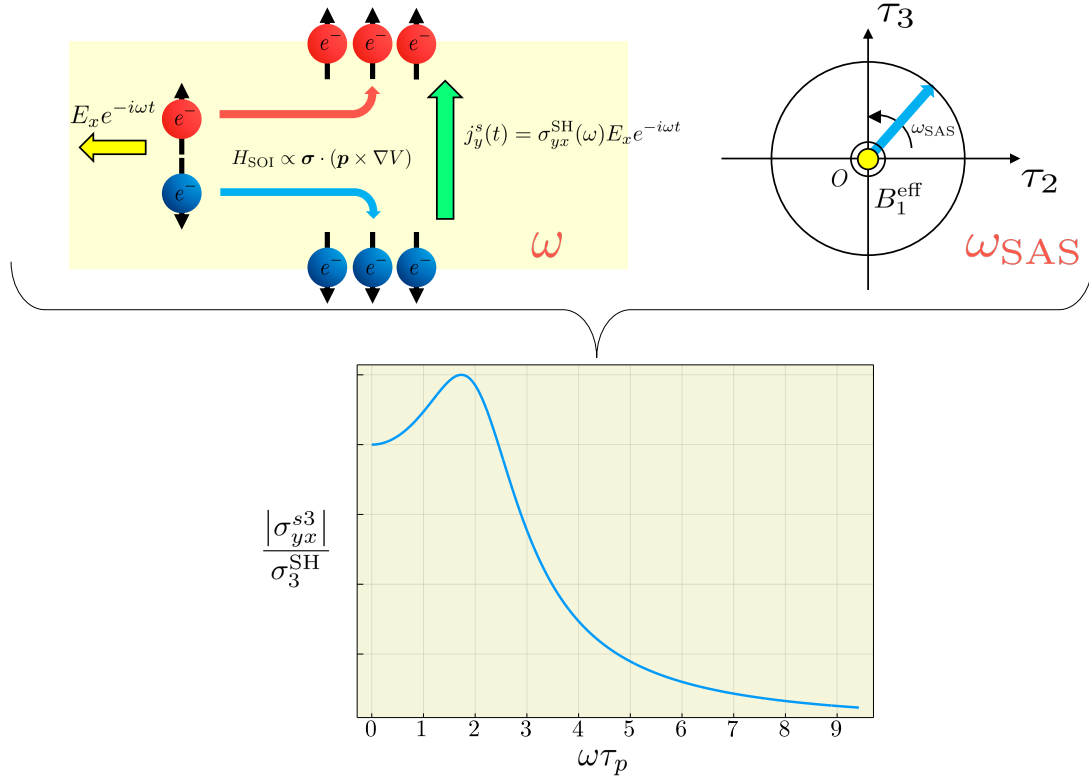


図 1.9: スピン・擬スピン流の共鳴の模式図．系には固有の角振動数 ω_{SAS} が存在し，左右の井戸を歳差運動している．外場 $\mathbf{E}e^{-i\omega t}$ の振動数 ω がこの歳差のタイミングに合うと，スピン流が電場と共鳴し大きくなる．

有状態を擬スピンを用いて表示し，さらに不純物に由来する摂動について幾つかの仮定をする．本論文ではスピン・擬スピン流を半古典的な輸送方程式である Boltzmann 方程式を用いて計算する．しかし今の系は擬スピンのコヒーレンスがあるため，これを考慮するために密度行列の運動方程式から Boltzmann 方程式を導出した．

3 章ではスピン・擬スピン流を数学的に定式化し，この大きさを計算する．時定数として ω_{SAS} ， ω や不純物との衝突による緩和時間，擬スピンのデコヒーレンス時間が存在するが，実験と比較しやすいように井戸の成長方向に電場を印加することで得られるポテンシャルオフセット $\hbar\omega_V$ を導入し，この振動数 ω_V による依存性も考える．

4 章ではスピン・擬スピン流の運動方程式，5 章では実験的観測方法について議論する．スピン・擬スピン流の運動方程式はスピンの分野でよく知られている Bloch 方程式と同じ形に帰着した．ここから直流電場の場合は Hanle 効果が生じることを導いた．また交流電場の場合，運動方程式が古典的なサイクロトロン共鳴の方程式と一致することを導き，共鳴のタイプを明らかにした．また，直流電場の場合と交流電場の場合それぞれについて，実験的観測方法について述べた．直流電場の場合は，“H バー”系を用いた実験方法と，動的核スピン偏極（DNP）を用いた実験方法について述べ，またクロスオーバーを確認する方法についても議論した．交流電場の場合，磁気光学 Kerr 効果を利用した実験方法を提案した．

6 章では本研究の結論を再度述べ，最後に今後の課題と展望について述べる．

第 2 章

モデルと計算方法

2.1 概要

本研究の系は、 xy 平面に並進対称性のある二重量子井戸構造である。電子の運動は有効質量近似が有効な範囲内を考え、 z 方向の運動は左右の井戸の最低エネルギー状態である $|L\rangle$ と $|R\rangle$ を用いて擬スピンとして記述する（図 2.1）。

スピン流は Boltzmann 方程式を用いて計算する。しかし本研究では擬スピンの非対角要素も考慮するため、密度行列を用いて Boltzmann 方程式を導出した。導出された Boltzmann 方程式を擬スピンの展開し、各擬スピン成分について解析的に解を求めた。

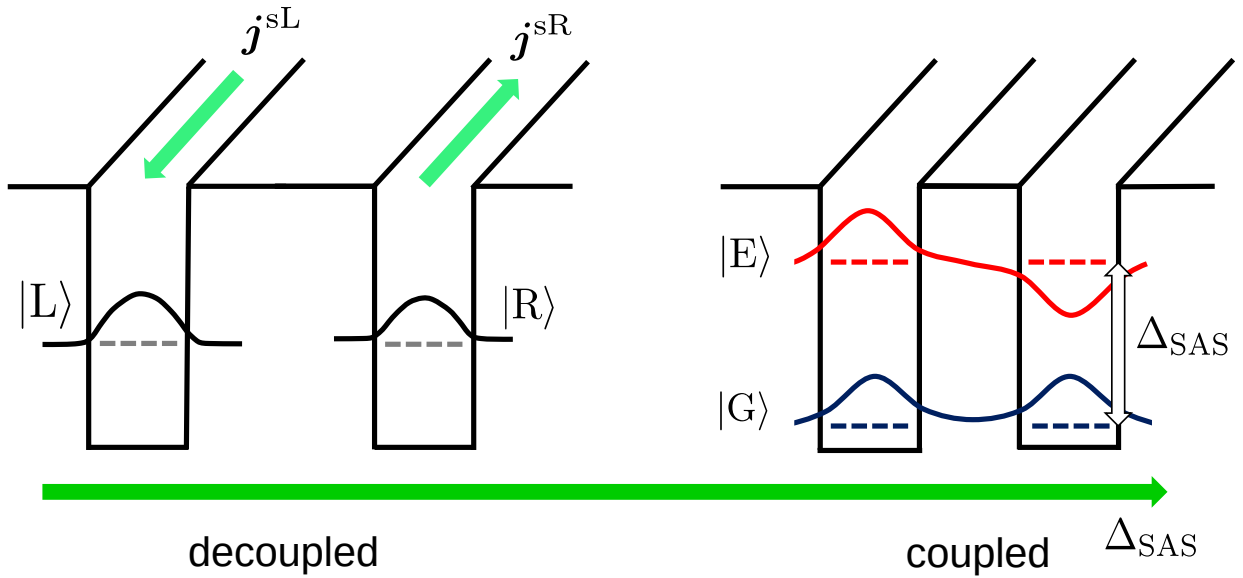


図 2.1: 結合、及び分離した二重量子井戸の構造。二層が結合しているとき、結合状態（対称状態）は $|G\rangle$ 、反結合状態（反対称状態）は $|E\rangle$ で表す。二層が分離しているとき、左右の井戸の最低エネルギーの状態をそれぞれ $|L\rangle$ と $|R\rangle$ で表す。 $|G\rangle$ と $|E\rangle$ の間のエネルギー差 Δ_{SAS} は、 $|L\rangle$ と $|R\rangle$ の結合の強さを表す。二層が分離しているとき、左右の井戸には逆向きにスピン流が流れているとする（ $j^{sL} = -j^{sR}$ ）。これは、一方の層には引力ポテンシャルとしてはたらく不純物をドーピングし、他方の層には斥力ポテンシャルとしてはたらく不純物をドーピングし、外因性スピンホール効果の原因の一つである skew 散乱によるスピン流を考えればよい。図は文献 [39] から転載した。

2.2 ハミルトニアン

2.2.1 無摂動ハミルトニアン

ハミルトニアンは、無摂動のハミルトニアン H_w と、摂動ポテンシャル V の和で表す。

$$H = H_w + V, \quad (2.1)$$

ここで H_w は面内の運動を記述する $H_{\parallel}$ と、層間の飛び移りを表す $H_{\perp}$ の和で表される。

$$H_w = H_{\parallel} + H_{\perp}. \quad (2.2)$$

また、 $H_{\parallel}$ は次のように表される。

$$H_{\parallel} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m}, \quad (2.3)$$

ここで $\hat{\mathbf{p}} = [\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z]$ は運動量演算子であり、 m は伝導体の電子の有効質量である。 $H_{\parallel}$ の固有状態を $|\mathbf{k}\rangle$ 、および固有エネルギーを ε_k とすると、以下の式を満たす。

$$H_{\parallel} |\mathbf{k}\rangle = \varepsilon_k |\mathbf{k}\rangle, \quad (2.4)$$

ここで固有エネルギー ε_k は

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.5)$$

である。 $\mathbf{k} = [k_x, k_y]$ は2次元電子系面内の波数であり、 $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ はその大きさである。固有状態 $|\mathbf{k}\rangle$ は、面内の運動量演算子 $\hat{p}_x$ と $\hat{p}_y$ の同時固有状態であり、

$$\hat{p}_x |\mathbf{k}\rangle = \hbar k_x |\mathbf{k}\rangle, \quad \hat{p}_y |\mathbf{k}\rangle = \hbar k_y |\mathbf{k}\rangle. \quad (2.6)$$

を満たす。

層間の飛び移りを表す $H_{\perp}$ は次のように与えられる。

$$H_{\perp} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + V_{\text{well}}(z), \quad (2.7)$$

ここで $V_{\text{well}}(z)$ は井戸を構成する物質によるバンド・オフセット、ゲート電圧、不純物ドーピングによって生まれた電荷、及び井戸内の電子間相互作用をハートリー近似した結果の、二重量子井戸のポテンシャルである。本研究では外因性スピンホール効果の寄与のみを考えるため、 $V_{\text{well}}(z)$ によるスピン軌道相互作用 [40, 41, 42] と Dresselhaus 型のスピン軌道相互作用 [43, 44] は考えない。ここで z 方向の運動を、左右の井戸の基底状態 $|L\rangle$ と $|R\rangle$ の線型結合によって表す。ここで、 $|L\rangle$ と $|R\rangle$ を用いて、擬スピン $\hat{\tau}_\gamma$ ($\gamma = 1, 2, 3$) と単位行列 $\hat{\tau}_0$ を、次のように定義する。

$$\begin{aligned} \hat{\tau}_0 &= |L\rangle \langle L| + |R\rangle \langle R|, \\ \hat{\tau}_1 &= |R\rangle \langle L| + |L\rangle \langle R|, \\ \hat{\tau}_2 &= i |R\rangle \langle L| - i |L\rangle \langle R|, \\ \hat{\tau}_3 &= |L\rangle \langle L| - |R\rangle \langle R|. \end{aligned} \quad (2.8)$$

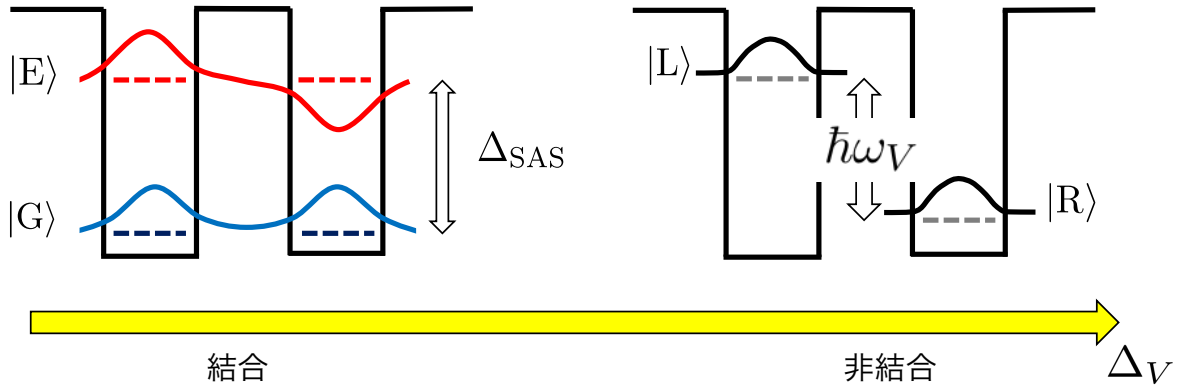


図 2.2: バンドオフセット $\Delta_V = \hbar\omega_V$ の概念図. $\hbar\omega_V = 0$ の時結合していた状態は, $\hbar\omega_V \neq 0$ とすると非結合状態になる. ハミルトニアンから, バンドオフセット $\hbar\omega_V$ を表すハミルトニアンは, 擬スピン空間における τ_3 方向の擬磁場とみなすことができる.

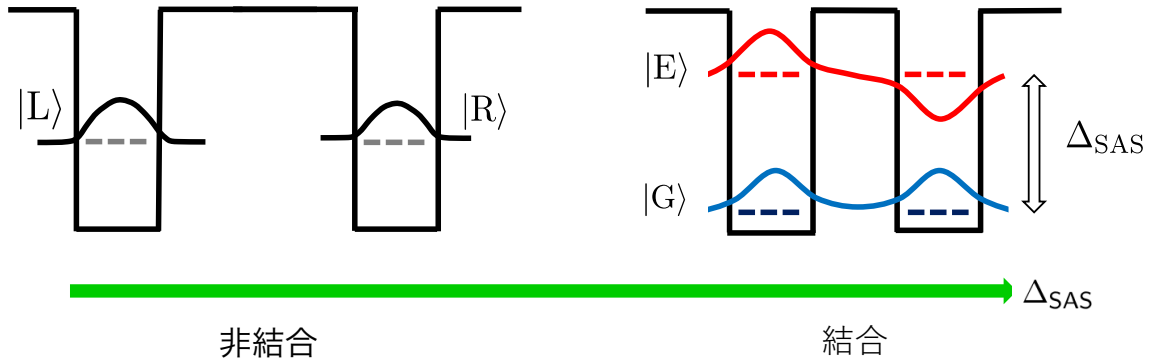


図 2.3: 二層の結合が弱い場合 (Δ_{SAS} が小さい場合), 二層は空間的に離れており, $|L\rangle$, $|R\rangle$ で表される片方の層にいる電子は, 他方の層に遷移する確率が小さくなる. 二層の結合が強い場合 (Δ_{SAS} が大きい場合), 二層は空間的に近接しており, $|G\rangle$, $|E\rangle$ で表される固有状態は二層に跨った形で形成される.

この擬スピンを用いて, $H_\perp$ を次のように表記する.

$$H_\perp = -\frac{\hbar\omega_{SAS}}{2}\hat{\tau}_1 + \frac{\hbar\omega_V}{2}\hat{\tau}_3 \quad (2.9)$$

ここで $\omega_{SAS} = \Delta_{SAS}/\hbar$ と $\omega_V = \Delta_V/\hbar$ はそれぞれ, 層間のトンネリングと二つの井戸のポテンシャル差を表している (図 2.2). $\omega_{SAS} > 0$ と選ぶと, $(|L\rangle + |R\rangle)/\sqrt{2}$ が $\omega_V = 0$ における基底状態になる. 基底状態, 及び励起状態は, 井戸の結合状態 (対称状態), 反結合状態 (非対称状態) であり, それぞれ $|G\rangle$ と $|E\rangle$ で表す (図 2.3).

$|G\rangle$ と $|E\rangle$ は $H_\perp$ の固有状態であり, その固有方程式は次の通り.

$$H_\perp |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle, \quad (n = G, E), \quad (2.10)$$

ここで

$$\varepsilon_G = -\frac{1}{2}\hbar\omega_1, \quad \varepsilon_E = \frac{1}{2}\hbar\omega_1 \quad (2.11)$$

であり, ω_1 は

$$\omega_1 = \sqrt{\omega_{\text{SAS}}^2 + \omega_V^2} \quad (2.12)$$

である.

スピンに関する状態は, スピン演算子 $\hat{\sigma}_z$ の固有状態 $|\sigma\rangle$ をスピンの基底に取る.

$$\hat{\sigma}_z |\sigma\rangle = \sigma |\sigma\rangle \quad (\sigma = \pm 1). \quad (2.13)$$

以上より, H_w の固有エネルギー ε_{nk} は次の式を満たす.

$$H_w |nk\sigma\rangle = \varepsilon_{nk} |nk\sigma\rangle, \quad (2.14)$$

ここで

$$\varepsilon_{nk} = \varepsilon_n + \varepsilon_k. \quad (2.15)$$

である.

2.2.2 摂動ハミルトニアン

摂動 V は, 不純物ポテンシャル $V_{\text{imp}}(\mathbf{r})$ と不純物由来のスピン軌道相互作用 $H_{\text{imp}}^{\text{so}}$ の和で表す.

$$V = V_{\text{imp}}(\mathbf{r}) + H_{\text{imp}}^{\text{so}}, \quad H_{\text{imp}}^{\text{so}} = -\frac{\eta}{\hbar} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\nabla V_{\text{imp}} \times \hat{\mathbf{p}}), \quad (2.16)$$

ここで $\mathbf{r} = [x, y, z]$ は座標であり, また η は伝導帯の電子に働くスピン軌道相互作用の結合定数である. ここで不純物ポテンシャルについて, 次のような仮定をする.

$$V_{\text{imp}}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N u_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (2.17)$$

N は不純物の総数であり, $\mathbf{r}_i = [x_i, y_i, z_i]$ は i 番目の不純物の位置を表す. u_i は i 番目の不純物のポテンシャルであり, z_i が左側の井戸にあれば引力型 (ポテンシャルの符号は負), 右側の井戸にあれば斥力型のポテンシャル (ポテンシャルの符号は正) と仮定する. 例えば GaAs 系では, 井戸層の Ga を Si に置換することで, Si 原子が引力ポテンシャルを持つ不純物になる. また同様に, Ga を Be に置換することで Be が斥力ポテンシャルを持つ不純物になる. これらの構造は半導体量子井戸系において実際に実験的作成がなされている [35].

$$\begin{aligned} u_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) &= u_L(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) < 0 \quad z_i \text{ in L}, \\ u_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) &= u_R(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) > 0 \quad z_i \text{ in R}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

不純物ポテンシャルはそれぞれ遮蔽されたクーロンポテンシャルで記述される [15]. この場合, $|u_L(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)| = |u_R(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|$ であると近似的に見なすことができる. さらに本研究では, 不純物ポテンシャルによって井戸間を遷移する散乱が生じないと仮定する. すなわち

$$u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = |L\rangle \langle L| u_L(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) |L\rangle \langle L| + |R\rangle \langle R| u_R(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) |R\rangle \langle R| \quad (2.19)$$

と不純物ポテンシャルの行列要素を仮定する．この条件は、 $\langle R|z\rangle \times \langle z|L\rangle$ が無視できない領域において、不純物ポテンシャルの大きさを $u_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = 0$ と設定すれば満たされる．このように設定すると、 i 番目の不純物のポテンシャルについて、次の式を得る．

$$\langle L|u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|L\rangle \langle R|u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|R\rangle = 0. \quad (2.20)$$

2.3 Boltzmann 方程式

本研究ではスピン軌道相互作用について 1 次までの効果を考える．skew 散乱によるスピン流を考える場合、スピン反転を起こす $\hat{\sigma}_x$ や $\hat{\sigma}_y$ の項はスピン軌道相互作用について高次の効果になるため無視できる．

スピン流の計算は、半古典的な輸送方程式である Boltzmann 方程式によって行う．本研究では擬スピンのコヒーレンスを取り入れるため、密度行列の運動方程式から Boltzmann 方程式を導出した．ここで本論文で用いられる密度行列については、付録 A にまとめている．まず、密度行列を用いて次の量を定義する．

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma} = \langle \mathbf{k}\sigma | \hat{\rho} | \mathbf{k}\sigma \rangle. \quad (2.21)$$

これは波数 $\mathbf{k}$ 、スピン σ の電子の分布関数と見なせるため、以降、この量を分布関数と呼ぶ．ただし、式 (2.21) は擬スピンについては演算子である．

振動数 ω の交流電場を印加した時の分布関数 $\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}$ の時間発展方程式は、以下の Boltzmann 方程式で表される．

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial \mathbf{k}} = \left(\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_{\text{p+c}} + \left(\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_{\text{d}}. \quad (2.22)$$

左辺は分布関数の時間変化と、外場によって駆動される効果を表している． $\mathbf{F} = (-e)\mathbf{E}e^{-i\omega t}$ であり、また $\mathbf{E} = [E_x, E_y, 0]$ は xy 平面に印可した電場の大きさである． $\omega \rightarrow 0$ の極限を取ることで直流電場が印加された状況を表す．また、電子の電荷は $-e$ ($e > 0$) として表している．右辺第一項は擬スピンの歳差項と不純物との衝突項であり、右辺第二項は擬スピンのデコヒーレンスの項を表す．次に、これらの項の詳細について述べる．

2.3.1 歳差項・衝突項

歳差項と衝突項は、密度行列の運動方程式である、量子リウヴィル方程式（フォン・ノイマン方程式）から現れる．量子リウヴィル方程式は次の通り．

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H, \hat{\rho}]. \quad (2.23)$$

(2.23) を状態 $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ で期待値を取り計算を進めると、最終的に

$$\frac{d\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{dt} = \left(\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_{\text{p}} + \left(\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_{\text{c}}. \quad (2.24)$$

が導かれる*1．右辺初項を歳差項、右辺第二項を衝突項と呼び、次にこれらの導出について述べる．

*1 擬スピンに対しては演算子のままである．本研究では擬スピンについて非対角成分を考える．

Boltzmann 方程式の右辺を計算するために、演算子を相互作用表示に書き直す。

$$\hat{\rho}_I(t) = U^\dagger(t) \hat{\rho}(t) U(t), \quad V_I(t) = U^\dagger(t) V(t) U(t). \quad (2.25)$$

ここで、 $U(t)$ は相互作用表示における時間発展演算子で、無摂動ハミルトニアン H_w を用いて

$$U(t) = \exp\left(\frac{1}{i\hbar} H_w t\right), \quad (2.26)$$

と定義される。

相互作用表示を用いると、式 (2.23) は、摂動ポテンシャルによる時間発展方程式として、次のように表せる。

$$\frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [V_I, \hat{\rho}_I(t)]. \quad (2.27)$$

時刻 t_0 に摂動 V が印可されたとき、十分時間が経過したときの時刻 t における密度行列を求める。(2.27) を時刻 t_0 から時刻 t まで積分すると

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' [V_I(t'), \hat{\rho}_I(t')]. \quad (2.28)$$

式 (G.6) の左辺で $t \rightarrow t'$ と置き換え、右辺の $\hat{\rho}_I(t')$ に代入すると

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' [V_I(t'), \hat{\rho}_I(t_0)] + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' [V_I(t'), [V_I(t''), \rho_I(t'')]]. \quad (2.29)$$

摂動 V について 3 次までの効果を考え、次の式を得る。

$$\frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} = J_1(t, t_0) + J_2(t, t_0) + J_3(t, t_0). \quad (2.30)$$

ここで $J_1(t, t_0)$, $J_2(t, t_0)$, $J_3(t, t_0)$ は次のように定義される。

$$\begin{aligned} J_1(t, t_0) &= \frac{1}{i\hbar} [V_I(t), \hat{\rho}_I(t_0)], \\ J_2(t, t_0) &= \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' [V_I(t), [V_I(t'), \hat{\rho}_I(t_0)]], \\ J_3(t, t_0) &= \frac{1}{(i\hbar)^3} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' [V_I(t), [V_I(t'), [V_I(t''), \hat{\rho}_I(t_0)]]]. \end{aligned} \quad (2.31)$$

衝突項の計算では、後に定義される散乱の代表的な緩和時間である運動量緩和時間 τ_p と衝突過程の時間スケールを τ_{coll} を比較して $\tau_{\text{coll}} \ll \tau_p$ であるため、式 (G.9) 中の $\rho_I(t_0)$ を $\rho_I(t)$ に置き換えてよい。従って $n = 1, 2, 3$ として、 $J_n(t, t_0) = J_n(t)$ となる。これより、密度行列の運動方程式は次のようになる。

$$\frac{d\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle \mathbf{k}\sigma | [H_w, \hat{\rho}] | \mathbf{k}\sigma \rangle + J_{\mathbf{k}\sigma}^1(t) + J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) + J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t). \quad (2.32)$$

ここで

$$J_{\mathbf{k}\sigma}^n(t) = \langle \mathbf{k}\sigma | U(t) J_n(t) U^\dagger(t) | \mathbf{k}\sigma \rangle, \quad (n = 1, 2, 3). \quad (2.33)$$

であり、摂動 V の行列要素は次のようになる。

$$\langle \ell \mathbf{k}' \sigma | V | \ell \mathbf{k} \sigma \rangle = [1 - i\eta \sigma(\mathbf{k}' \times \mathbf{k})_z] \langle \ell \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k} \rangle. \quad (2.34)$$

ここで、 $(\mathbf{k}' \times \mathbf{k})_z \equiv k'_x k_y - k'_y k_x$ である。 $J_n(t)$ の行列要素は、 $\langle \ell \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k} \rangle$ の積となる。式 (2.33) の計算を行う際、不純物ポテンシャルによって井戸間を飛び移る散乱が生じないとする仮定 (2.19) に加え、衝突項の内部では Δ_{SAS} を無視できるという仮定をする。これはすなわち、 Δ_{SAS} と V_{imp} が結合する運動を無視することを意味する。擬スピンにおけるこれらの仮定は、スピンに対して、Dyakonov-Perel がスピン緩和の研究において課した仮定と同様のものになっている [44, 45, 46]。衝突項の内部で Δ_{SAS} を無視するという仮定は $\omega_{\text{SAS}} \tau_{\text{coll}} \ll 1$ ならば満たされる。本研究では、 $\omega_{\text{SAS}} \tau_p \sim 1$ 付近のクロスオーバーを調べるので、 $\omega_{\text{SAS}} \tau_{\text{coll}} \ll 1$ という条件は、 $\tau_{\text{coll}} \ll \tau_p$ ということになる。これは、不純物ポテンシャルの有効範囲と、フェルミ波長が、 $v_F \tau_p$ よりも十分に小さければよい。ここで、 v_F はフェルミ速度である。

歳差項

歳差項は、式 (2.32) のうち、 H_w の部分である。すなわち、

$$\left(\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_p = \frac{1}{i\hbar} \langle \mathbf{k}\sigma | [H_w, \hat{\rho}] | \mathbf{k}\sigma \rangle. \quad (2.35)$$

ここで

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}\sigma | [H_w, \hat{\rho}] | \mathbf{k}\sigma \rangle &= \langle \mathbf{k}\sigma | H_w \hat{\rho} | \mathbf{k}\sigma \rangle - \langle \mathbf{k}\sigma | \hat{\rho} H_w | \mathbf{k}\sigma \rangle \\ &= \langle \mathbf{k}\sigma | H_{\perp} \hat{\rho} | \mathbf{k}\sigma \rangle - \langle \mathbf{k}\sigma | \hat{\rho} H_{\perp} | \mathbf{k}\sigma \rangle \\ &= H_{\perp} \langle \mathbf{k}\sigma | \hat{\rho} | \mathbf{k}\sigma \rangle - \langle \mathbf{k}\sigma | \hat{\rho} | \mathbf{k}\sigma \rangle H_{\perp} \\ &= [H_{\perp}, \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}] \end{aligned} \quad (2.36)$$

である。ここで $|\mathbf{k}\rangle$ が $H_{\parallel}$ の固有状態であることを用いた。

衝突項

衝突項は、式 (2.32) のうち、 $J_{\mathbf{k}\sigma}^n$ の部分である。ここで本研究における輸送現象は、 xy 平面にランダムに分布した個々の不純物の配置によらないと仮定する。すなわち、不純物ポテンシャルの効果は xy 平面にランダムに分布した個々の不純物の位置についてアンサンブル平均をとったものと仮定する。ここで、物理量 $A(x_1, y_1, \dots, x_N, y_N)$ のアンサンブル平均を次のように定義する。

$$\bar{A} \equiv \frac{1}{S} \int_S \dots \frac{1}{S} \int_S A \, dx_1 dy_1 \dots dx_N dy_N. \quad (2.37)$$

ここで、 S は二層の量子井戸の面内の面積である。

不純物ポテンシャルの行列要素についてアンサンブル平均を考えると、不純物ポテンシャルの1次の効果について、

$$\overline{\langle \ell \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k} \rangle} = 0, \quad (\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}). \quad (2.38)$$

が導かれる。また、 $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ の場合は、次のように仮定する。

$$\overline{\langle \ell \mathbf{k} | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k} \rangle} = 0. \quad (2.39)$$

これは、 $V_{\text{imp}}(\mathbf{r})$ から $V_0(z) \equiv S^{-1} \int_S V_{\text{imp}}(\mathbf{r}) dx dy$ を抜き出し、 $V_0(z)$ を $V_{\text{well}}(z)$ に付け足すことで、常にこのように設定することが出来る。従って、不純物ポテンシャルについて1次の寄与は存在しない。

続いて、不純物ポテンシャルについて2次の寄与であるが、これは次のようになる。

$$\overline{\langle \ell' \mathbf{k}'' | V_{\text{imp}} | \ell' \mathbf{k}' \rangle \langle \ell \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k} \rangle} \neq 0 \quad (\ell' = \ell, \mathbf{k}'' = \mathbf{k}). \quad (2.40)$$

ここで、式 (2.20) を用いた。さらに不純物配置のアンサンブル平均について次を仮定する。

$$|\langle \mathbf{L}\mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \mathbf{L}\mathbf{k} \rangle|^2 = |\langle \mathbf{R}\mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \mathbf{R}\mathbf{k} \rangle|^2. \quad (2.41)$$

この仮定は $u_{\text{L}}(\mathbf{r}) = -u_{\text{R}}(\mathbf{r})$ である場合は正しく満たされる。またこの関係が厳密に成立していない場合であっても、左右の井戸にドープする不純物の数を調整することによって、この関係は原理的に満たすことが可能である。

最後に不純物ポテンシャルについて3次の寄与を考えると、2次の場合と同様に次のようになる。

$$\overline{\langle \ell''\mathbf{k}''' | V_{\text{imp}} | \ell''\mathbf{k}'' \rangle \langle \ell'\mathbf{k}'' | V_{\text{imp}} | \ell'\mathbf{k}' \rangle \langle \ell\mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \ell\mathbf{k} \rangle} \neq 0 \quad (\ell'' = \ell' = \ell, \mathbf{k}''' = \mathbf{k}). \quad (2.42)$$

衝突項についての計算の詳細は付録 G に記した。

2.3.2 デコヒーレンス

本研究では具体的なモデルを導入しないが、例えば格子振動（フォノン）との衝突や電子-電子散乱などに代表される非弾性散乱が生じると、一電子のエネルギーが変化するためコヒーレンスが失われる。本研究では、Boltzmann 方程式に擬スピンのコヒーレンスを考慮する。この擬スピンのデコヒーレンスについて、二準位系においてよく用いられている現象論的なモデルを導入して考慮する [47]。本研究では二層の擬スピンのデコヒーレンスによる緩和時間を τ_{ps} として、擬スピンのデコヒーレンスを次のように表す。

$$\left(\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_{\text{d}} = -\frac{1}{\tau_{\text{ps}}} (|G\rangle \langle G| \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma} |E\rangle \langle E| + |E\rangle \langle E| \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma} |G\rangle \langle G|). \quad (2.43)$$

ここで、射影演算子 $|G\rangle \langle G|$ と $|E\rangle \langle E|$ は、 $H_{\perp}$ を用いて

$$|G\rangle \langle G| = \frac{1}{2} - \frac{H_{\perp}}{\hbar\omega_1}, \quad |E\rangle \langle E| = \frac{1}{2} + \frac{H_{\perp}}{\hbar\omega_1}. \quad (2.44)$$

のように表現できる。

2.3.3 Boltzmann 方程式

式 (2.32) と (2.43) を式 (2.22) に代入して整理すると、Boltzmann 方程式は次のようになる。

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial \mathbf{k}} = \frac{1}{i\hbar} [H_{\perp}, \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}] + \hat{C}^{(2)} + \hat{C}^{(3)} + \left(\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_{\text{d}}. \quad (2.45)$$

ここで $\hat{C}^{(2)}$ 、 $\hat{C}^{(3)}$ は衝突項を不純物ポテンシャルの次数で分割したものであり、まず $\hat{C}^{(2)}$ は

$$\hat{C}^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)} (-\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma} + |L\rangle \rho_{\mathbf{k}'\sigma}^{\text{LL}} \langle L| + |R\rangle \rho_{\mathbf{k}'\sigma}^{\text{RR}} \langle R|), \quad (2.46)$$

である。ただし、 $\langle \ell | \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma} | \ell \rangle$ を $\rho_{\mathbf{k}\sigma}^{\ell\ell}$ と略記した。ここで式 (2.46) 中の $W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)}$ は不純物ポテンシャル V_{imp} について2次の範囲の遷移確率であり、次のように定義する。

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)} \equiv W_{\text{L}\mathbf{k}'\text{L}\mathbf{k}}^{(2)} = W_{\text{R}\mathbf{k}'\text{R}\mathbf{k}}^{(2)}. \quad (2.47)$$

ここで

$$W_{\text{L}\mathbf{k}'\text{L}\mathbf{k}}^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|\langle \mathbf{L}\mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \mathbf{L}\mathbf{k} \rangle|^2} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \quad (2.48)$$

である．遷移確率を計算する際に，式 (2.19) と式 (2.20) の仮定から，不純物散乱によって異なる層への遷移がないことを用いている．また，エネルギー保存に面内の運動エネルギー ε_k のみが現れる理由は，衝突項中で Δ_{SAS} や電場が不純物ポテンシャルと結合して起こる効果を見逃しているためである [46]．この仮定は，衝突の際に現れるエネルギーがフェルミエネルギーの大きさと同程度である運動エネルギーによってのみ決まっていると仮定することを意味しており，フェルミエネルギーで特徴づけられる時間は ω_{SAS}^{-1} や ω^{-1} の時間スケールよりもはるかに短い．

続いて $\hat{C}^{(3)}$ は

$$\hat{C}^{(3)} = \sum_{\mathbf{k}'} |\text{L}\rangle W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \rho_{\mathbf{k}'\sigma}^{\text{LL}} \langle \text{L}| + |\text{R}\rangle W_{R\mathbf{k}R\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \rho_{\mathbf{k}'\sigma}^{\text{RR}} \langle \text{R}|. \quad (2.49)$$

である．式 (2.49) 中の $W_{\ell\mathbf{k}\ell\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}}$ は不純物ポテンシャル V_{imp} について 3 次，かつスピン軌道相互作用について一次の遷移確率であり，skew 散乱が生じる最低次の遷移確率である．これは次のように定義される不純物ポテンシャルについて三次の遷移確率

$$W_{\ell\mathbf{k}\ell\mathbf{k}'}^{\sigma(3)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}''} \left[\frac{(\ell\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}\sigma)}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k''} + i\delta} + \text{c.c.} \right] \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k), \quad (2.50)$$

$$(\ell\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}\sigma) = \overline{\langle \ell\mathbf{k}\sigma | V | \ell\mathbf{k}'\sigma \rangle \langle \ell\mathbf{k}'\sigma | V | \ell\mathbf{k}''\sigma \rangle \langle \ell\mathbf{k}''\sigma | V | \ell\mathbf{k}\sigma \rangle}$$

のスピン軌道相互作用について一次の項まで考えた遷移確率である．ここで摂動の行列要素 $\langle \ell\mathbf{k}'\sigma | V | \ell\mathbf{k}\sigma \rangle$ は式 (2.34) で定義されている．

ここで skew 散乱に関する遷移確率を擬スピン空間で表現するために，次のような演算子を導入する．

$$\begin{aligned} \hat{W}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} &= |\text{L}\rangle W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \langle \text{L}| + |\text{R}\rangle W_{R\mathbf{k}R\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \langle \text{R}|, \\ &= W_{0\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \hat{\tau}_0 + W_{3\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \hat{\tau}_3. \end{aligned} \quad (2.51)$$

ここで

$$\begin{aligned} W_{0\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} &= \frac{W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} + W_{R\mathbf{k}R\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}}}{2}, \\ W_{3\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} &= \frac{W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} - W_{R\mathbf{k}R\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}}}{2}. \end{aligned} \quad (2.52)$$

であり，遷移確率 $W_{0\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}}$ による skew 散乱のスピン流は二層で平行に流れ，遷移確率 $W_{3\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}}$ による skew 散乱のスピン流は二層で反平行に流れる．また，一つの不純物の不純物ポテンシャルが遮蔽されたクーロンポテンシャルでよく近似できる場合， $u_{\text{L}}(\mathbf{r}) = -u_{\text{R}}(\mathbf{r})$ を満たすため $W_{0\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} = 0$ になる (図 2.4)．

2.4 密度行列の解

2.4.1 擬スピンによる展開

分布関数 $\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}$ の時間発展方程式として，Boltzmann 方程式が得られた．この方程式を解析的に解くにあたり，分布関数を擬スピンのパウリ行列で展開するという手法を用いる．スピンに依存した運動を考える際に，スピンのパウリ行列で分布関数を展開するという手法が知られており [48, 49, 50]，今の場合もこの操作を行うことによって計算の見通しが非常によくなる．分布関数 $\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}$ を擬スピンのパウリ行列で

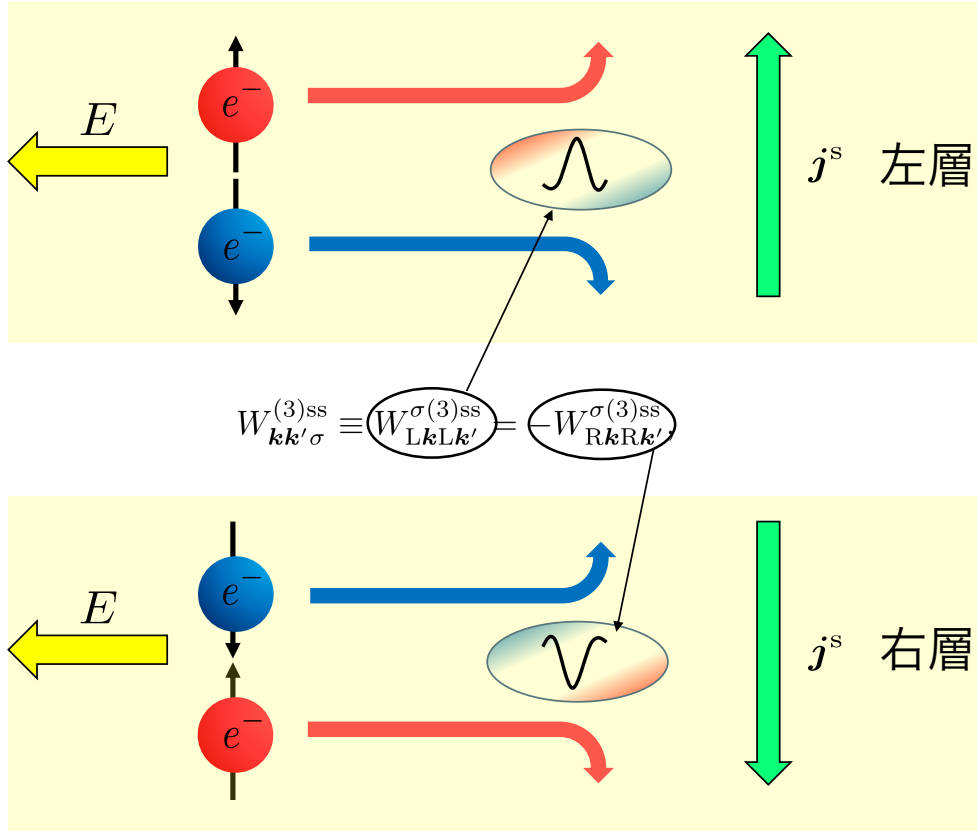


図 2.4: skew 散乱を生じさせる遷移確率の模式図．式 (2.49) はスピン軌道相互作用の一次の効果であり，上向きスピンと下向きスピンの散乱方向が異なる．これにより面内でスピン流が生じる．また $u_L(\mathbf{r}) = -u_R(\mathbf{r})$ のときは $W_{3\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)ss}$ による skew 散乱のスピン流のみが生じ，各層に流れるスピン流の向きは反平行である．

展開すると，

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{2} \sum_{\gamma=0}^3 \tau_{\gamma\mathbf{k}\sigma} \hat{\tau}_{\gamma}. \quad (2.53)$$

となる．ここで $\tau_{\gamma\mathbf{k}\sigma}$ は $\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}$ の擬スピン γ 成分の 2 倍であり，波数 $\mathbf{k}$ ，スピン σ の状態における $\hat{\tau}_{\gamma}$ の統計平均によって定義する．すなわち

$$\tau_{\gamma\mathbf{k}\sigma} = \text{tr}_{\tau} (\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{\tau}_{\gamma}) \equiv \sum_{\ell} \langle \ell | \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{\tau}_{\gamma} | \ell \rangle. \quad (2.54)$$

$\tau_{\gamma\mathbf{k}\sigma}$ を用いて Boltzmann 方程式を擬スピン成分に展開して表すと、次のようになる。

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tau_{0\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial \tau_{0\mathbf{k}\sigma}}{\partial \mathbf{k}} &= \sum_{\mathbf{k}'} \left[W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)} (-\tau_{0\mathbf{k}\sigma} + \tau_{0\mathbf{k}'\sigma}) + W_{0\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \tau_{0\mathbf{k}'\sigma} + W_{3\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \tau_{3\mathbf{k}'\sigma} \right], \\ \frac{\partial \tau_{1\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial \tau_{1\mathbf{k}\sigma}}{\partial \mathbf{k}} &= -\omega_V \tau_{2\mathbf{k}\sigma} - \tau_l^{-1} \tau_{1\mathbf{k}\sigma} + \left(\frac{\partial \tau_{1\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_d, \\ \frac{\partial \tau_{2\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial \tau_{2\mathbf{k}\sigma}}{\partial \mathbf{k}} &= \omega_{\text{SAS}} \tau_{3\mathbf{k}\sigma} + \omega_V \tau_{1\mathbf{k}\sigma} - \tau_l^{-1} \tau_{2\mathbf{k}\sigma} + \left(\frac{\partial \tau_{2\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_d, \\ \frac{\partial \tau_{3\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial \tau_{3\mathbf{k}\sigma}}{\partial \mathbf{k}} &= -\omega_{\text{SAS}} \tau_{2\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}'} \left[W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)} (-\tau_{3\mathbf{k}\sigma} + \tau_{3\mathbf{k}'\sigma}) + W_{0\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \tau_{3\mathbf{k}'\sigma} + W_{3\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \tau_{0\mathbf{k}'\sigma} \right] + \left(\frac{\partial \tau_{3\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_d.\end{aligned}\tag{2.55}$$

ここで

$$\begin{aligned}\tau_l^{-1} &\equiv \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)}, \\ \left(\frac{\partial \tau_{1\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_d &= -\tau_{\text{ps}}^{-1} (s_{\omega_V}^2 \tau_{1\mathbf{k}\sigma} + s_{\omega_V} c_{\omega_{\text{SAS}}} \tau_{3\mathbf{k}\sigma}), \\ \left(\frac{\partial \tau_{2\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_d &= -\tau_{\text{ps}}^{-1} \tau_{2\mathbf{k}\sigma}, \\ \left(\frac{\partial \tau_{3\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_d &= -\tau_{\text{ps}}^{-1} (s_{\omega_V} c_{\omega_{\text{SAS}}} \tau_{1\mathbf{k}\sigma} + c_{\omega_{\text{SAS}}}^2 \tau_{3\mathbf{k}\sigma})\end{aligned}\tag{2.56}$$

である。 τ_l は寿命と呼ぶ。 また、

$$s_{\omega_V} = \frac{\omega_V}{\omega_1}, \quad c_{\omega_{\text{SAS}}} = \frac{\omega_{\text{SAS}}}{\omega_1}, \quad s_{\omega_V}^2 + c_{\omega_{\text{SAS}}}^2 = 1\tag{2.57}$$

と定義した。

本研究では、印可する電場について、線型応答領域を扱う。したがって、分布関数は、電場について 0 次の解と 1 次の解が求まればよい。以下、それぞれの次数で解を求める。

2.4.2 電場について 0 次の項

電場について 0 次の分布関数を $\hat{\rho}^{(0)}$ と表記し、この解を次のように選ぶ。

$$\hat{\rho}^{(0)} = f_0(H_w), \quad f_0(\varepsilon) = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}.\tag{2.58}$$

ここで $f_0(\varepsilon)$ はフェルミ分布関数であり、 μ は化学ポテンシャル、 T は温度である。次に、 $\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)}$ は

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} = \sum_{n=\text{G,E}} |n\rangle f_0(\varepsilon_{nk}) \langle n|\tag{2.59}$$

と表せることに注意して、 $\tau_{\gamma\mathbf{k}\sigma}^{(0)}$ について解くと、次の式を得る。ただし、 $\tau_{\gamma\mathbf{k}\sigma}^{(0)}$ は $\hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}$ の擬スピン γ 成分の 2 倍である。

$$\begin{aligned}\tau_{0\mathbf{k}\sigma}^{(0)} &= f_0(\varepsilon_{\text{Gk}}) + f_0(\varepsilon_{\text{Ek}}), \\ \tau_{1\mathbf{k}\sigma}^{(0)} &= c_{\omega_{\text{SAS}}} [f_0(\varepsilon_{\text{Gk}}) - f_0(\varepsilon_{\text{Ek}})], \\ \tau_{2\mathbf{k}\sigma}^{(0)} &= 0, \\ \tau_{3\mathbf{k}\sigma}^{(0)} &= s_{\omega_V} [-f_0(\varepsilon_{\text{Gk}}) + f_0(\varepsilon_{\text{Ek}})].\end{aligned}\tag{2.60}$$

これが、電場について 0 次の解である。

2.4.3 電場について1次の項

Boltzmann 方程式の電場について1次の解は、 $\tau_{\gamma k\sigma}^{(0)}$ を Boltzmann 方程式の電場を含む項に代入し、他の項に $\tau_{\gamma k\sigma}^{(1)}$ と解を仮定する。 $\tau_{\gamma k\sigma}^{(1)}$ は、

$$\tau_{\gamma k\sigma}^{(1)} = \mathbf{a}_{\gamma k\sigma} \cdot \hbar \mathbf{k} e^{-i\omega t}. \quad (2.61)$$

という形の解を求める。Boltzmann 方程式を $\mathbf{a}_{\gamma k\sigma}$ を変数にして書き換えると、次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{(-e)\mathbf{E}}{m} (f'_G + f'_E) &= -(\tau_p^{-1} - i\omega) \mathbf{a}_{0k\sigma} + \sigma \mathbf{e}_z \times (\tau_{3ss}^{-1} \mathbf{a}_{3k\sigma} + \tau_{0ss}^{-1} \mathbf{a}_{0k\sigma}), \\ \frac{(-e)\mathbf{E}}{m} c_{\omega_{SAS}} (f'_G - f'_E) &= -\omega_V \mathbf{a}_{2k\sigma} - (\tau_l^{-1} - i\omega) \mathbf{a}_{1k\sigma} - \tau_{ps}^{-1} (s_{\omega_V}^2 \mathbf{a}_{1k\sigma} + s_{\omega_V} c_{\omega_{SAS}} \mathbf{a}_{3k\sigma}), \\ 0 &= \omega_{SAS} \mathbf{a}_{3k\sigma} + \omega_V \mathbf{a}_{1k\sigma} - (\tau_l^{-1} - i\omega + \tau_{ps}^{-1}) \mathbf{a}_{2k\sigma}, \\ \frac{(-e)\mathbf{E}}{m} s_{\omega_V} (-f'_G + f'_E) &= -\omega_{SAS} \mathbf{a}_{2k\sigma} - (\tau_p^{-1} - i\omega) \mathbf{a}_{3k\sigma} \\ &\quad + \sigma \mathbf{e}_z \times (\tau_{0ss}^{-1} \mathbf{a}_{3k\sigma} + \tau_{3ss}^{-1} \mathbf{a}_{0k\sigma}) - \tau_{ps}^{-1} (s_{\omega_V} c_{\omega_{SAS}} \mathbf{a}_{1k\sigma} + c_{\omega_{SAS}}^2 \mathbf{a}_{3k\sigma}). \end{aligned} \quad (2.62)$$

ここで

$$\mathbf{e}_z \times \mathbf{a} \equiv [-a_y, a_x], \quad \text{ただし } \mathbf{a} = [a_x, a_y] \quad (2.63)$$

であり、さらに

$$\begin{aligned} f'_n &\equiv \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}(\varepsilon_{nk}), \\ \tau_p^{-1} &\equiv \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)} (1 - \cos \phi), \\ \tau_{0ss}^{-1} &\equiv \sum_{\mathbf{k}'} W_{0\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{\uparrow(3)ss} \sin \phi, \\ \tau_{3ss}^{-1} &\equiv \sum_{\mathbf{k}'} W_{3\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{\uparrow(3)ss} \sin \phi \end{aligned} \quad (2.64)$$

と定義した。ここで τ_p は運動量緩和時間であり、 $\tau_{\gamma ss}(\gamma = 0, 3)$ は skew 散乱による時定数である。また ϕ は $\mathbf{k}'$ と $\mathbf{k}$ のなす角である。 τ_p^{-1} は以下では運動量緩和率と呼ぶ。以下、さらに計算の見通しをよくするために、

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_p^{-1} &\equiv \tau_p^{-1} - i\omega, \\ \tilde{\tau}_l^{-1} &\equiv \tau_l^{-1} - i\omega \end{aligned} \quad (2.65)$$

を定義する。

$\mathbf{a}_{\gamma k\sigma}$ をスピン軌道相互作用について0次の項 $\mathbf{a}_{\gamma k\sigma}^{[0]}$ と1次の項 $\mathbf{a}_{\gamma k\sigma}^{[1]}$ 次のように分割する。

$$\mathbf{a}_{\gamma k\sigma} = \mathbf{a}_{\gamma k\sigma}^{[0]} + \mathbf{a}_{\gamma k\sigma}^{[1]}. \quad (2.66)$$

これらの解は、擬スピン成分 $\gamma = 0, 3$ に対して、次のようになる。

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_{0k\sigma}^{[0]} &= -(f'_G + f'_E) \frac{\tilde{\tau}_p(-e)\mathbf{E}}{m}, \\
\mathbf{a}_{3k\sigma}^{[0]} &= \frac{(\tilde{\gamma}_k + 1)s_{\omega_V}}{\tilde{\gamma}_k \tilde{\tau}_p \tilde{\tau}_l^{-1} + 1} (f'_G - f'_E) \frac{\tilde{\tau}_p(-e)\mathbf{E}}{m}, \\
\mathbf{a}_{0k\sigma}^{[1]} &= \sigma(\mathbf{e}_z \times (-e)\mathbf{E}) [\tilde{g}_{3k}(\tilde{\gamma}_k + 1)s_{\omega_V} (f'_G - f'_E) - \tilde{g}_{0k}(\tilde{\gamma}_k \tilde{\tau}_p \tilde{\tau}_l^{-1} + 1)(f'_G + f'_E)], \\
\mathbf{a}_{3k\sigma}^{[1]} &= \sigma(\mathbf{e}_z \times (-e)\mathbf{E}) \left[\tilde{g}_{0k} \frac{\tilde{\gamma}_k + 1}{\tilde{\gamma}_k \tilde{\tau}_p \tilde{\tau}_l^{-1} + 1} s_{\omega_V} (f'_G - f'_E) - \tilde{g}_{3k} (f'_G + f'_E) \right].
\end{aligned} \tag{2.67}$$

ここで、 $\tilde{\varphi}_{l\varphi} = \tilde{\tau}_l^{-1} + \tau_{\text{ps}}^{-1}$, $\tilde{\varphi}_{l\varphi}^s = \tilde{\tau}_l^{-1} + \tau_{\text{ps}}^{-1}s_{\omega_V}^2$ として

$$\tilde{g}_{\gamma k} = \frac{1}{\tilde{\gamma}_k \tilde{\tau}_p \tilde{\tau}_l^{-1} + 1} \frac{\tilde{\tau}_p^2}{m\tau_{\gamma\text{ss}}}, \quad \tilde{\gamma}_k = \frac{\omega_{\text{SAS}}^2 + \tilde{\varphi}_{l\varphi} \tau_{\text{ps}}^{-1} c_{\omega_{\text{SAS}}}^2}{\tilde{\varphi}_{l\varphi} \tilde{\varphi}_{l\varphi}^s + \omega_V^2}. \tag{2.68}$$

である。擬スピン成分 $\gamma = 1, 2$ の解は、 $\mathbf{a}_{3k\sigma}$ を用いて表すことができ、

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_{1k\sigma} &= \frac{\tilde{\alpha}_1}{\tilde{\beta}} \mathbf{a}_{3k\sigma} - \frac{\tau_p^{-1} \tilde{\varphi}_{l\varphi} c_{\omega_{\text{SAS}}}}{\tilde{\beta}} (f'_G - f'_E) \frac{\tilde{\tau}_p(-e)\mathbf{E}}{m}, \\
\mathbf{a}_{2k\sigma} &= \frac{\tilde{\alpha}_2}{\tilde{\beta}} \mathbf{a}_{3k\sigma} - \frac{\tau_p^{-1} \omega_V c_{\omega_{\text{SAS}}}}{\tilde{\beta}} (f'_G - f'_E) \frac{\tilde{\tau}_p(-e)\mathbf{E}}{m}.
\end{aligned} \tag{2.69}$$

である。ただし、

$$\begin{aligned}
\tilde{\alpha}_1 &= -\omega_V \omega_{\text{SAS}} - \tilde{\varphi}_{l\varphi} \tau_{\text{ps}}^{-1} s_{\omega_V} c_{\omega_{\text{SAS}}}, \\
\tilde{\alpha}_2 &= \omega_{\text{SAS}} \tilde{\varphi}_{l\varphi}^s - \omega_V \tau_{\text{ps}}^{-1} s_{\omega_V} c_{\omega_{\text{SAS}}} = \omega_{\text{SAS}} \tilde{\tau}_l^{-1}, \\
\tilde{\beta} &= \tilde{\varphi}_{l\varphi} \tilde{\varphi}_{l\varphi}^s + \omega_V^2
\end{aligned} \tag{2.70}$$

と定義した。

第 3 章

結果

3.1 概要

本章では、スピン・擬スピン流を定義し、その伝導率を解析的に求める。直流電場の場合 ($\omega \rightarrow 0$ の場合) と交流電場の場合 ($\omega \neq 0$ の場合) でそれぞれ伝導率をプロットする。直流電場の場合、伝導率は ω_{SAS} の関数として Lorentz 型の関数になる。 τ_{ps} や ω_V を変化させた時の依存性についてもそれぞれプロットを行なった。交流電場の場合、伝導率は ω と ω_{SAS} の関係によって伝導率の大きさにピークが現れることを示す。さらに位相成分は電流の位相に比べ二倍大きくなりうることを示す。これは伝導率の実部が負になる事示しているが、本研究のスピン・擬スピン流はスピンホール効果に由来する流れのため、非物理的な結果ではない。

3.2 スピン・擬スピン流の伝導率

3.2.1 スピン・擬スピン流の定義

ここで、 $\mu = x, y$ 方向にスピンの z 成分・擬スピンの γ 成分を運ぶスピン・擬スピン流を、次のように定義する。

$$j_{\mu}^{\text{s}\gamma} \equiv \frac{1}{2S} \text{tr} \left(\hat{\rho} \hat{\sigma}_z \hat{\tau}_{\gamma} \frac{\hat{p}_{\mu}}{m} \right) = \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma \tau_{\gamma\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar k_{\mu}}{m}. \quad (3.1)$$

本研究ではスピン軌道相互作用について 1 次までの効果を考えるため、

$$\mathbf{j}^{\text{s}\gamma} = \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left(\mathbf{a}_{\gamma\mathbf{k}\uparrow}^{[1]} - \mathbf{a}_{\gamma\mathbf{k}\downarrow}^{[1]} \right) e^{-i\omega t} = \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{a}_{\gamma\mathbf{k}\uparrow}^{[1]} e^{-i\omega t} \quad (3.2)$$

と表せる。

以下簡単のため、電場を x 方向に印可した場合を考える。このとき、擬スピン成分 γ のスピン・擬スピン流の伝導率を $\sigma_{yx}^{\text{s}\gamma}$ と表し、

$$j_y^{\text{s}\gamma} = \sigma_{yx}^{\text{s}\gamma} E_x e^{-i\omega t}. \quad (3.3)$$

と定義する。式 (2.67), (2.69) で求めた $\mathbf{a}_{\gamma\mathbf{k}\sigma}^{[1]}$ を式 (3.2) に代入すると、スピン・擬スピン流の伝導

率が次のように得られる.

$$\begin{aligned}
\sigma_{yx}^{s0} &= -\frac{e}{S} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left[\tilde{g}_{3k} (\tilde{\gamma}_k + 1) s_{\omega_V} (f'_G - f'_E) - \tilde{g}_{0k} (\tilde{\gamma}_k \tilde{\tau}_p \tilde{\tau}_l^{-1} + 1) (f'_G + f'_E) \right], \\
\sigma_{yx}^{s1} &= \frac{e}{S} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \frac{\tilde{\alpha}_1}{\tilde{\beta}} \left[\tilde{g}_{3k} (f'_G + f'_E) - \tilde{g}_{0k} \frac{\tilde{\gamma}_k + 1}{\tilde{\gamma}_k \tilde{\tau}_p \tilde{\tau}_l^{-1} + 1} s_{\omega_V} (f'_G - f'_E) \right], \\
\sigma_{yx}^{s2} &= \frac{e}{S} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \frac{\tilde{\alpha}_2}{\tilde{\beta}} \left[\tilde{g}_{3k} (f'_G + f'_E) - \tilde{g}_{0k} \frac{\tilde{\gamma}_k + 1}{\tilde{\gamma}_k \tilde{\tau}_p \tilde{\tau}_l^{-1} + 1} s_{\omega_V} (f'_G - f'_E) \right], \\
\sigma_{yx}^{s3} &= \frac{e}{S} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left[\tilde{g}_{3k} (f'_G + f'_E) - \tilde{g}_{0k} \frac{\tilde{\gamma}_k + 1}{\tilde{\gamma}_k \tilde{\tau}_p \tilde{\tau}_l^{-1} + 1} s_{\omega_V} (f'_G - f'_E) \right].
\end{aligned} \tag{3.4}$$

3.2.2 エネルギースケールについての仮定

さらに, エネルギースケールの比較として, $k_B T \ll \varepsilon_F$ かつ $\Delta_{\text{SAS}} \ll \varepsilon_F$ かつ $\hbar \omega_V \ll \varepsilon_F$ である場合を考える. ただし, $\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ はフェルミエネルギーである. このようにすると, ゆっくり変化する ε の関数を $k_B T$, $\hbar \omega_{\text{SAS}}$, $\hbar \omega_V$ のスケールで定数と近似でき, 緩和時間 $\tau_p(\varepsilon)$, $\tau_l(\varepsilon)$, $\tau_{\text{ss}}(\varepsilon)$ を, フェルミエネルギー ε_F における値に置き換えてよい.

また, 衝突項内部で Δ_{SAS} の効果を見捨てる理由について再度述べる. この近似が妥当な理由は, フェルミエネルギー ε_F に比べて $\frac{\hbar}{\tau_p}$, および $\hbar \omega_{\text{SAS}}$ が小さい時, これらの積 $\frac{\hbar}{\tau_p} \times \hbar \omega_{\text{SAS}}$ の効果はさらに小さい寄与を与えるため, 無視できるからである.

3.2.3 スピン・擬スピン流の伝導率の解析式

以下では 3.2.2 節で述べた近似の下で議論する. この近似を用いると, スピン・擬スピン流の伝導率の解析的な表式が, 次のように得られる.

$$\sigma_{yx}^{s0} = \frac{1}{(1 - i\omega\tau_p)^2} \sigma_0^{\text{SH}}, \tag{3.5}$$

$$\sigma_{yx}^{s3} = \frac{1}{\tilde{\gamma}_k \tilde{\tau}_p \tilde{\tau}_l^{-1} + 1} \frac{1}{(1 - i\omega\tau_p)^2} \sigma_3^{\text{SH}}. \tag{3.6}$$

ただし, $\sigma_{\gamma}^{\text{SH}} = -\frac{2N_e e \tau_p^2}{m \tau_{\gamma \text{ss}}}$ は $\tau_p = \tau_p(\varepsilon_F)$, $\tau_{\gamma \text{ss}} = \tau_{\gamma \text{ss}}(\varepsilon_F)$, かつ $\omega_{\text{SAS}} = 0$ の時の直流電場を印加した時のスピン Hall 伝導率であり, N_e はスピンごとの電子密度である. 一層系の結果を考える場合は, $\omega_{\text{SAS}} \rightarrow 0$ の極限を考えればよい. また, 直流電場の結果を考える場合は, $\omega \rightarrow 0$ の極限を考えればよい. また, 擬スピンの第 1 成分と第 2 成分は式 (3.6) を用いて

$$\sigma_{yx}^{s1} = \frac{\omega_{\text{SAS}} \omega_V + \tilde{\varphi}_{l\varphi} \tau_{\text{ps}}^{-1} s_{\omega_V} c_{\omega_{\text{SAS}}}}{\tilde{\varphi}_{l\varphi} \tilde{\varphi}_{l\varphi}^s + \omega_V^2} \sigma_{yx}^{s3}, \tag{3.7}$$

$$\sigma_{yx}^{s2} = \frac{\omega_{\text{SAS}} \tilde{\tau}_l^{-1}}{\tilde{\varphi}_{l\varphi} \tilde{\varphi}_{l\varphi}^s + \omega_V^2} \sigma_{yx}^{s3}. \tag{3.8}$$

式 (3.7) より, $\omega_V = 0$ の場合は σ_{yx}^{s1} は生じないこと, および $\omega_{\text{SAS}} = 0$ の場合は σ_{yx}^{s2} は生じないことがわかる. これは $H_{\perp}$ のうち二層の結合の強さを表す $\hbar \omega_{\text{SAS}}$ が $\hat{\tau}_1$ 方向に働く擬磁場であり, $\hbar \omega_V$ の項は $\hat{\tau}_3$

方向に働く擬磁場であるので、 $\omega_V = 0$ で擬磁場が $\hat{\tau}_1$ 方向のとき $\hat{\tau}_1$ 方向の成分が誘起されず、 $\omega_{\text{SAS}} = 0$ で擬磁場が $\hat{\tau}_3$ 方向のとき $\hat{\tau}_2$ 方向の成分が誘起されないためである。

二重量子井戸の左右の層で不純物ポテンシャルの大きさが等しい場合は $\tau_{\text{oss}}^{-1} = 0$ であるから、 $\sigma_{yx}^{\text{s0}} = 0$ になる。スピン・擬スピン流の第0成分は二層で同じ方向にスピン流が流れている場合を表す。本研究ではスピンと擬スピンの結合することによって生じる現象を考えるため、以下では σ_{yx}^{s3} に注目して議論を行う。

$\omega_V = 0$ の場合

$\omega_V = 0$ の場合、 $s_{\omega_V} = 0$ 、 $c_{\omega_{\text{SAS}}} = 1$ であり、 $\tilde{\gamma}_k = \omega_{\text{SAS}}^2 \tilde{\tau}_l \tilde{\varphi}_{l\varphi}^{-1} + \tilde{\tau}_l \tau_{\text{ps}}^{-1}$ となるため、

$$\frac{\sigma_{yx}^{\text{s3}}}{\sigma_3^{\text{SH}}} = \frac{(1 + \tilde{\tau}_p \tau_{\text{ps}}^{-1})^{-1}}{1 + \omega_{\text{SAS}}^2 [(\tilde{\tau}_p^{-1} + \tau_{\text{ps}}^{-1})(\tilde{\tau}_l^{-1} + \tau_{\text{ps}}^{-1})]^{-1}} \frac{1}{(1 - i\omega\tau_p)^2} \quad (3.9)$$

となる。

$\tau_{\text{ps}}^{-1} = 0$ の場合

$\tau_{\text{ps}}^{-1} = 0$ の場合、 $\tilde{\gamma}_k = \omega_{\text{SAS}}^2 / (\omega_V^2 + \tilde{\tau}_l^{-2})$ となるため、

$$\frac{\sigma_{yx}^{\text{s3}}}{\sigma_3^{\text{SH}}} = \frac{\omega_V^2 \tilde{\tau}_l^2 + 1}{1 + (\omega_{\text{SAS}}^2 \tilde{\tau}_p \tilde{\tau}_l^{-1} + \omega_V^2) \tilde{\tau}_l^2} \frac{1}{(1 - i\omega\tau_p)^2} \quad (3.10)$$

となる。

$\tau_{\text{ps}}^{-1} = 0$ 、かつ $\omega_V = 0$ の場合

式 (3.9)、式 (3.10) より

$$\frac{\sigma_{yx}^{\text{s3}}}{\sigma_3^{\text{SH}}} = \frac{1}{1 + \omega_{\text{SAS}}^2 \tilde{\tau}_p \tilde{\tau}_l} \frac{1}{(1 - i\omega\tau_p)^2} \quad (3.11)$$

となる。

3.3 直流電場について

この節では、 $\omega \rightarrow 0$ の極限をとり、直流電場を印加した場合の結果について議論する。

3.3.1 $\omega_V = 0, \tau_{\text{ps}}^{-1} = 0$ の場合

$\omega_V = 0$ 、かつ $\tau_{\text{ps}}^{-1} = 0$ の場合、擬スピンの第3成分に対するスピン・擬スピン流の伝導率は以下のようになる。

$$\frac{\sigma_{yx}^{\text{s3}}}{\sigma_3^{\text{SH}}} = \frac{1}{1 + \omega_{\text{SAS}}^2 \tau_p \tau_l} \quad (3.12)$$

となる。一般に $\tau_p \neq \tau_l$ である。これを踏まえ、 τ_p と τ_l の比を変えた場合に、 $\omega_{\text{SAS}} \tau_p$ の関数として伝導率をプロットしたものが図 (3.1) である。さらに不純物ポテンシャルが短距離型で $\tau_l = \tau_p$ を満たす場合、

$$\frac{\sigma_{yx}^{\text{s3}}}{\sigma_3^{\text{SH}}} = \frac{1}{1 + \omega_{\text{SAS}}^2 \tau_p^2} \quad (3.13)$$

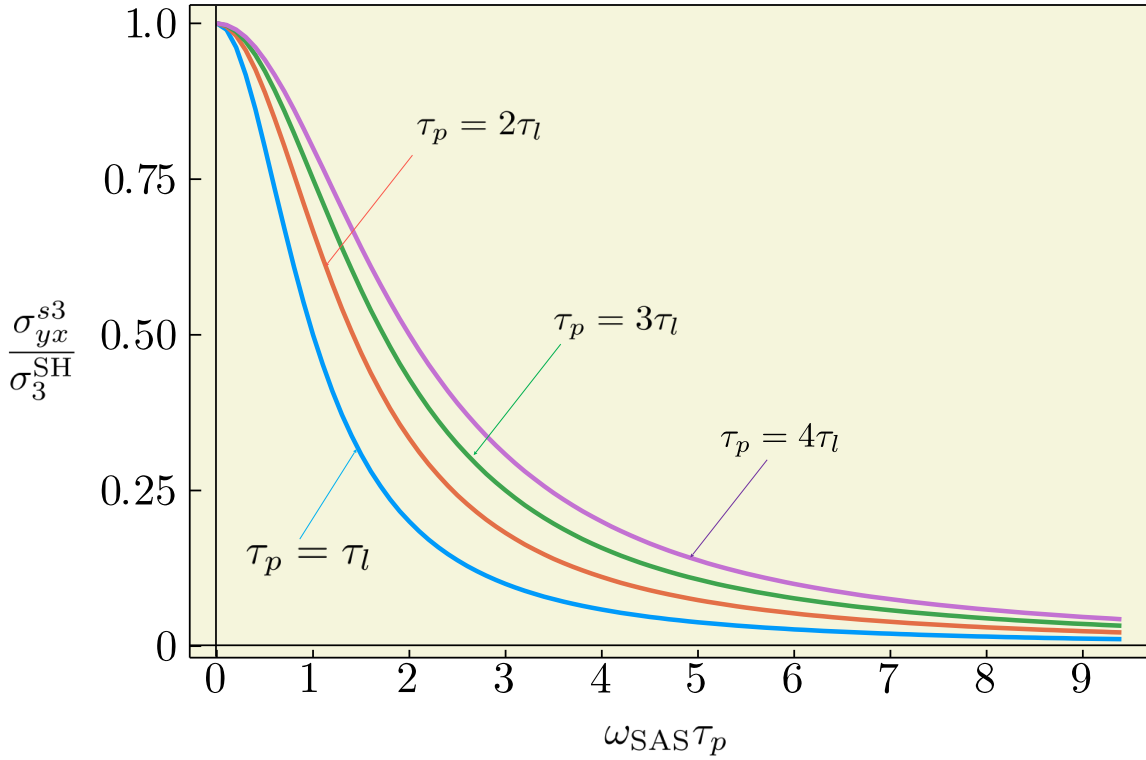


図 3.1: 規格化したスピン・擬スピン流の伝導率 $\sigma_{yx}^{s3}/\sigma_3^{SH}$ の $\omega_{SAS}\tau_p$ の依存性を, τ_p/τ_l の比を変えた場合についてプロットした. $\tau_p = \tau_l$ の場合は不純物との衝突による緩和に異方性がない場合に対応する.

となり, 変数 $\omega_{SAS}\tau_p$ に関して Lorentz 型の関数になる. これより, スピン・擬スピン流のクロスオーバーは ω_{SAS} と運動量緩和時間 τ_p^{-1} の競合で起こることがわかる.

また, このとき擬スピン成分 $\gamma = 1, 2$ に対するスピン・擬スピン流の伝導率 σ_{yx}^{s1} 及び σ_{yx}^{s2} は,

$$\sigma_{yx}^{s1} = 0, \quad \sigma_{yx}^{s2} = \omega_{SAS}\tau_p\sigma_{yx}^{s3} \quad (3.14)$$

となる. 以上より, 次の関係式が得られる.

$$\sigma_{yx}^{s3}(\omega) + i\sigma_{yx}^{s2}(\omega) = \frac{\sigma_3^{SH}}{1 - i\omega_{SAS}\tau_p}. \quad (3.15)$$

3.3.2 $\omega_V = 0, \tau_{ps}^{-1} \neq 0$ の場合

簡単のため, $\tau_p = \tau_l$ を仮定する. このとき, 擬スピンの第3成分に対するスピン・擬スピン流の伝導率は以下ようになる.

$$\frac{\sigma_{yx}^{s3}}{\sigma_3^{SH}} = \frac{(1 + \tau_p\tau_{ps}^{-1})^{-1}}{1 + \omega_{SAS}^2 (\tau_p^{-1} + \tau_{ps}^{-1})^{-2}} \quad (3.16)$$

τ_p と τ_{ps} の比を変えた場合に, $\omega_{SAS}\tau_p$ の関数として伝導率をプロットしたものが図 (3.2) である. 図 (3.2) から, デコヒーレンスの効果が強くなる (τ_p/τ_{ps} が大きくなる) と, 伝導率の最大値が小さくなる. これは擬スピンがデコヒーレンスしてしまうため擬スピン成分が存在しなくなることを意味してい

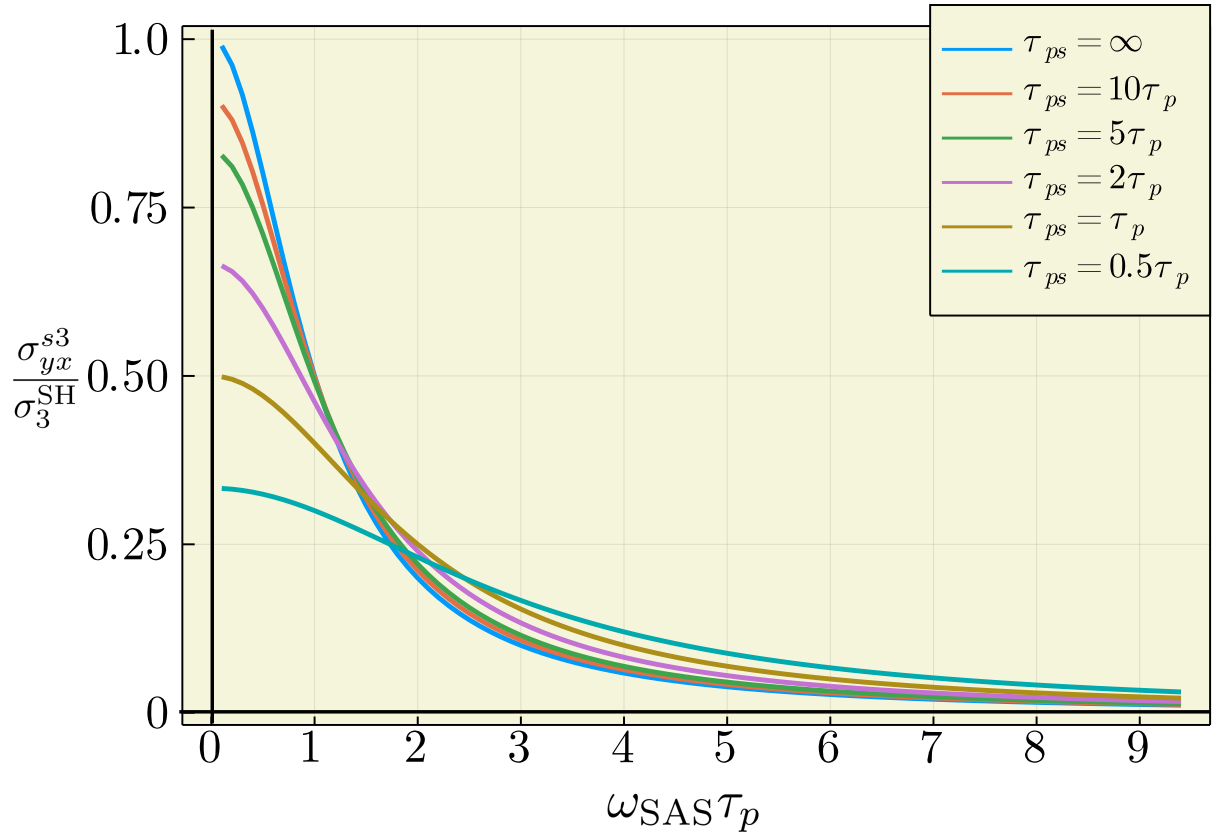


図 3.2: 規格化したスピン・擬スピン流の伝導率 $\sigma_{yx}^{s3}/\sigma_3^{SH}$ の $\omega_{SAS}\tau_p$ の依存性を、 τ_p/τ_{ps} の比を変えた場合についてプロットした。

る。また $\omega_{SAS}\tau_p$ を変化させたときに伝導率の値がより緩やかに小さくなることがわかる。これは デコヒーレンス による緩和が強く働き、スピン・擬スピン流全体の緩和時間が有効的に短くなったためである。すなわちスピン・擬スピン流のクロスオーバーにおいて ω_{SAS} と競合する時定数は、不純物散乱による運動量緩和時間のほかに、擬スピンのデコヒーレンス による時定数 τ_{ps} も存在することがわかる。不純物散乱とデコヒーレンスの緩和機構はそれぞれ独立に作用し、両方の機構が存在する場合は、その有効緩和時間の逆数はそれぞれの緩和時間の逆数を足し合わせたものとして与えられる。

3.3.3 $\omega_V \neq 0, \tau_{ps}^{-1} = 0$ の場合

簡単のため、 $\tau_p = \tau_l$ を仮定する。このとき、擬スピンの第3成分に対するスピン・擬スピン流の伝導率は以下になる。

$$\frac{\sigma_{yx}^{s3}}{\sigma_3^{SH}} = \left(1 + \frac{\omega_{SAS}^2 \tau_p^2}{1 + \omega_V^2 \tau_p^2} \right)^{-1} \quad (3.17)$$

$\omega_{SAS}\tau_p$ を変えた場合に、 $\omega_V\tau_p$ の関数として伝導率をプロットしたものが図 (3.3) である。 ω_V は z 方向に印加する電場によって調整することが可能であり、スピン・擬スピン流のクロスオーバーを観測する際に有望な選択肢になりうる。このことは5章で詳しく述べる。

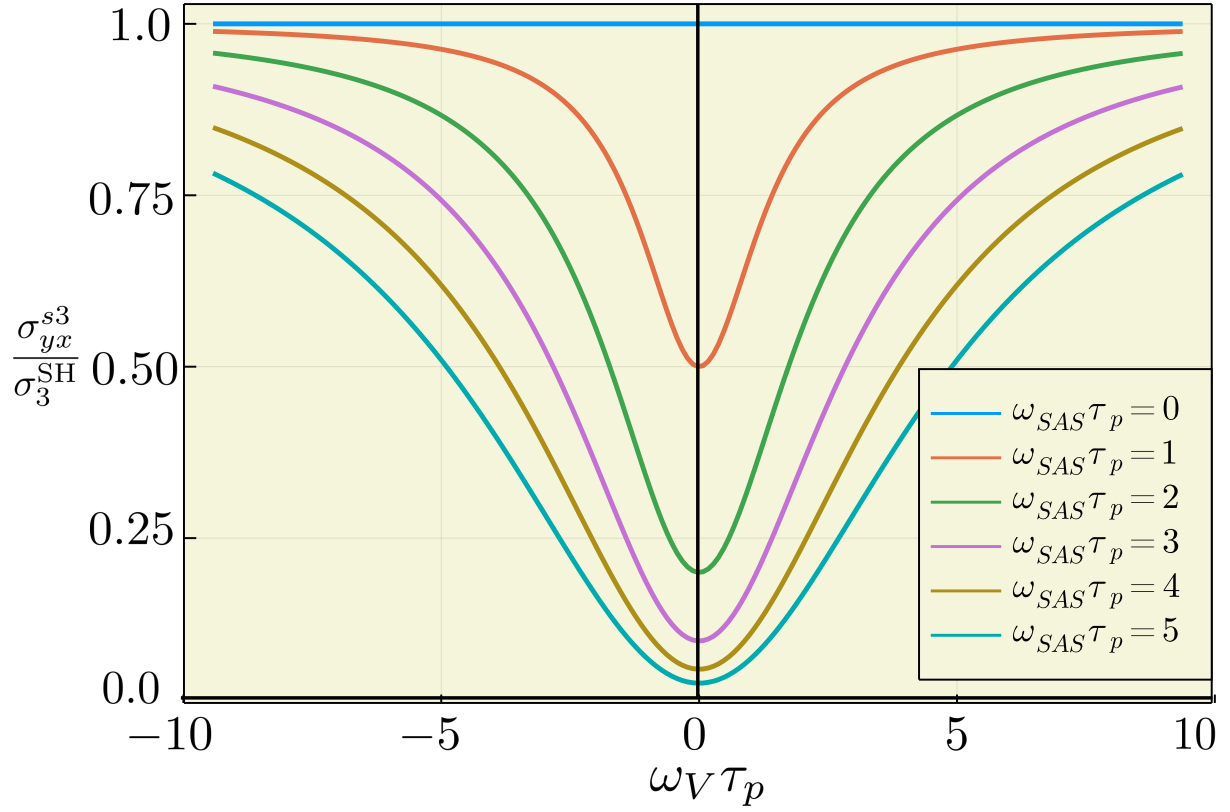


図 3.3: 規格化したスピン・擬スピン流の伝導率 $\sigma_{yx}^{s3}/\sigma_3^{SH}$ の $\omega_V \tau_p$ の依存性を, $\omega_{SAS} \tau_p$ の比を変えた場合についてプロットした. 計算結果は文献 [39] による.

3.3.4 $\omega_V \neq 0, \tau_{ps}^{-1} \neq 0$ の場合

簡単のため, $\tau_p = \tau_l$ を仮定する. このとき, 擬スピンの第 3 成分に対するスピン・擬スピン流の伝導率は以下ようになる.

$$\frac{\sigma_{yx}^{s3}}{\sigma_3^{SH}} = \frac{1}{1 + \gamma_k} = \frac{\varphi_{l\varphi} \varphi_{l\varphi}^s + \omega_V^2}{\varphi_{l\varphi} \varphi_{l\varphi}^s + \omega_V^2 + \omega_{SAS}^2 + \varphi_{l\varphi} \tau_{ps}^{-1} c_{\omega_{SAS}}^2} \quad (3.18)$$

となる. $\omega_V \tau_p = 1$ の場合, 様々な τ_{ps} の値について式 (3.18) を $\omega_{SAS} \tau_p$ プロットしたものが図 (3.4) である. 図 (3.2) と比較すると, $\omega_{SAS} \tau_p = 0$ の時に規格化した伝導率の最大値が 1 であるという特徴がある. $\omega_V \neq 0$ である場合, $\omega_{SAS} \tau_p = 0$ の時に $\varphi_{l\varphi} \tau_{ps}^{-1} c_{\omega_{SAS}}^2 = 0$ となるため, 式 (3.18) の分母第三項, 第四項が消え, $\sigma_{yx}^{s3}/\sigma_3^{SH} = 1$ になる.

3.4 交流電場について

この節では, $\omega \neq 0$ の場合を考える. また, 簡単のため $\tau_p = \tau_l$ の場合のみを考える.

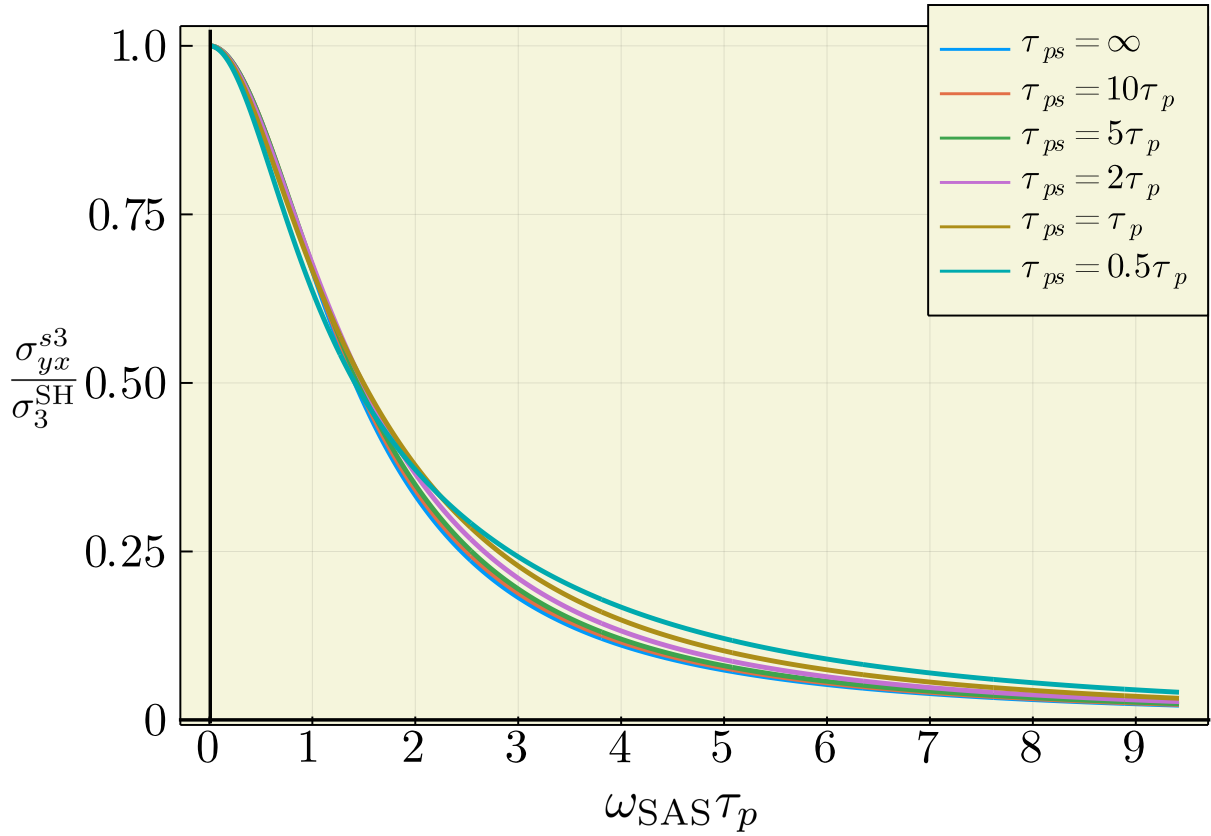


図 3.4: $\omega_V\tau_p = 1 \neq 0$ の場合に, 規格化したスピン・擬スピン流の伝導率 $\sigma_{yx}^{s3}/\sigma_3^{SH}$ の $\omega_{SAS}\tau_p$ の依存性を, τ_p/τ_{ps} の比を変えた場合についてプロットした.

3.4.1 $\omega_V = 0, \tau_{ps}^{-1} = 0$ の場合

このとき, 擬スピンの第 3 成分に対するスピン・擬スピン流の伝導率は以下ようになる.

$$\frac{\sigma_{yx}^{s3}(\omega)}{\sigma_3^{SH}} = \frac{1}{(1 - i\omega\tau_p)^2 + \omega_{SAS}^2\tau_p^2}. \quad (3.19)$$

交流応答なので, 伝導率は絶対値と偏角 θ の二つの自由度が存在する. まず式 (3.19) の偏角 θ を, 複数の $\omega_{SAS}\tau_p$ の場合に対し, $\omega\tau_p$ の関数としてプロットしたものが図 (3.5) である. まず, $\omega_{SAS} = 0$ の場合 ($\frac{\sigma_{yx}^{s3}(\omega)}{\sigma_3^{SH}} = (1 - i\omega\tau_p)^{-2}$) の場合を考える. 図 (3.5) からわかるように, $\omega \rightarrow \infty$ の極限で, 偏角 θ は π まで達する. これは縦伝導率 $\sigma_{xx}(\omega) \propto (1 - i\omega\tau_p)^{-1}$ の偏角が $\frac{\pi}{2}$ を超えない事と対照的な結果である. ω_{SAS} が大きくなるにつれ, 例えば $\theta = \frac{\pi}{2}$ を超えるためには大きな ω の値が必要になる. これはスピン・擬スピン流の伝導率が ω , ω_{SAS} , および τ_p^{-1} の相対的な比で決まっているからである. また, $\theta > \frac{\pi}{2}$ の時, スピン・擬スピン流の伝導率の実部は負の値になる. 縦伝導率の実部が負ということは, ジュール熱を吸熱するという非物理的な結果を与えるが, スピンホール効果による純粋スピン流は電荷の流れを伴わずジュール熱を生じないため, 伝導率の実部が負になるとしても非物理的な結果ではない.

次に図 (3.6) は, いくつかの異なる $\omega_{SAS}\tau_p$ の値に対し, $\omega\tau_p$ を変数にした時の, 式 (3.19) の絶対値の振る舞いである. ただし, 対称性から $\omega > 0$ の場合のみを描いている. $\omega_{SAS}\tau_p > 1$ の時, ω が $\omega\tau_p = \sqrt{\omega_{SAS}^2\tau_p^2 - 1}$ の値で, ピーク $(2\omega_{SAS}\tau_p)^{-1}$ を持つことがわかった. これは外場の振動数 ω と擬スピンの歳差運動の振動数 ω_{SAS} の間で共鳴が起きた結果であると考えられる.

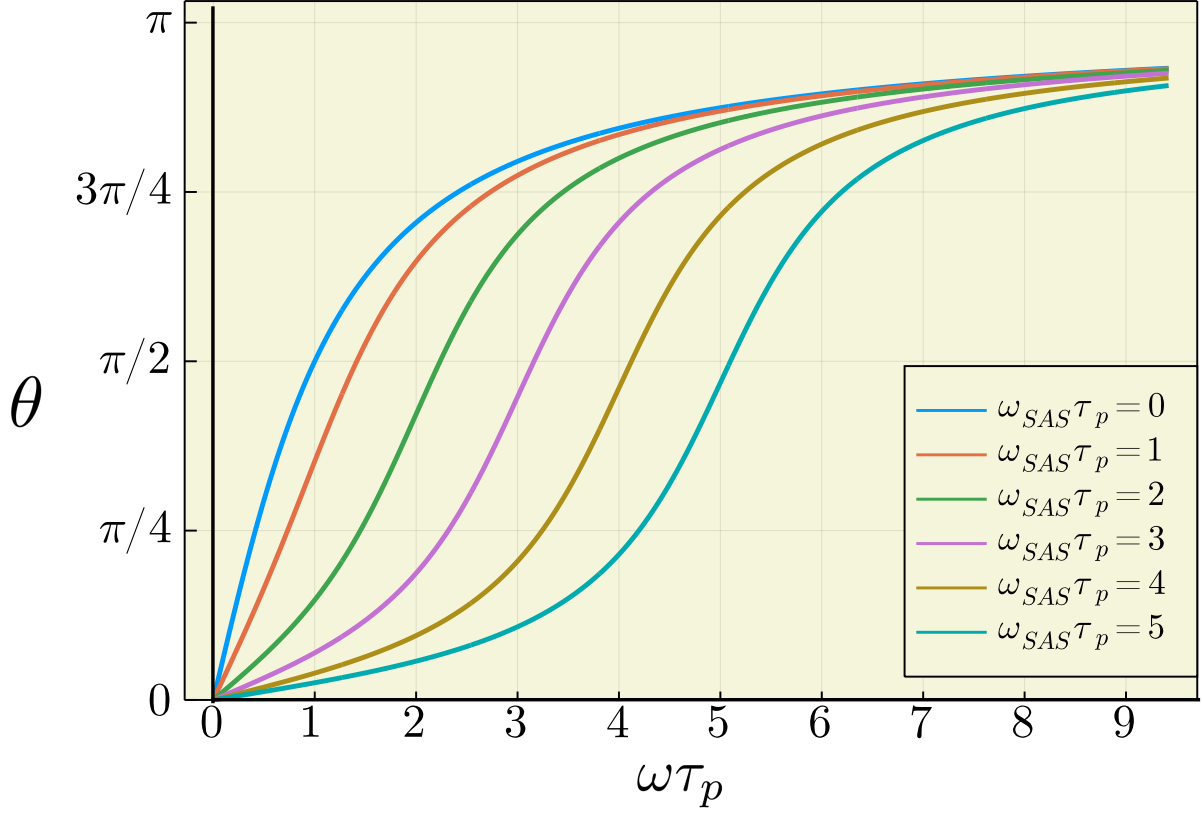


図 3.5: $\omega\tau_p$ を変数にした時の偏角の振る舞い. 領域 $\frac{\pi}{2} < \theta$ の値もとりうる. 計算結果は文献 [51] による.

3.4.2 $\omega_V = 0, \tau_{ps}^{-1} \neq 0$ の場合

このとき、擬スピンの第3成分に対するスピン・擬スピン流の伝導率は以下ようになる.

$$\frac{\sigma_{yx}^{s3}}{\sigma_3^{SH}} = \frac{(1 + \tilde{\tau}_p \tau_{ps}^{-1})^{-1}}{1 + \omega_{SAS}^2 (\tilde{\tau}_p^{-1} + \tau_{ps}^{-1})^{-2}} \frac{1}{(1 - i\omega\tau_p)^2} \quad (3.20)$$

まず式 (3.20) の偏角を、複数の $\omega_{SAS}\tau_p$ の場合に対し、 $\omega\tau_p$ の関数としてプロットしたものが図 (3.7) である. $\omega \rightarrow 0$, および $\omega \rightarrow \infty$ の振る舞いは図 (3.5) の場合と大きく変わらないが、今の場合スピン・擬スピン流の伝導率は ω , ω_{SAS} , τ_p^{-1} の他に、 τ_{ps} の相対的な比で決まっている.

次に、図 (3.8) は、デコヒーレンスの強さを変化させた場合における、 $\omega\tau_p$ を変数にした時の、式 (3.20) の絶対値の振る舞いである. τ_{ps} が大きくなるにつれ、伝導率の最大値が小さくなっていることがわかる. さらに、共鳴によるピークも見えづらくなっている.

3.4.3 $\omega_V \neq 0, \tau_{ps}^{-1} = 0$ の場合

このとき、擬スピンの第3成分に対するスピン・擬スピン流の伝導率は以下ようになる.

$$\frac{\sigma_{yx}^{s3}}{\sigma_3^{SH}} = \left(1 + \frac{\omega_{SAS}^2 \tilde{\tau}_p^2}{1 + \omega_V^2 \tilde{\tau}_p^2}\right)^{-1} \quad (3.21)$$

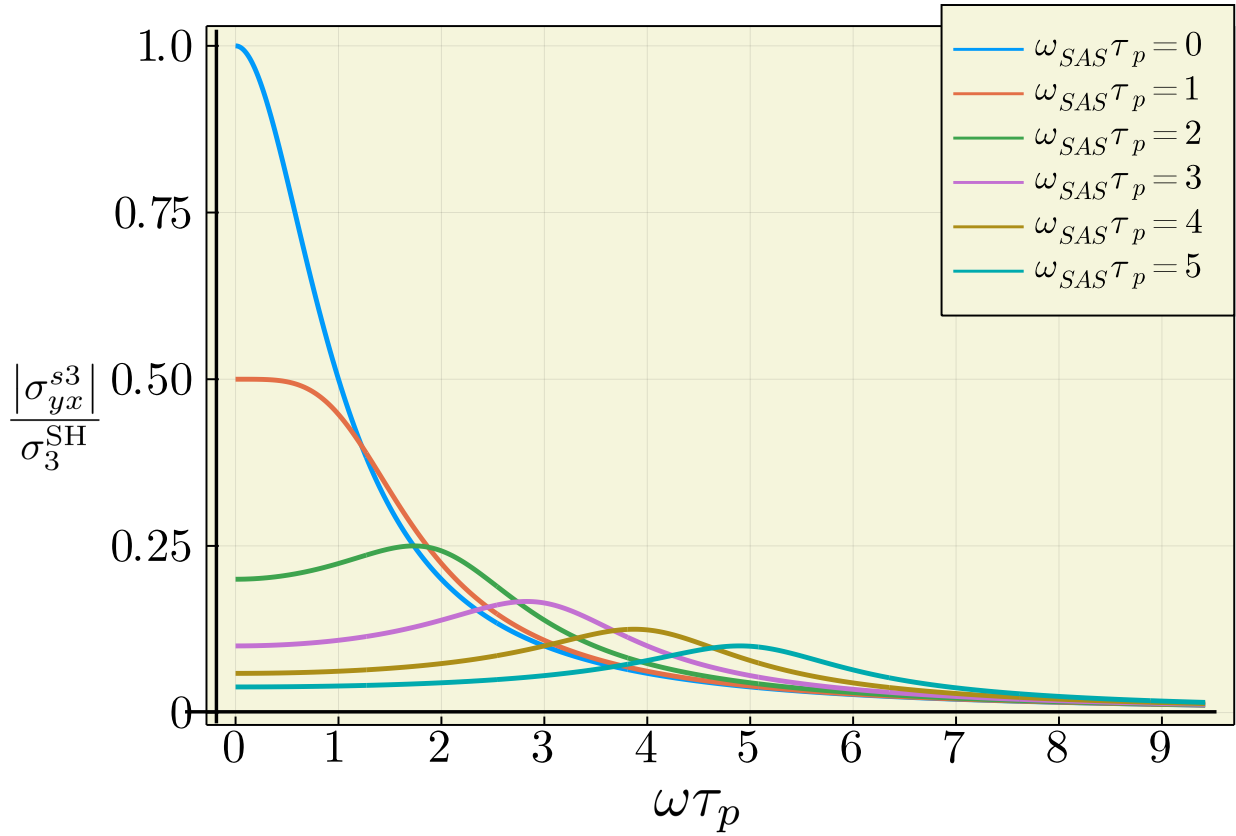
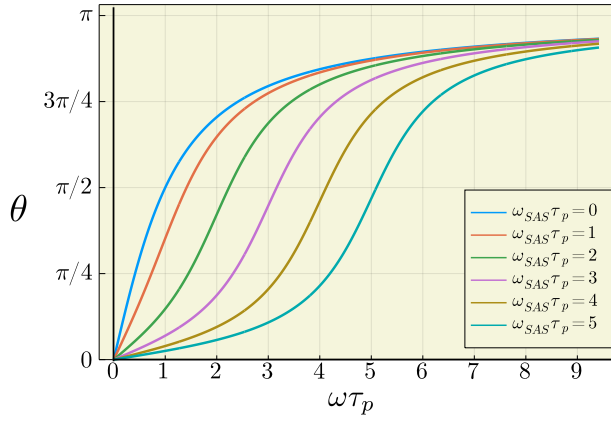
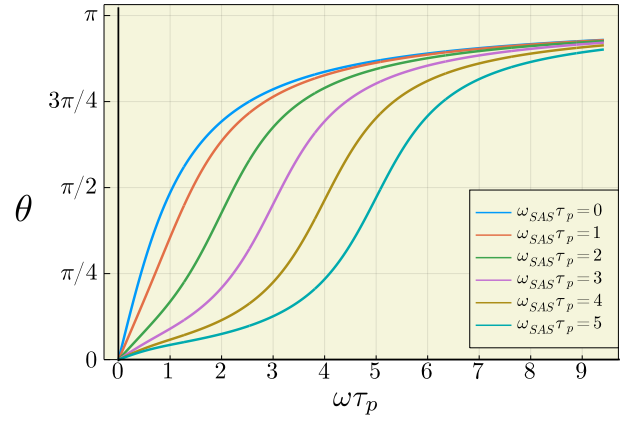
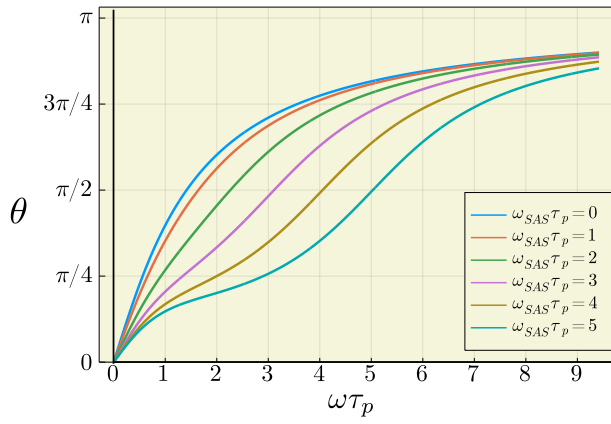
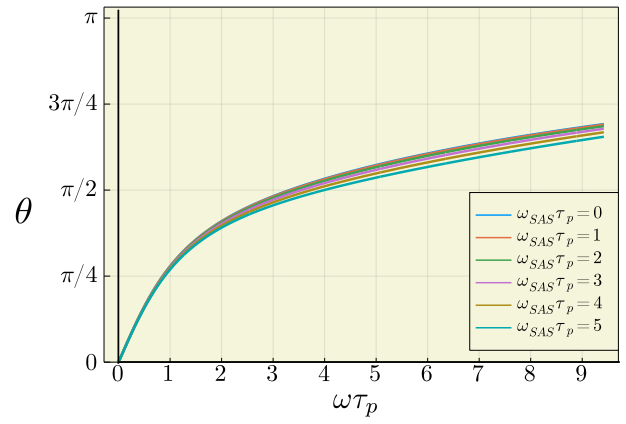


図 3.6: $\omega\tau_p$ を変数にした時の、スピン・擬スピン伝導度の絶対値の振る舞い。 $\omega_{SAS}\tau_p \neq 0$ の場合は、共鳴効果が生じてスピン・擬スピン流の大きさが増大する。 $\omega_{SAS}\tau_p = 1$ が臨界制振の場合である。また、 $\omega\tau_p$ に関して偶関数であるため、正の場合のみを描いている。計算結果は文献 [51] による。

まず式 (3.21) の偏角を、複数の $\omega_{SAS}\tau_p$ の場合に対し、 $\omega\tau_p$ の関数としてプロットしたものが図 (3.9) である。今の場合スピン・擬スピン流の伝導率は ω , ω_{SAS} , τ_p^{-1} の他に、 ω_V の相対的な比で決まっている。 ω_V が大きくなると、一旦偏角が減少するような ω の領域が現れる。

次に、図 (3.10) は、いくつかの異なる $\omega_{SAS}\tau_p$ の値に対し、 $\omega\tau_p$ を変数にした時の、式 (3.21) の絶対値の振る舞いである。 $\omega_V\tau_p \sim 1$ の場合、 $\omega = 0$ の地点でピークを迎えた後、 ω と ω_{SAS} の共鳴に由来するピークが現れる。しかし ω_V が大きくなると、共鳴によるピークは潰れて見えなくなる。

 $\tau_{ps}^{-1} = 0$ の場合 $\tau_{ps}^{-1} = 0.1\tau_p$ の場合 $\tau_{ps}^{-1} = \tau_p$ の場合 $\tau_{ps}^{-1} = 10\tau_p$ の場合図 3.7: デコヒーレンスの強さを変化させた場合の、伝導率の偏角の ω 依存性。

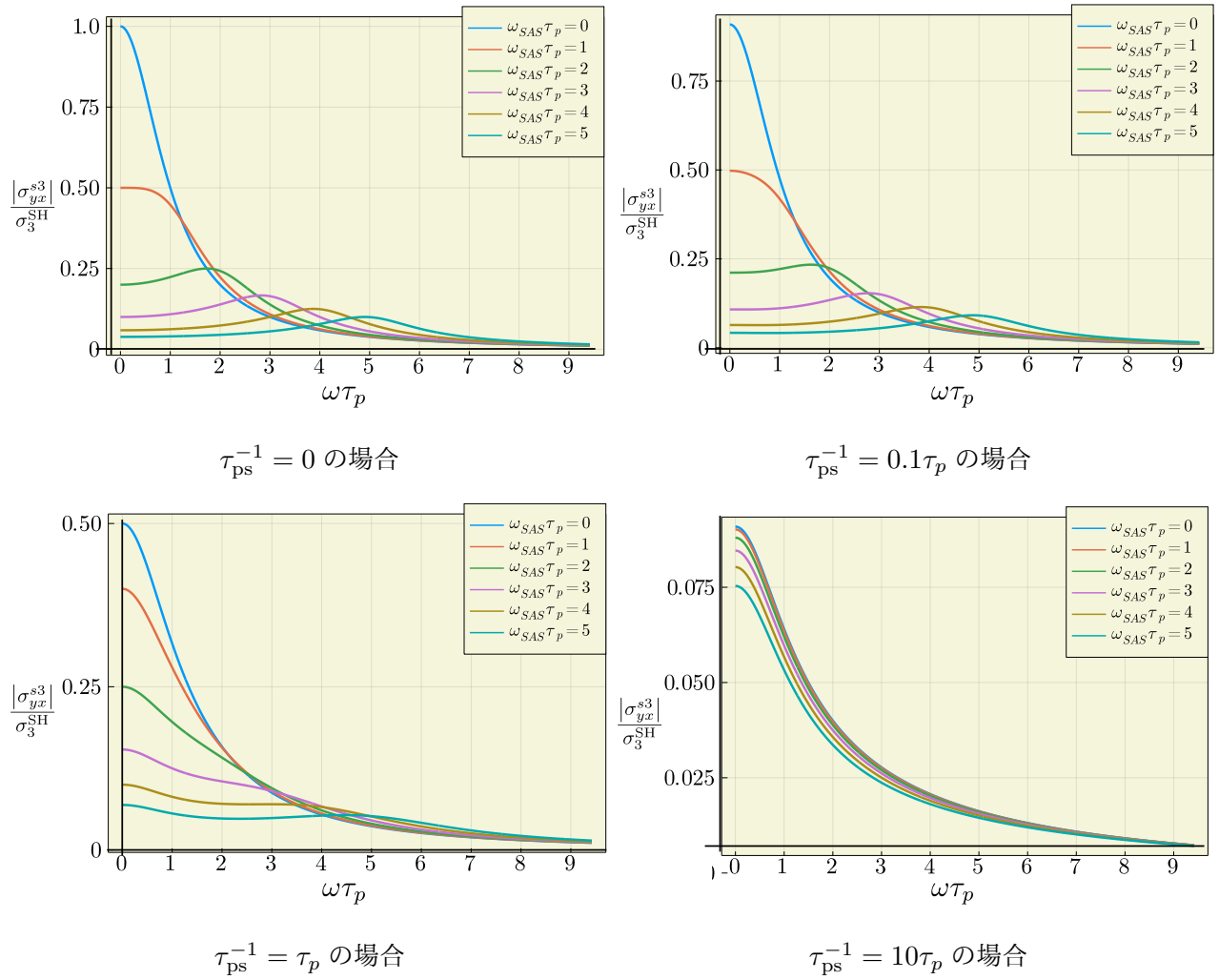
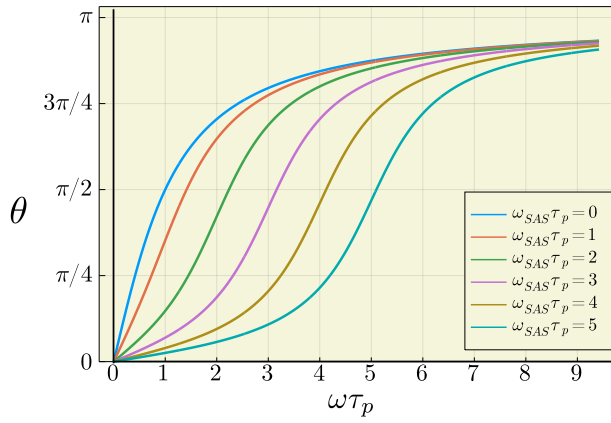
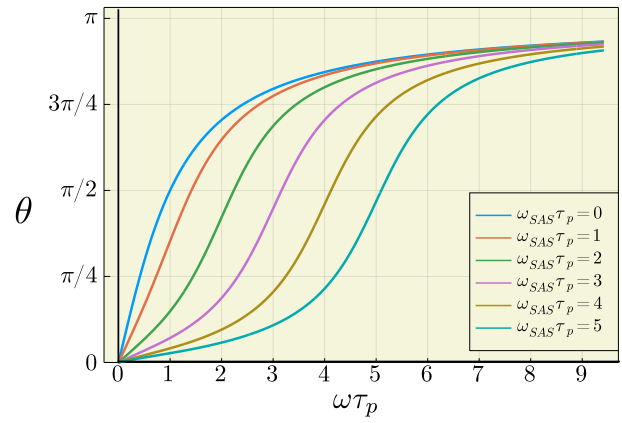
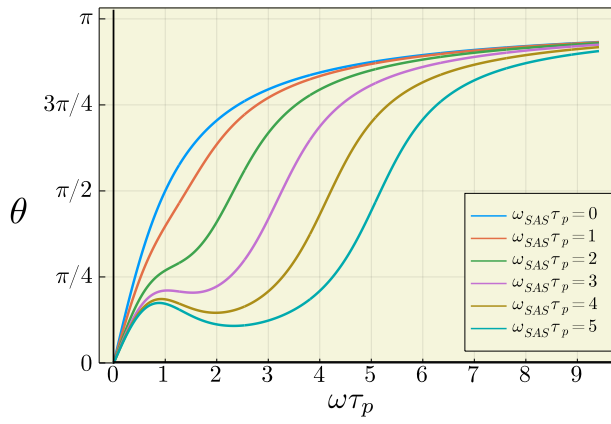
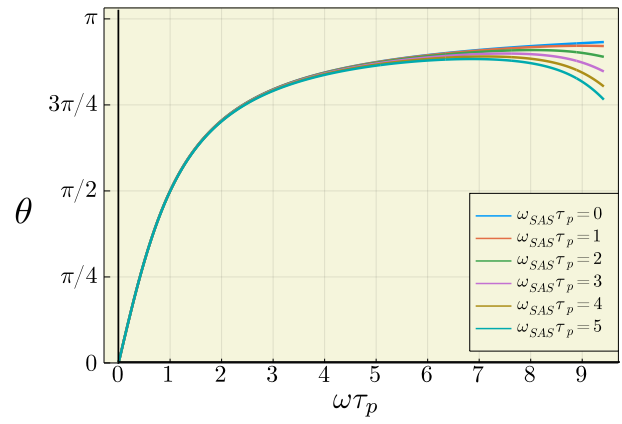


図 3.8: デコヒーレンスの強さを変化させた場合における, 伝導率の絶対値の ω 依存性.

 $\omega_V\tau_p = 0$ の場合 $\omega_V\tau_p = 0.1$ の場合 $\omega_V\tau_p = 1$ の場合 $\omega_V\tau_p = 10$ の場合図 3.9: ポテンシャルオフセット $\hbar\omega_V$ の大きさを変化させた場合における, 伝導率の偏角の ω 依存性.

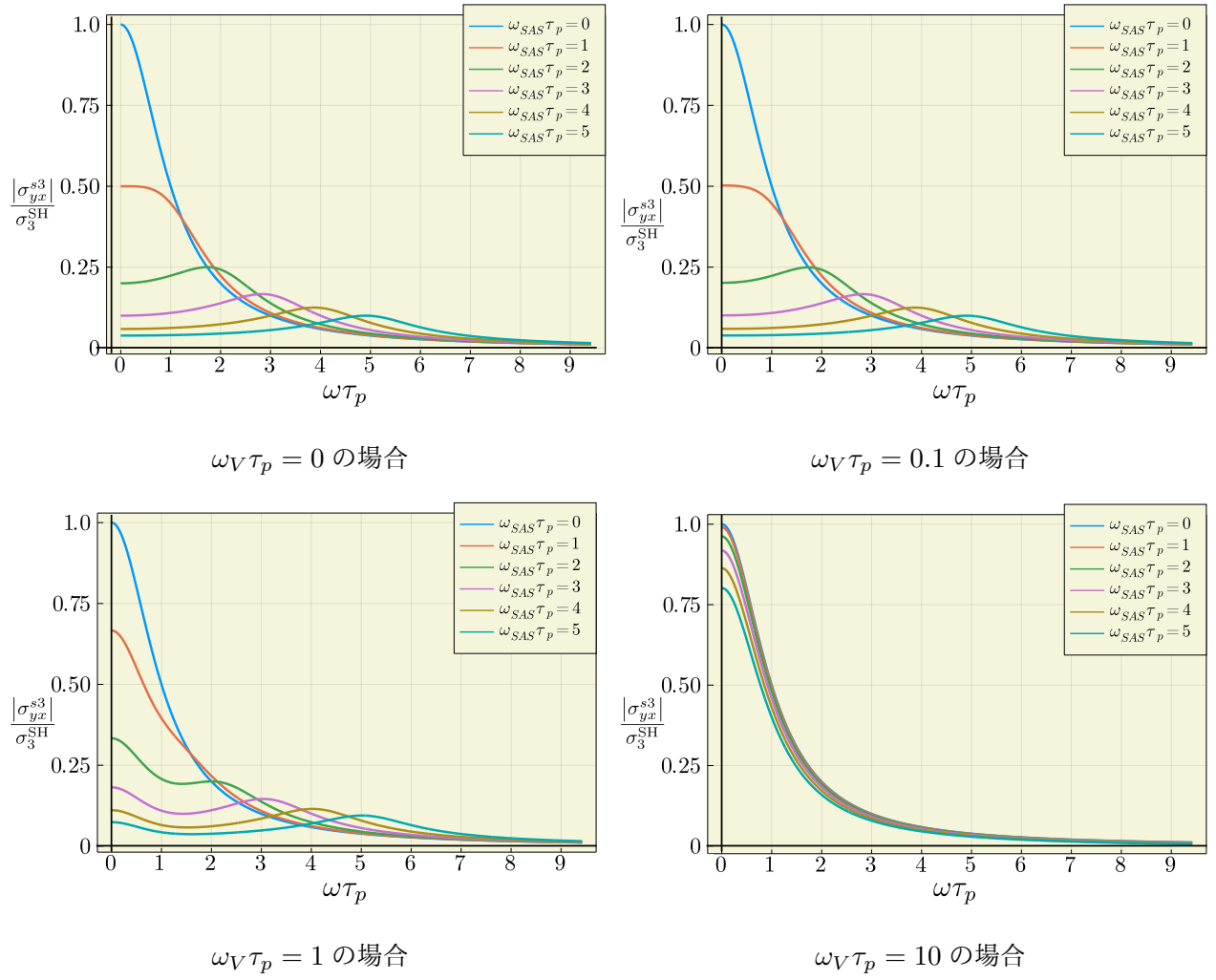


図 3.10: ポテンシャルオフセット $\hbar\omega_V$ の大きさを変化させた場合における, 伝導率の絶対値の ω 依存性.

第 4 章

スピン・擬スピン流の運動方程式

この章では、スピン・擬スピン流の運動方程式を解析的に導出する。その後直流電場を印加した時のスピン・擬スピン流のクロスオーバーが擬スピン空間における Hanle 効果であることを議論し、交流電場を印加した時の共鳴現象のタイプが古典的なサイクロトロン共鳴と同じタイプになることについて議論する。

4.1 スピン・擬スピン流の運動方程式

$\omega_V = 0$, $k_B T \ll \varepsilon_F$, $\hbar\omega_{\text{SAS}} \ll \varepsilon_F$ の場合を考える。このときスピン・擬スピン流 $j_\mu^{s\gamma} = \frac{1}{2S} \text{tr} [\hat{\rho} \hat{\sigma}_z \hat{\tau}_\gamma \frac{p_\mu}{m}]$ を時間微分すると

$$\begin{aligned} \frac{dj_y^{s\gamma}(t)}{dt} &= \frac{1}{2S} \sum_{\ell\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar k_\mu}{m} \sigma \langle \ell\mathbf{k}\sigma | \left(\frac{d\hat{\rho}}{dt} \tau_\gamma \right) | \ell\mathbf{k}\sigma \rangle \\ &= \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar k_\mu}{m} \sigma \left(\frac{\partial \tau_{\gamma\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right) \end{aligned} \quad (4.1)$$

となる。ここで式 (2.55) を代入し整理すると

$$\begin{aligned} \frac{dj_y^{s0}(t)}{dt} &= -\tau_p^{-1} j_y^{s0}(t), \\ \frac{dj_y^{s1}(t)}{dt} &= -\tau_l^{-1} j_y^{s1}(t), \\ \frac{dj_y^{s2}(t)}{dt} &= \omega_{\text{SAS}} j_y^{s3}(t) - (\tau_l^{-1} + \tau_{\text{ps}}^{-1}) j_y^{s2}(t), \\ \frac{dj_y^{s3}(t)}{dt} &= -\omega_{\text{SAS}} j_y^{s2}(t) - (\tau_p^{-1} + \tau_{\text{ps}}^{-1}) j_y^{s3}(t) + \tau_p^{-1} \frac{\sigma_3^{\text{SH}}}{1 - i\omega\tau_p} E_x e^{-i\omega t} \end{aligned} \quad (4.2)$$

が得られる。これがスピン・擬スピン流の運動方程式である。

4.1.1 直流電場の場合：Hanle 効果

直流電場を印加した場合，式 (4.2) において $\omega \rightarrow 0$ の極限を取る．このときのスピン・擬スピン流の運動方程式は

$$\begin{aligned}\frac{dj_y^{s0}(t)}{dt} &= -\tau_p^{-1} j_y^{s0}(t), \\ \frac{dj_y^{s1}(t)}{dt} &= -\tau_l^{-1} j_y^{s1}(t), \\ \frac{dj_y^{s2}(t)}{dt} &= \omega_{\text{SAS}} j_y^{s3}(t) - (\tau_l^{-1} + \tau_{\text{ps}}^{-1}) j_y^{s2}(t), \\ \frac{dj_y^{s3}(t)}{dt} &= -\omega_{\text{SAS}} j_y^{s2}(t) - (\tau_p^{-1} + \tau_{\text{ps}}^{-1}) j_y^{s3}(t) + \tau_p^{-1} \sigma_3^{\text{SH}} E_x\end{aligned}\tag{4.3}$$

となる．式 (4.3) は，スピンに対して Bloch 方程式と呼ばれるものと同じ形をしている．Bloch 方程式はスピン偏極 S_i を変数にした方程式である．スピン S_1 方向に磁場 $\mathbf{B}$ を印加した系において，スピン偏極の生成・緩和・歳差の機構がある場合，スピン偏極の時間発展は以下のような Bloch 方程式で記述される．

$$\begin{aligned}\frac{dS_1(t)}{dt} &= -\frac{S_1(t)}{T_1}, \\ \frac{dS_2(t)}{dt} &= \omega_B S_3(t) - \frac{S_2(t)}{T_2}, \\ \frac{dS_3(t)}{dt} &= -\omega_B S_2(t) - \frac{S_3(t)}{T_2} + \left(\frac{\partial S_3}{\partial t} \right)_{\text{Gene.}}\end{aligned}\tag{4.4}$$

ここで $\omega_B = \gamma B$ は磁場を換算した振動数であり，今の場合は S_1 軸方向に磁場が印加されているので，スピンはその軸の周りを歳差運動し，それが S_2 に関する方程式 S_3 に関する方程式の右辺第一項に表れている． T_1 を縦緩和時間， T_2 を横緩和時間などと呼び，スピン緩和時間を表す．また $\left(\frac{\partial S_3}{\partial t} \right)_{\text{Gene.}}$ はスピン偏極の生成項であり，強磁性体からのスピン注入など系に応じた機構が選ばれる．生成項として適当な機構を選び， $\left(\frac{\partial S_3}{\partial t} \right)_{\text{Gene.}} = \dot{S}_0$ と定数で与えたとして式 (4.4) を定常状態で解くと，

$$\begin{aligned}S_1 &= 0, \\ S_2 &= \omega_B T_2 S_3, \\ S_3 &= \frac{\dot{S}_0 T_2}{1 + \omega_B^2 T_2^2}\end{aligned}\tag{4.5}$$

が得られる (図 4.1)．従ってスピン偏極は磁場 B の関数として変化し，実験では S_3 の半値幅からスピン緩和時間 T_2 を求めることができる．これを Hanle 効果と呼ぶ [52, 53, 54]．式 (4.3) と式 (4.4) の各項を比較すると，一対一の対応があることがわかる．すなわち，式 (4.3) で記述されるスピン・擬スピン流は ω_{SAS} の関数として Hanle 効果を生じる．

スピン・スピン流では緩和機構が不純物散乱による緩和とデコヒーレンスによる緩和をそれぞれ独立なものとして足し合わせたものと得られる．不純物散乱による緩和は運動量緩和時間 τ_p と寿命 τ_l の二つが存在し，一般に $\tau_p \neq \tau_l$ であるから，スピン・擬スピン流の緩和は擬スピン空間において異方性が存在する．この異方性を考慮し Hanle 効果による半値幅が変化の様子は図 3.1 に示されている．不純物ポテンシャルが短距離型，すなわち $u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \propto \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ で表される時，この異方性は消失する．また，今はスピン・擬スピン流の生成項がスピンホール効果であることもわかる．この現象を生じさせるために

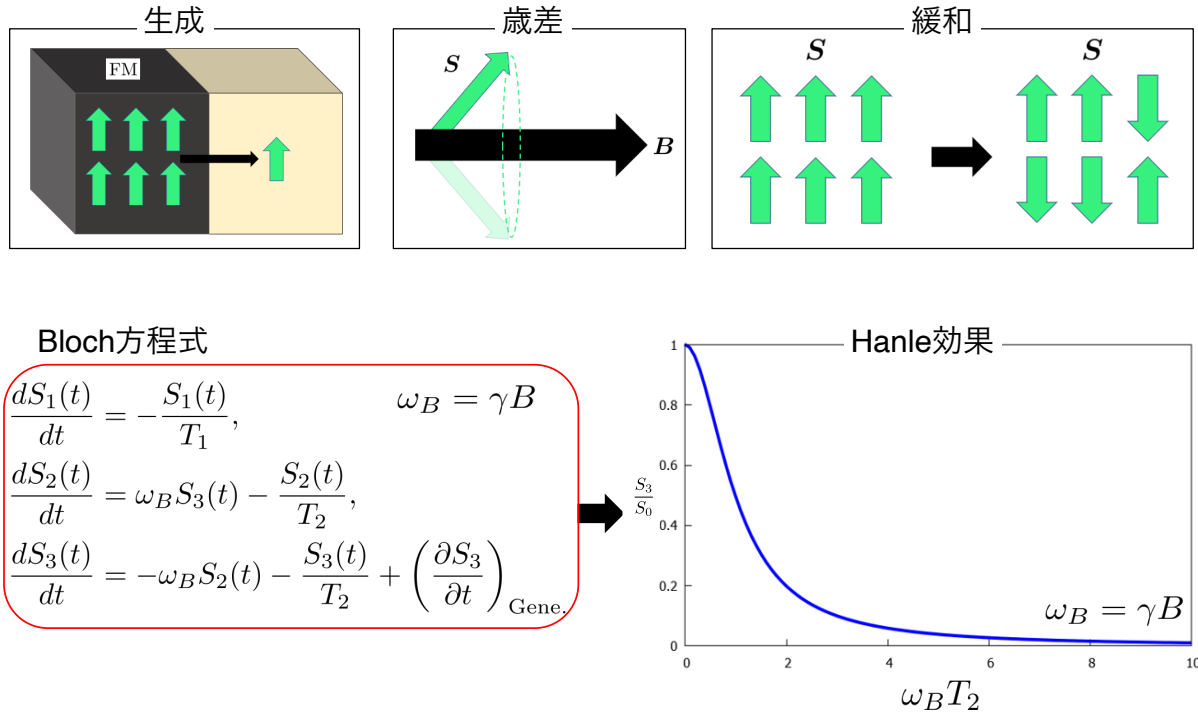


図 4.1: Hanle 効果の概念図. Hanle 効果はスピン偏極の緩和・歳差・生成の機構が存在するときのスピンダイナミクスを表す. 磁場ゼロでのスピン第三成分 S_3 の偏極を S_0 とした時, $\frac{S_3}{S_0}$ は磁場を換算した振動数 ω_B と横緩和時間 T_2 の積の関数として Lorentz 型の減衰曲線になる. この半値幅から T_2 を実験的に同定することができる.

は, 今の系のようにスピン流を二重量子井戸のそれぞれの層で逆向きに生じさせる必要がある. 仮に二重量子井戸のそれぞれの層で同じ向きにスピン流を生じさせた場合, 生成項が式 (4.3) の第 0 成分に現れる. しかし依然として ω_{SAS} による歳差は擬スピンの第 2 成分と第 3 成分を混ぜるので, このどちらかの成分に生成項が存在しない場合, スピン・擬スピン流の定常解は存在しない. また, 擬スピンの第 3 成分は, 左の井戸と右の井戸の期待値の差によって考えることができるが, 擬スピンの第 2 成分は実験と比較しやすい状況を作り出すことが難しい. 以上のことから, 本研究の系ではスピン流を各層で逆向きに生じさせる必要がある.

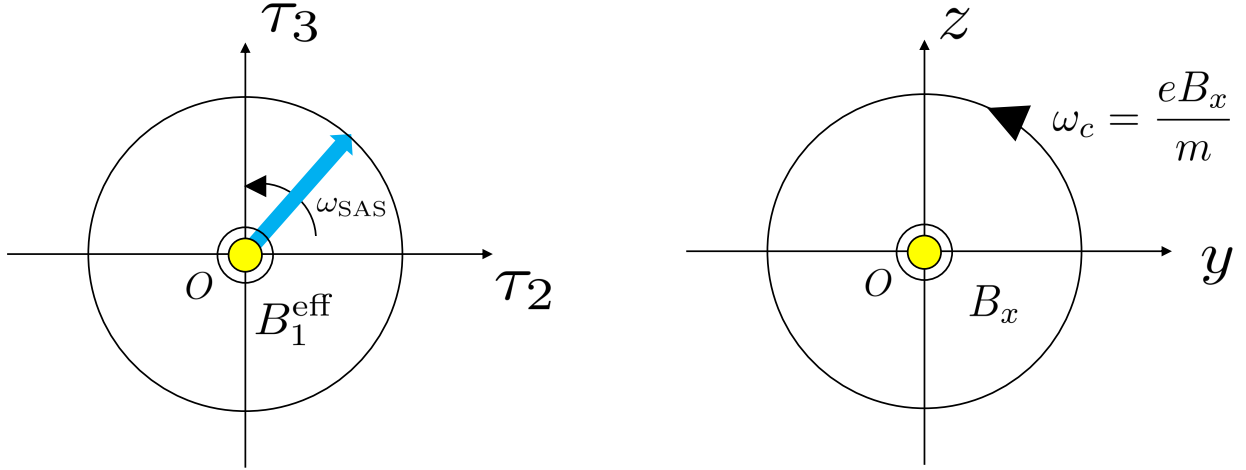


図 4.2: 本研究の歳差運動と磁場中における二次元電子系のサイクロトロン運動とのアナロジー．今、 $\Delta_{\text{SAS}} = \hbar\omega_{\text{SAS}}$ が擬スピンに働く磁場とみなせ、擬スピンは振動数 ω_{SAS} で歳差運動をする．また、磁場 $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_x$ 中の質量 m 、電荷の絶対値 e の荷電粒子は、サイクロトロン振動数 $\omega_c = \frac{eB}{m}$ で磁場の周りを歳差運動する．

4.1.2 交流電場の場合：サイクロトロン共鳴

簡単のため、 $\tau_p = \tau_l$ の場合を考え、さらにデコヒーレンスの機構を無視する．このときのスピン・擬スピンの運動方程式は次のようになる．

$$\begin{aligned}
 \frac{dj_y^{s0}(t)}{dt} &= -\tau_p^{-1} j_y^{s0}(t), \\
 \frac{dj_y^{s1}(t)}{dt} &= -\tau_p^{-1} j_y^{s1}(t), \\
 \frac{dj_y^{s2}(t)}{dt} &= \omega_{\text{SAS}} j_y^{s3}(t) - \tau_p^{-1} j_y^{s2}(t), \\
 \frac{dj_y^{s3}(t)}{dt} &= -\omega_{\text{SAS}} j_y^{s2}(t) - \tau_p^{-1} j_y^{s3}(t) + \tau_p^{-1} \frac{\sigma_3^{\text{SH}}}{1 - i\omega\tau_p} E_x e^{-i\omega t}
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

式 (4.6) はやはり Bloch 方程式と同形である．第 0 成分と第 1 成分は減衰解のみを持つが、第 2 成分と第 3 成分は ω_{SAS} の振動数で歳差運動をする．交流電場を印加した場合は、生成項が振動数 ω で振動しているため、 ω と ω_{SAS} が特定の関係を満たす場合に共鳴効果が生じると期待される．古典的にこの Bloch 方程式で記述される共鳴現象があることが知られていて、それは古典的なサイクロトロン共鳴である．古典的なサイクロトロン共鳴については付録において述べた．

サイクロトロン共鳴は、振動する電場によって電子が磁場中を運動する場合に生じる．電子は磁場による Lorentz 力で円運動を起こすが、その振動数 $\omega_c = \frac{eB}{m}$ と印加電場の振動数が一致した時に共鳴が起こる．今の系で磁場に対応するのは $\hbar\omega_{\text{SAS}}$ である図 4.2．第 2 成分と第 3 成分の間で歳差運動が起きるのは、 z 方向の運動を記述する $H_{\perp}$ の中に $\frac{\hbar\omega_{\text{SAS}}}{2}\hat{\tau}_1$ があるためである．このハミルトニアンは擬スピン空間の τ_1 方向に作用する磁場、すなわち擬磁場と考えることができる．一般に擬スピン τ_i を用いて表せる演算子は擬スピン空間における擬磁場であると考えることができる．擬磁場の周りに生じる擬スピンの歳差

運動は実空間の回転と対応しないが，サイクロトロン共鳴では実空間における速度の二成分が磁場の周りの歳差運動によって混ざり合うこと，スピン・擬スピン流の共鳴では τ_2 と τ_3 の二成分が歳差によって混ざり合うことが対応している．さらに，どちらの現象においても，不純物散乱による緩和率が競合する時間スケールになる．これは，どちらも電子の輸送現象を考えているためである．

第 5 章

スピン・擬スピン流の実験的観測方法

スピン・擬スピン流の観測方法について提案を行った後、直流電場を印加した場合のクロスオーバーの観測方法と、交流電場を印加したときの共鳴現象について議論する。

5.1 直流でのスピン・擬スピン流の発現・消失のクロスオーバー

まず、スピン・擬スピン流の観測方法について述べる。

まず最初の提案は単一量子井戸系で提案され、実際に実験が行われている“H バー”系における非局所測定を二層系の場合に拡張することを考える [55]。今，“H バー”系の左腕部に電場を印加すると、スピンホール効果によるスピン流が右腕部へ生じる。そして右腕部に生じたスピン流は逆スピンホール効果によって検出可能な電圧を右腕部に生じさせる。今は二重量子井戸のそれぞれの層で流れるスピン流の向きが逆なので、生じる電圧の大きさが正負逆転することが期待される。この検出方法は、近年実験的に示された反強磁性メモリの読み出し方法と本質的に共通する点がある [56]。この非局所測定はスピン流が各腕に辿り着く前に緩和してしまうと用いることができないが、近年このような実験を十分に行うことができるスピン拡散長の長い試料が実験的に観測されており [57, 58]、今後も材料の組み合わせ次第でさらに長いスピン拡散長が実現されると期待できる [59]。

次に、超微細相互作用による非平衡電子スピン蓄積によって生じる動的核スピン偏極（DNP）を利用する方法を考える。金属強磁性体から GaAs 量子井戸に注入されたスピン偏極した電子によって生成される DNP は実験的に観測されており [60]、また InGaAs 単結晶層において電流誘起電子スピン偏極によって生成される DNP の観測も実験的に成功している [61]。今の系では二重量子井戸の各層で逆符号のスピン偏極が試料の端に生じる。まずゲート電圧を印加して一方の層から電子を追い出し、もう片方の電子が占有している層の DNP を非局所的に観測すればよい [62, 63, 64]。ここで問題になるのは、DNP がこの実験時間の範囲で保たれるかであるが、核スピンは 1000 秒程度の長い緩和時間を持つため、ゲート電圧印加と電氣的検出による DNP の時間的減衰はごくわずかである。

続いて、スピン・擬スピン流のクロスオーバーにおいて ω_{SAS} と τ_p の競合を観測するための方法について述べる。スピン・擬スピン流は第 3 成分が実験と比較しやすく、またこの成分さえ求めれば第 1 成分、第 2 成分の振る舞いは理論式からわかることから、スピン・擬スピン流の第 3 成分を実験で観測すればよい。一つの試料で ω_{SAS} 、及び τ_p を変化させることは困難であるため、ポテンシャルオフセット $\hbar\omega_V$ の関数として、スピン・擬スピン流の伝導率 σ_{yx}^{S3} を観測する方法を考える。簡単のためデコヒーレンスの機

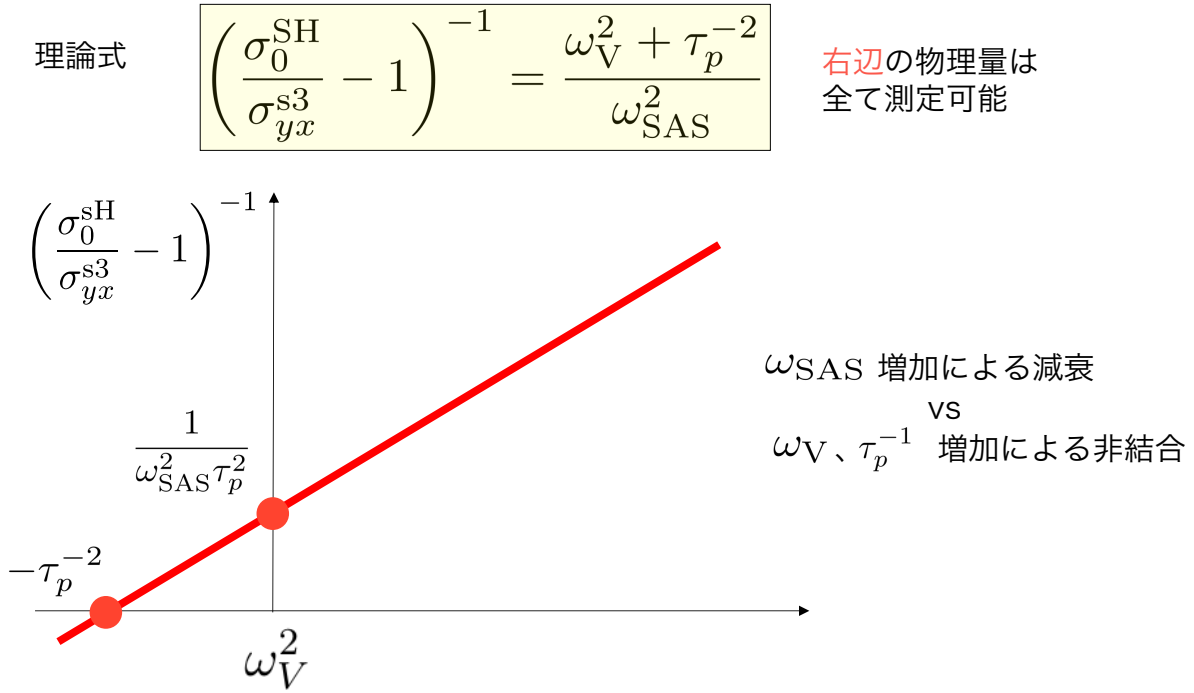


図 5.1: 式 (5.1) のプロットの概念図. ω_V^2 の関数として, 傾き ω_{SAS}^{-2} , 切片 $(\omega_{\text{SAS}}\tau_p)^{-2}$ の直線が得られる.

構を無視する. 式 (3.17) を変形すると, 次の式を得る.

$$\left(\frac{\sigma_3^{\text{SH}}}{\sigma_{yx}^{\text{s3}}} - 1 \right)^{-1} = \frac{1}{\omega_{\text{SAS}}^2} (\omega_V^2 + \tau_p^{-2}). \quad (5.1)$$

左辺の量を縦軸に, ω_V^2 の関数としてプロットすると, 勾配 $1/\omega_{\text{SAS}}^2$, かつ水平軸との切片が $-\tau_p^{-2}$ である直線になる. このように, ω_V についての依存性を観測することにより, クロスオーバーにおいて, ω_{SAS} と τ_p の競合を観測することが出来る (図 5.1).

5.2 交流でのスピン・擬スピン流の共鳴

次に, 交流電場の場合について議論する. 今の系では $\omega_{\text{SAS}}\tau_p = 1$ 程度の試料を考えている. 半導体量子井戸系では τ_p の典型的な値がおおよそ 0.1ps 程度であるが, 物質を選ぶことによって三桁ほど大きい試料も存在する. 今, $\tau_p = 1\text{ps}$ 程度の場合を考えここから $\hbar\omega_{\text{SAS}}$ の値を見積もると, $\hbar\omega_{\text{SAS}} = 1\text{ meV}$ 程度である. これは二重量子井戸の各層が 10nm 程度離れていれば達成でき, そのような試料は実際に作成可能である.

これを踏まえ, 交流電場を印加した時 $\omega\tau_p = 1$ 程度の値で伝導率の偏角や絶対値に大きな変化が現れるため, この場合の値を見積もると $\omega = 1\text{THz}$ 程度である. 波長に換算すると $300\mu\text{m}$ 程度である. このような電場はもはや光に近く試料よりも数桁大きいスケールで変化するため, 直流電場の場合に議論したように, “H バー” 系や DNP による観測は使えない. 従ってこの場合は, 二重量子井戸の各層に生じるスピン偏極を, 外部磁場を印加し Hanle 効果によって観測する方法が考えられる. この場合, Hanle 効果によるスピン偏極の測定が, 振動外場の振動数による時間 ps よりも早く観測ができなければいけないが, 近年の実験ではそれよりも早い時間スケールでスピン偏極を Hanle 効果によって観測したものが存在す

るため [65], 原理的に実験は可能であると考えられる.

第 6 章

結論と展望・課題

6.1 結論

本研究では、二重量子井戸の左層と右層にそれぞれ逆符号のポテンシャルを持つ不純物をドーピングし、外因性スピンホール効果の機構の一つである skew 散乱によるスピン流が左右の層で逆向きに流れる系を考えた。この反平行のスピンホール流はスピンを運ぶとともに、左右の層の基底状態の組みにより定義される二層の擬スピンを運ぶスピン・擬スピン流 $j_{\mu\nu}^{s\gamma}$ と見なすことができる。電子は左右の層を系の対称状態と反対称状態のエネルギー差 $\Delta_{\text{SAS}} = \hbar\omega_{\text{SAS}}$ で表される振動数 ω_{SAS} で歳差運動をする。また井戸の成長方向に電場を印加し、左右の井戸の基底状態の間に大きさ $\hbar\omega_V$ のポテンシャルオフセットを導入した。

スピン・擬スピン流は $\hbar\omega_{\text{SAS}}$ による歳差運動が激しくなると、 z 方向の電子状態は左右の逆方向のスピン流の効果を同時に感じてしまい、スピン・擬スピン流が消失することが考えられる。逆に歳差運動が穏やかな場合は、それぞれの層のスピン流だけを感じ、スピン流の大きさは一層系におけるスピン流の大きさと等しくなる。スピンホール効果によってこのスピン流が生成されるものの、スピン・擬スピン流の発現・消失のクロスオーバーが何で決まっているかは明らかになっていなかった。また、電子を駆動する電場が交流電場になった時、系にはすでに ω_{SAS} という固有の振動数が存在するため、外場の振動数 ω を変化させた時、 ω_{SAS} と ω が一致するタイミングで共鳴効果が起き、スピン・擬スピン流の大きさはある ω でピークをもつと期待される。しかし偏角の様子や、共鳴のタイプなどは明らかになっていなかった。

従って本研究では、電子を駆動する電場が直流の場合と振動数 ω の交流電場の場合それぞれについてスピン・擬スピン流を Boltzmann 方程式を用いて計算し、そのダイナミクスを調べた。ここで Boltzmann 方程式は擬スピンの非対角成分を考慮するため、密度行列の運動方程式から導出し、さらに擬スピンの間のデコヒーレンス機構も考慮した。

スピン・擬スピン流の運動方程式は、 $j_{\mu\nu}^{s\gamma}$ を変数にし、スピンの分野で Bloch 方程式と呼ばれる方程式と同じ形になった。今の方程式は、 $\hbar\omega_{\text{SAS}}$ による擬スピンの歳差機構、不純物との衝突やデコヒーレンスによる緩和機構、そしてスピンホール効果による生成機構の三つの部分からなることが明らかになった。

直流電場を印加した場合、生成機構が時間に依存しない。この場合、スピンの分野でよく知られている Hanle 効果が生じることが明らかになった。また、スピン・擬スピン流の発現・消失のクロスオーバーは、 ω_{SAS} と不純物散乱に由来する運動量緩和率 τ_p^{-1} 、寿命の逆数 τ_l^{-1} 、およびコヒーレンスの緩和率 τ_{ps}^{-1} との競合によって生じることが明らかになった。特に ω_{SAS} と運動量緩和率 τ_p^{-1} の競合を実験的に観測する場合は、ポテンシャルオフセット $\hbar\omega_V$ を導入し、 ω_V^2 の関数としてスピン・擬スピン流の伝導率を測定すれば良いことを明らかにした。スピン・擬スピン流の観測方法として、“H バー”系における実験、および DNP を用いた実験の提案を行った。

交流電場の場合、生成機構が時間に依存するようになる。この場合のスピン・擬スピン流の運動方程式は古典的なサイクロトロン共鳴の方程式と同じ形になる。サイクロトロン共鳴では磁場によるローレンツ力により電子の軌道運動が円軌道を描くようになるが、本研究の系では $\hbar\omega_{\text{SAS}}$ が擬スピンに働く磁場の効果であると解釈することができ、この振動数と外場の振動数が $\omega\tau_p = \sqrt{\omega_{\text{SAS}}^2\tau_p^2 - 1}$ の関係を満たす時にスピン・擬スピン流の伝導率の絶対値にピークが生じることが明らかになった。また偏角 θ は、 $\omega \rightarrow \infty$ の極限で、電流の場合の漸近値である $\frac{\pi}{2}$ を超え、 π に漸近していくことが明らかになった。これはスピン・擬スピン流の伝導率の実部が負の値になるという結果を与えるが、エントロピー生成が生じないので非物理的な結果ではない。また、異なる複数の $\omega_{\text{SAS}}\tau_p$ の値に対し偏角をプロットしたところ、 $\omega_{\text{SAS}}\tau_p$ が大きくなるにつれて、偏角が特定の値（例えば $\frac{\pi}{2}$ ）を取るために必要な ω の値も大きくなる。これはスピン・擬スピン流の伝導率が ω_{SAS} , ω , および τ_p^{-1} の相対的な比で決まっているためである。以上の結果は、擬スピンを通して電氣的にスピン流の大きさを制御できたことを意味する。交流効果を見るために必要な ω の値を見積もると、典型的な半導体量子井戸のパラメータを用いて約 1THz 程度の高周波数になる。この周波数を持つ電場の波長は約 $300\mu\text{m}$ 程度になり、この場合は直流電場で提案した観測方法を用いることができない。この場合はスピン・擬スピン流によって生じたスピン偏極を外部磁場を印加し Hanle 効果によって測定する方法が考えられる。原理的には交流振動数の THz よりも高い時間分解能でスピン偏極を Hanle 効果によって測定したという実験も存在し、原理的には実験によって測定可能であると考えられる。

6.2 今後の課題と展望

6.2.1 今後の課題

異なる時間スケールの競合でクロスオーバーが生じることが、他の様々な系におけるクロスオーバー現象に共通する。擬スピンが存在する電子系は、本研究の対象である二重量子井戸における電子系以外にも存在し、近年、グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイドなどの系で盛んに研究されている [6, 37, 38, 66]。これらの系には、運動量緩和時間などの時間スケールの他に、擬スピンのデコヒーレンス時間のような、擬スピンに固有な時間スケールが存在する。しかし、本研究では、擬スピンのデコヒーレンスは、数学的に導入したに過ぎず、その物理的な機構を明らかにすることは出来なかった。本研究の課題として、擬スピンのデコヒーレンス機構の物理的な理解が挙げられる。また、交流電場の場合は必要な振動数が THz 領域の電磁波になってしまうため、実験との比較を考える場合、素子構造や物質について適切な物質の組み合わせを考え、必要な振動数をさらに低周波にするといった提案をすることが望ましい。そこで今後の課題として、交流電場の場合について、実験方法や実際の物質の組み合わせなどを具体的に行うことが挙げられる。また、本研究の結果は擬スピンを通して電氣的にスピン流の大きさを制御できたことを意味するが、スピン流の大きさをオーダースケールで大きくすることはできなかった。スピン偏極を利用するためにはスピン偏極、ひいてはスピン流の大きさが大きくなることが望ましいので、そのような研究が今後行われることを期待している。

6.2.2 今後の展望

スピン物性では、Hanle 効果から、スピン緩和時間に代表されるような、重要な物理量の情報が得られる（包括的な報告が [1] にある。近年の報告では、たとえば [20, 21, 67, 68, 69, 70, 71, 72] がある）。本研究のように、擬スピンの運動を Hanle 効果としてとらえることは、擬スピンが関わる他の現象を研究す

る際に重要な指針を与えるものと期待される [6, 73, 74]. 擬スピン物性がどのような振る舞いを見せるのかについては、十分な議論がされているとはいいがたい. 特に、擬スピンの角運動量として働くか否かは重大な展開を見せることが期待される. 一般に、角運動量演算子 $\hat{J}_i$ は次の交換関係

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k \quad (6.1)$$

を満たすように定義される. 本研究で定義した擬スピン $\hat{\tau}_i$ も式 (6.1) を満たすため、角運動量である. 実際、 $|L\rangle, |R\rangle$ は $\hat{\tau}_3$ の固有状態であると同時に $\hat{\tau}^2 \equiv \hat{\tau}_1^2 + \hat{\tau}_2^2 + \hat{\tau}_3^2$ の固有状態でもあり、 $\hat{\tau}_{\pm} \equiv \hat{\tau}_1 \pm i\hat{\tau}_2$ を作用させると $\hat{\tau}_+|L\rangle = 0$, $\hat{\tau}_+|R\rangle = 2|L\rangle$, $\hat{\tau}_-|L\rangle = 2|R\rangle$, $\hat{\tau}_-|R\rangle = 0$ を満たし、 $|L\rangle$ が磁気量子数 $+\frac{1}{2}$, $|R\rangle$ が磁気量子数 $-\frac{1}{2}$ の状態に対応すると考えることができる. 角運動量演算子は無限小回転の生成子としても定義でき、今の τ_i は $|L\rangle, |R\rangle$ で張られる擬スピン空間における無限小回転の生成子になることが期待される. しかし本研究ではこの擬スピンの角運動量を実空間の回転と明確に関連づけるところまでには至らなかった. 擬スピン空間の偏極を実空間の角運動量として取り出す研究、例えばスピン角運動量を変化させるといったスピン・擬スピン相互変換は近年盛んに研究がなされているため、本研究もそのような視点に立ち見つけ直せば、スピン偏極を大きくできるような研究の進展につながることを期待される. まとめると、本研究のように、スピン物性と擬スピン物性を同時に利用する新奇現象を探索することが今後の課題である.

付録 A

密度行列

A.1 概要

まず一電子系の密度行列，及び多電子系の密度行列について説明する．その後，相互作用のない多電子系では相互作用のない多電子系における密度行列が定義でき，その対角成分 $\langle \mathbf{k} | \rho | \mathbf{k} \rangle = \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$ が電子の分布関数であることを示す．さらに相互作用表示の密度行列の運動方程式が，遷移確率と分布関数を用いて表せることを示す．

A.2 1 電子系

固有状態

$$H_0 |\varphi\rangle = E_\varphi |\varphi\rangle \quad (\text{A.1})$$

が既知とする． $|\varphi\rangle$ は完全系をなし，一般の状態 $|\psi\rangle$ は， $|\varphi\rangle$ の線形結合で表せる．

$$|\psi\rangle = \sum_{\varphi} c_{\varphi}(t) |\varphi\rangle. \quad (\text{A.2})$$

時間に依存するシュレーディンガー方程式から

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{\varphi}(t) = \sum_{\varphi'} H_{\varphi\varphi'} c_{\varphi'}(t). \quad (\text{A.3})$$

が成立する．ここで $H_{\varphi\varphi'} = \langle \varphi | H | \varphi' \rangle$ である．状態 $|\psi\rangle$ を用いて，物理量 A の量子力学的な期待値が計算できる．しかし実験では系の状態が常に同じ状態ベクトルで表されるとは限らない．実験ごとに異なる状態が選ばれる場合，複数の量子力学的な期待値を統計的に平均した値が実際に観測される物理量に対応する．ここで，物理量 A の統計平均を，次のように定義する．

$$\langle \langle \psi | A | \psi \rangle \rangle_{\text{av}} \equiv \sum_{\varphi\varphi'} A_{\varphi'\varphi} \langle c_{\varphi'}^*(t) c_{\varphi}(t) \rangle_{\text{av}}. \quad (\text{A.4})$$

ここで， $A_{\varphi'\varphi} = \langle \varphi' | A | \varphi \rangle$ は1つのハミルトニアンで記述できる量だが， $\langle c_{\varphi'}^*(t) c_{\varphi}(t) \rangle_{\text{av}}$ は統計平均が入っているので，1つのハミルトニアンでは記述できない．

ここで，1電子系における密度行列を式 (A.5) で定義する．

$$\rho_{\varphi\varphi'}^{\text{one}} \equiv \langle c_{\varphi'}^*(t) c_{\varphi}(t) \rangle_{\text{av}}. \quad (\text{A.5})$$

このとき、式 (A.4) は

$$\langle\langle\psi|A|\psi\rangle\rangle_{\text{av}} = \sum_{\varphi\varphi'} A_{\varphi'\varphi} \langle c_{\varphi'}^*(t)c_{\varphi}(t) \rangle_{\text{av}}, \quad (\text{A.6})$$

$$\sum_{\varphi\varphi'} \rho_{\varphi\varphi'}^{\text{one}} A_{\varphi'\varphi}, \quad (\text{A.7})$$

$$= \text{tr}[\rho^{\text{one}} A]. \quad (\text{A.8})$$

ここで $\text{tr}[X] = \sum_{\varphi} \langle\varphi|X|\varphi\rangle$ である。 ρ^{one} は一電子系の密度演算子と呼ばれる。密度演算子、その行列要素である密度行列が求まれば、状態間に相関がある場合において物理量の量子力学的、かつ統計的な期待値を求めることができる。

シュレーディンガー方程式から、 ρ^{one} が満たす方程式は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho^{\text{one}} = [H, \rho^{\text{one}}]. \quad (\text{A.9})$$

密度行列に対する運動方程式を量子リウヴィル方程式と呼ぶ。これはハイゼンベルグの運動方程式と符号が異なっている。また、状態が常に同じ状態しか選ばれない時を純粋状態と呼ぶが、純粋状態における一電子系の密度行列は、一電子系のシュレーディンガー方程式と同値である。従って密度行列から出発して量子力学を構成することも可能である。また、規格化条件は $\sum_{\varphi} |c_{\varphi}(t)|^2 = 1$ から $\text{tr}[\rho^{\text{one}}] = 1$ である。

A.3 多電子系

密度行列は異なる状態間の相関を取り入れた物理量である。この状態は、一電子系の状態に限らず多電子系の状態でもよい。 n 電子系の電子状態を以下のように表記する。

$$|\mathbf{n}\rangle = |\dots n_{\varphi} \dots\rangle. \quad (\text{A.10})$$

n_{φ} は $|\varphi\rangle$ の占有数で、フェルミオンの場合 $n_{\varphi} = 0, 1$ である。このような表示を占有数表示という。

N 電子系の状態ベクトルを $|\Psi\rangle$ とすると

$$|\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}}(t) |\mathbf{n}\rangle. \quad (\text{A.11})$$

ここで $\sum_{\varphi} n_{\varphi} = N$ を満たす。

多電子系でのシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \tilde{H} |\Psi\rangle \quad (\text{A.12})$$

の行列要素を考えると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{\mathbf{n}}(t) = \sum_{\mathbf{n}'} \tilde{H}_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} c_{\mathbf{n}'}(t). \quad (\text{A.13})$$

物理量 A の統計平均を、次のように定義する。

$$\langle\langle\Psi|A|\Psi\rangle\rangle_{\text{av}} = \sum_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} A_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} \langle c_{\mathbf{n}'}^*(t)c_{\mathbf{n}}(t) \rangle_{\text{av}}. \quad (\text{A.14})$$

多電子系の密度行列を、次のように定義する。

$$\tilde{\rho}_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} \equiv \langle c_{\mathbf{n}'}^*(t)c_{\mathbf{n}}(t) \rangle_{\text{av}}. \quad (\text{A.15})$$

このとき

$$\langle\langle\Psi|A|\Psi\rangle\rangle_{\text{av}} = \text{Tr}[\tilde{\rho}A]. \quad (\text{A.16})$$

ただし $\text{Tr}[X] = \sum_{\mathbf{n}} \langle\mathbf{n}|X|\mathbf{n}\rangle$ シュレーディンガー方程式から、 $\tilde{\rho}$ が満たす方程式は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\rho} = [H, \tilde{\rho}]. \quad (\text{A.17})$$

規格化条件は $\sum_{\mathbf{n}'} |c_{\mathbf{n}'}(t)|^2 = 1$ から $\text{Tr}[\tilde{\rho}] = 1$. 以上の定式化は一粒子系の密度行列の定義と全く平行である. ただし注意すべき点は, 物理量の統計平均を考える際に, 多電子系の状態を用いてトレースを取っていることである.

A.4 相互作用のない多電子系

相互作用がない多電子系の場合, 導かれる物理量の統計平均の値は, 直感的には一電子系の密度行列を N 倍したものであると考えられる. この場合, 密度行列に関して明確な物理的描像が得られる. 状態 $|\varphi\rangle$ による密度行列の対角要素が, 状態 $|\varphi\rangle$ のエネルギー準位に存在する電子の分布関数になる. 一般には密度演算子はエルミート演算子であり非対角要素が存在する. この非対角要素の物理的な描像は直感的には明らかではないが, 密度演算子の定義から, 異なる状態間のコヒーレンスを反映した, 電子の分布を表す量となる. 以下, これらの点について詳しく考察する.

相互作用のない多電子系における密度行列を次のように定義する [75].

$$\rho_{\varphi\varphi'} \equiv \text{Tr}[\tilde{\rho}a_{\varphi'}^\dagger a_{\varphi}]. \quad (\text{A.18})$$

ここで a_{φ} , $a_{\varphi'}^\dagger$ はフェルミオンに対する生成・消滅演算子である. 多電子系における物理量 A の統計平均は, (A.14) より

$$\begin{aligned} \langle\langle\Psi|A|\Psi\rangle\rangle_{\text{av}} &= \sum_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} A_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} \langle c_{\varphi'}^*(t) c_{\varphi}(t) \rangle_{\text{av}}, \\ &= \text{Tr}[\tilde{\rho}\tilde{A}], \\ &= \sum_{\varphi\varphi'} \left(\text{Tr}[\tilde{\rho}a_{\varphi'}^\dagger a_{\varphi}] \right) A_{\varphi'\varphi}, \\ &= \sum_{\varphi\varphi'} \rho_{\varphi\varphi'} A_{\varphi'\varphi}, \\ &= \sum_{\varphi} (\rho A)_{\varphi\varphi}, \\ &= \text{tr}[\rho A]. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

最後のトレースは一電子状態を用いたものである. すなわち相互作用のない多電子系における密度行列を用いると, 多電子系における物理量の統計平均が一電子の場合と同様に表せる.

ρ が満たす方程式は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [H, \rho]. \quad (\text{A.20})$$

規格化条件は $\text{tr}[\rho]$ を計算する.

$$\text{tr}[\rho] = \sum_{\varphi} \rho_{\varphi\varphi}, \quad (\text{A.21})$$

$$= \text{Tr} \left[\tilde{\rho} \sum_{\varphi} a_{\varphi}^{\dagger} a_{\varphi} \right], \quad (\text{A.22})$$

$$= N \text{Tr} [\tilde{\rho}], \quad (\text{A.23})$$

$$= N. \quad (\text{A.24})$$

さて, 相互作用のない多電子系における密度行列の対角成分は,

$$(\rho)_{\varphi\varphi} = \text{Tr} [\tilde{\rho} a_{\varphi}^{\dagger} a_{\varphi}]. \quad (\text{A.25})$$

$a_{\varphi}^{\dagger} a_{\varphi}$ は数演算子であるため, $\text{Tr} [\tilde{\rho} a_{\varphi}^{\dagger} a_{\varphi}]$ は準位 φ にある電子数の期待値の統計平均を表す. これは $|\varphi\rangle$ における平均電子数を意味するから, 分布関数の定義そのものである.

A.5 遷移確率

A.5.1 相互作用表示

密度行列 ρ の対角要素は分布関数を表す. 一体問題の場合, 分布関数の時間発展は, 状態 $|i\rangle$ から状態 $|f\rangle$ への遷移確率 W_{fi} と分布関数の積で表すことができる. 一体問題のシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_i(t)\rangle = (H_0 + V) |\psi_i(t)\rangle \quad (\text{A.26})$$

である. ここで H_0 は無摂動のハミルトニアンで, このハミルトニアンに対する固有方程式はすでに解けているものとし, $H_0 |n\rangle = E |n\rangle$ とする. また V は摂動ポテンシャルである. 今, 物理量の時間発展を記述するために, 相互作用表示を導入する. 今, シュレーディンガー表示における状態を $|\psi_i\rangle_S$, 相互作用表示における状態を $|\psi_i\rangle_I$ と表すと, これらの間の関係は次のように表される.

$$|\psi_i(t)\rangle_I = U_I(t, t_0) |\psi_i(t)\rangle_S, \quad (\text{A.27})$$

$$U_I(t, t_0) = \exp \left[i \frac{H_0}{\hbar} (t - t_0) \right]. \quad (\text{A.28})$$

$U_I(t, t_0)$ を相互作用表示における時間発展演算子と呼ぶ. 今, 摂動ポテンシャル V に対し

$$V_I(t) = U_I(t, t_0) V U_I^{\dagger}(t, t_0) \quad (\text{A.29})$$

を定義する. 今, 式 (A.27) を時間微分し整理すると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_i(t)\rangle_I = V_I(t) |\psi_i(t)\rangle_I \quad (\text{A.30})$$

を得る.

A.5.2 時間発展演算子の級数展開

ここで時刻 t における状態 $|\psi_i(t)\rangle_I$ は初期時刻 t_0 における状態 $|\psi_i(t_0)\rangle_I$ と

$$|\psi_i(t)\rangle_I = U_I(t, t_0) |\psi_i(t_0)\rangle_I \quad (\text{A.31})$$

という関係がある。\$|\psi_i(t_0)\rangle_I\$ は解けている状態であれば任意なので、時間発展演算子の時間発展方程式として

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0) \quad (\text{A.32})$$

を得る。この式を \$t_0\$ から \$t\$ まで時間積分する。\$t = t_0\$ で \$U_I(t_0, t_0) = 1\$ と初期条件を設定すると

$$U_I(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') U_I(t', t_0) \quad (\text{A.33})$$

である。ここで摂動がかかってから十分時間が経過したとすると状態は \$t_0\$ に依存しないため、任意の時刻に設定して良い。以下では \$t_0 \to -\infty\$ の場合を考える。式 (A.33) は逐次的に代入することにより、\$V_I\$ の次数ごとに展開できる。

$$U_I(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 V_I(t_1) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t dt_1 dt_2 V_I(t_1) V_I(t_2) + \dots \quad (\text{A.34})$$

A.5.3 T 行列

ここで、\$H_0\$ の固有状態 \$|i\rangle, |f\rangle\$ を用いて、これらの間の行列要素を考えると

$$\langle f|U_I(t)|i\rangle = \delta_{fi} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 \langle f|V_I(t_1)|i\rangle + \sum_n \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t dt_1 dt_2 \langle f|V_I(t_1)|n\rangle \langle n|V_I(t_2)|i\rangle + \dots \quad (\text{A.35})$$

ここで

$$\begin{aligned} \langle f|V_I(t_1)|n\rangle &= \exp\left[i\frac{E_f - E_n}{\hbar}t_1\right] \langle f|V|n\rangle, \\ \langle n|V_I(t_1)|i\rangle &= \exp\left[i\frac{E_n - E_i}{\hbar}t_1\right] \langle n|V|i\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

である。固有エネルギーについて \$H_0|f\rangle = E_f|f\rangle\$ などとした。行列要素 \$\langle f|V|n\rangle\$ などは時間依存性がないので、時間積分を行うことができる。ただし半無限系の積分なので、収束因子 \$e^{-\frac{\delta}{\hbar}t}\$ を挿入し時間積分を行う。\$\delta\$ は収束因子で、積分を実行後に \$\delta \to 0\$ の極限をとる。すると

$$\begin{aligned} \langle f|U_I(t)|i\rangle &= \delta_{fi} - \lim_{\delta \to 0} e^{i\frac{E_f - E_i}{\hbar}t} e^{-\frac{\delta}{\hbar}t} \left[\frac{\langle f|V|i\rangle}{E_f - E_i + i\delta} + \sum_m \frac{\langle f|V|m\rangle}{E_f - E_i + i\delta} \frac{\langle m|V|i\rangle}{E_m - E_i + i\delta} + \sum_{m,l} \dots \right], \\ &= \delta_{fi} - \lim_{\delta \to 0} \frac{e^{i\frac{E_f - E_i}{\hbar}t} e^{-\frac{\delta}{\hbar}t}}{E_f - E_i + i\delta} \left[\langle f|V|i\rangle + \sum_m \frac{\langle f|V|m\rangle \langle m|V|i\rangle}{E_m - E_i + i\delta} + \sum_{m,l} \dots \right], \\ &= \delta_{fi} - \lim_{\delta \to 0} \frac{e^{i\frac{E_f - E_i}{\hbar}t} e^{-\frac{\delta}{\hbar}t}}{E_f - E_i + i\delta} \langle f|T|i\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

ここで T 行列を、行列要素が

$$\langle f|T|i\rangle = \langle f|V|i\rangle + \sum_m \frac{\langle f|V|m\rangle \langle m|V|i\rangle}{E_m - E_i + i\delta} + \sum_{m,l} \dots \quad (\text{A.38})$$

である行列として定義した。

A.5.4 単位時間当たりの遷移確率

時刻 $t_0 (= -\infty)$ において状態 $|i\rangle$ にあった粒子が、時刻 t において $|i\rangle$ と異なる状態 $|f\rangle$ へと遷移する確率 P_{fi} は

$$P_{fi} = |\langle f|U_I(t)|i\rangle|^2 \quad (\text{A.39})$$

で与えられる。従って、単位時間当たりの遷移確率 W_{fi} は

$$W_{fi} \equiv \frac{d}{dt} |\langle f|U_I(t)|i\rangle|^2 \quad (\text{A.40})$$

と定義される。式 (A.37) を用いて遷移確率を計算すると

$$\begin{aligned} W_{fi} &= \frac{d}{dt} |\langle f|U_I(t)|i\rangle|^2, \\ &= \frac{d}{dt} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{e^{2\frac{\delta}{\hbar}t}}{(E_f - E_i)^2 + \delta^2} |\langle f|T|i\rangle|^2, \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{2}{\hbar} e^{2\frac{\delta}{\hbar}t} \frac{\delta}{(E_f - E_i)^2 + \delta^2} |\langle f|T|i\rangle|^2, \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|T|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

ここで

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\delta}{(E_f - E_i)^2 + \delta^2} = \pi \delta(E_f - E_i) \quad (\text{A.42})$$

を用いた。これより、一般に遷移確率は T 行列を用いて表せることがわかる。

A.6 密度行列の運動方程式

相互作用のない多電子系における密度行列 $\hat{\rho}$ を相互作用表示して時間微分することにより、分布関数の時間発展方程式を導出する。相互作用表示における相互作用のない多電子系における密度行列は

$$\hat{\rho}_I(t) = U_I(t) \hat{\rho} U_I^\dagger(t) \quad (\text{A.43})$$

であるから、この両辺を時間微分することによって次の式が得られる。

$$\frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [V_I, \hat{\rho}_I(t)]. \quad (\text{A.44})$$

これを時刻 $t_0 = -\infty$ から時刻 t まで積分すると

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}_I(-\infty) + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [V_I(t'), \hat{\rho}_I(t')]. \quad (\text{A.45})$$

ここも時間発展演算子の級数展開と同じように逐次代入をしていくと

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}_I(-\infty) + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 [V_I(t_1), \hat{\rho}_I(-\infty)] + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 [V_I(t_1), [V_I(t_2), \hat{\rho}_I(-\infty)]] + \dots \quad (\text{A.46})$$

が得られる．これより，密度行列の運動方程式は

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} = & \frac{1}{i\hbar} [V_I(t), \hat{\rho}_I(-\infty)] + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 [V_I(t), [V_I(t_1), \hat{\rho}_I(-\infty)]] + \dots \\ & + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^{n+1} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n [V_I(t), [V_I(t_1), [V_I(t_2), \dots [V_I(t_n), \hat{\rho}_I(-\infty)]] \dots]] + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

という無限級数で表される．

A.7 分布関数の時間変化と遷移確率

相互作用のない多電子系における密度行列で，一電子系を考える．今， H_0 の固有状態 $|f\rangle$ を用いて式 (A.47) の期待値を計算すると

$$\begin{aligned} \left\langle f \left| \frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} \right| f \right\rangle = & \frac{1}{i\hbar} \langle f | [V_I(t), \hat{\rho}_I(-\infty)] | f \rangle + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \langle f | [V_I(t), [V_I(t_1), \hat{\rho}_I(-\infty)]] | f \rangle + \dots \\ & + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^{n+1} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \langle f | [V_I(t), [V_I(t_1), [V_I(t_2), \dots [V_I(t_n), \hat{\rho}_I(-\infty)]] \dots]] | f \rangle \\ & + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

ここで式 (A.48) は

$$\left\langle f \left| \frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} \right| f \right\rangle = F_f \langle f | \hat{\rho} | f \rangle + \sum_{j \neq f} G_{fj} \langle j | \hat{\rho} | j \rangle \quad (\text{A.49})$$

と変形することができる．ここで F_f は密度行列 $\hat{\rho}_I(-\infty)$ と摂動ポテンシャル $V_I(t)$ の交換関係を計算した時の積について $\hat{\rho}_I(-\infty)$ が右端，もしくは左端にある項の和であり， G_{fj} は積の途中に $\hat{\rho}_I(-\infty)$ がある項の和である．この F_f ， G_{fj} が単位時間当たりの遷移確率を用いて表せることを示す．

今， $i \neq f$ である状態 $|i\rangle$ に対し，

$$\langle i | \hat{\rho} | i \rangle = 1 \quad (\text{A.50})$$

であると仮定する．すると

$$\left\langle f \left| \frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} \right| f \right\rangle = G_{fi} \langle i | \hat{\rho} | i \rangle = G_{fi} \quad (\text{A.51})$$

ここで， $|f\rangle$ は H_0 の固有状態であることと，式 (A.5) から

$$\begin{aligned} \left\langle f \left| \frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} \right| f \right\rangle &= \frac{d}{dt} \langle f | \hat{\rho}(t) | f \rangle = \frac{d}{dt} \langle c_f^*(t) c_f(t) \rangle, \\ &= \frac{d}{dt} \langle f | U_I(t) | i \rangle, \\ &= W_{fi} \end{aligned} \quad (\text{A.52})$$

従って $G_{fi} = W_{fi}$ である．

ここで一電子系の密度行列であるから $\text{tr}[\rho] = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \hat{\rho} | \alpha \rangle = 1$ である．したがってこのとき間微分は常に 0 になる．これは電子数保存則を表している．今，式 (A.49) で状態 $|f\rangle$ について話をとると，

$$\sum_f F_f \langle f | \hat{\rho} | f \rangle + \sum_f \sum_{j \neq f} W_{fj} \langle j | \hat{\rho} | j \rangle = \sum_f \left\langle f \left| \frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} \right| f \right\rangle = \frac{d}{dt} \sum_f \langle f | \hat{\rho} | f \rangle = 0 \quad (\text{A.53})$$

ここで $\sum_f \sum_{j \neq f} W_{fj} \langle j | \hat{\rho} | j \rangle$ について， j と f の添字はダミーであり，これらを入れ替えても式は等価である．また， j を改めて i と表記すると，

$$\sum_f \sum_{i \neq f} W_{fi} \langle i | \hat{\rho} | i \rangle = \sum_i \sum_{f \neq i} W_{if} \langle f | \hat{\rho} | f \rangle \quad (\text{A.54})$$

これより

$$\sum_f \left[F_f + \sum_{i \neq f} W_{if} \right] \langle f | \hat{\rho} | f \rangle = 0 \quad (\text{A.55})$$

一般に $\langle f | \hat{\rho} | f \rangle \neq 0$ であるから，このとき全ての f について

$$F_f = - \sum_{i \neq f} W_{if} \quad (\text{A.56})$$

である．以上より，式 (A.49) は

$$\left\langle f \left| \frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} \right| f \right\rangle = \sum_{i \neq f} [W_{fi} \langle i | \hat{\rho} | i \rangle - W_{if} \langle f | \hat{\rho} | f \rangle] \quad (\text{A.57})$$

と表せる． $W_{fi} \langle i | \hat{\rho} | i \rangle$ は $|f\rangle$ と異なる状態 $|i\rangle$ が摂動ポテンシャルによって状態 f に遷移する流入の効果を表す．また $-W_{if} \langle f | \hat{\rho} | f \rangle$ は元々 $|f\rangle$ にいた状態が摂動によって他の状態 $|i\rangle$ に遷移する流出の効果を表す．従って，一般に状態 $|f\rangle$ における分布関数の時間変化は式 (A.57) で与えられる．以上の議論は文献 [75] によって行われたものを参考にした．

単位時間当たりの遷移確率 W_{fi} などは摂動ポテンシャルを具体的に選んで式 (A.41) を計算すれば良い．本研究では摂動ポテンシャルを不純物によるポテンシャルと，不純物ポテンシャルによるスピン軌道相互作用に選ぶ．また，T 行列は一般に摂動ポテンシャルについて無限次までの効果を含むが，これを有限次元で打ち切るという近似を行い遷移確率を計算する．本研究で現れる遷移確率の具体的な表式は，G 節で計算する．

付録 B

グラフェンのバレースピン

原子層物質グラフェンは、実空間の副格子擬スピンだけでなく、波数空間において電子が K 点にいるか K' 点にいるかという自由度を擬スピンと扱った、バレー擬スピンが存在する。バレーというのは“谷”という意味であり、低エネルギー領域で K 点、K' 点近傍のエネルギーバンド構造を反映したものになっている。以下では参考文献 [76] に従い、グラフェンの電子状態について簡潔に記述し、グラフェンのバレースピンについて簡潔に述べる。

B.1 ハニカム格子系の電子状態

グラフェンの単位胞内には 2 つの炭素原子を含み、互いに基本格子ベクトルの整数倍の並進運動で移り変わることはできない。そのためこの 2 つの原子を A 原子、B 原子と呼び区別する (図 B.1)。ここでハニカム格子の基本並進ベクトルを

$$\mathbf{a}_1 = [a, 0], \quad (\text{B.1})$$

$$\mathbf{a}_2 = \left[\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2} \right] \quad (\text{B.2})$$

とする。今、B 原子から最近接の A 原子へ移動するベクトルを $\boldsymbol{\tau}_i (i = 1, 2, 3)$ とし、それぞれ

$$\boldsymbol{\tau}_1 = \left[0, \frac{a}{\sqrt{3}} \right], \quad (\text{B.3})$$

$$\boldsymbol{\tau}_2 = \left[-\frac{a}{2}, -\frac{a}{2\sqrt{3}} \right], \quad (\text{B.4})$$

$$\boldsymbol{\tau}_3 = \left[\frac{a}{2}, -\frac{a}{2\sqrt{3}} \right] \quad (\text{B.5})$$

である。今、A 原子に強く束縛された状態を $|\phi_A\rangle$ 、B 原子に強く束縛された状態を $|\phi_B\rangle$ とする。系は並進対称性を持つのでブロッホの定理が成立する。A 原子のブロッホ状態を $|\psi_{\mathbf{k}}^A\rangle$ 、B 原子のブロッホ状態を $|\psi_{\mathbf{k}}^B\rangle$ とし、これらの線型結合で系の固有状態を $|\psi\rangle$ を表す。すなわち

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= C_A |\psi_{\mathbf{k}}^A\rangle + C_B |\psi_{\mathbf{k}}^B\rangle, \\ |\psi_{\mathbf{k}}^A\rangle &= \sum_{\mathbf{R}_A} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_A} |\phi_A\rangle, \\ |\psi_{\mathbf{k}}^B\rangle &= \sum_{\mathbf{R}_B} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_B} |\phi_B\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

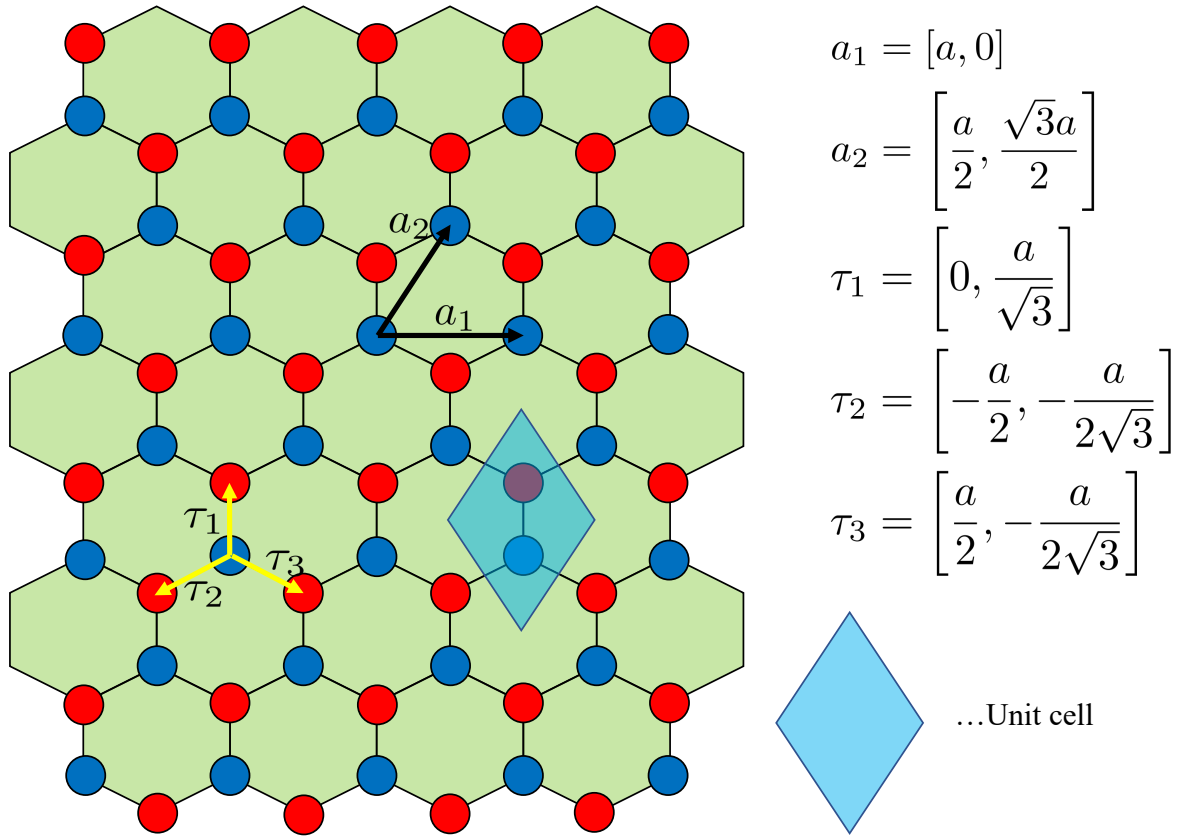


図 B.1: グラフェンの格子構造. a は格子定数であり, 0.246nm である. 赤い丸は A 副格子の炭素原子を表し (以下, A 原子と記述する), 青い丸は B 副格子の炭素原子を表す (以下, B 原子と記述する). $\mathbf{a}_1$ と $\mathbf{a}_2$ は基本格子ベクトルであり, $\tau_i (i = 1, 2, 3)$ は B 原子から最近接の A 原子への変位ベクトルを表す. 単位方内に, A 原子と B 原子が一つずつ存在する.

ここで $\mathbf{R}_A$, $\mathbf{R}_B$ はそれぞれ A 原子, B 原子の位置を表す格子ベクトルである. シュレーディンガー方程式 $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ に対し, $\langle\psi_{\mathbf{k}}^A|$, $\langle\psi_{\mathbf{k}}^B|$ など作用し整理すると

$$\begin{bmatrix} 0 & -\gamma_0 f(\mathbf{k}) \\ -\gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_A \\ C_B \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} C_A \\ C_B \end{bmatrix} \quad (\text{B.7})$$

を得る. ここで対角要素はエネルギーの基準点なのでこれを 0 にとり, 電子の飛び移りは最近接原子間の飛び移りのみを考慮した. γ_0 は飛び移り積分であり, その大きさは 2.6eV 程度である. また $f(\mathbf{k})$ は電子が最近接原子に飛び移った時に付加される位相因子であり,

$$f(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_i} \quad (\text{B.8})$$

である. 固有エネルギーは解析的に求まり

$$\begin{aligned} E &= \pm \gamma_0 |f(\mathbf{k})| = s \gamma_0 |f(\mathbf{k})| \\ &= s \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos^2 \frac{ak_x}{2} + 4 \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}ak_y}{2}}, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

ここで s は ± 1 を表し, $+$ の符号を取った場合が伝導帯のバンド, $-$ の符号を取った場合が価電子帯のバンドを表す. ここでブリュアンゾーンの Γ 点から K 点へと向かうベクトルを $\mathbf{K}$, および Γ 点から K' 点へと向かうベクトルを $\mathbf{K}'$ とすると

$$\begin{aligned}\mathbf{K} &= \frac{2\pi}{a} \left[\frac{1}{3}, \frac{1}{\sqrt{3}} \right], \\ \mathbf{K}' &= \frac{2\pi}{a} \left[\frac{2}{3}, 0 \right]\end{aligned}\tag{B.10}$$

であり, これらの座標において固有エネルギーは $E = 0$ となり, 伝導帯のバンドと価電子帯のバンドが厳密に接している. この近傍ではエネルギーが波数空間で円錐状に広がっている. 伝導帯の底は谷のように沈み込んでいることから, この自由度をバレー自由度と呼ぶ.

付録 C

有効質量近似

C.1 概要

III – V 族半導体中の電子を念頭に置き、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論による伝導帯の電子の有効質量方程式と、半導体中のスピン軌道相互作用について簡潔に述べる。

C.2 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動

周期ポテンシャル中の電子の実空間シュレーディンガー方程式を次のように表す。

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\mathbf{r}) \right], \quad (C.1)$$

$$H\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

ここで n はバンド指標、 $\mathbf{k}$ は結晶波数である。 $\mathbf{R}$ を格子ベクトルとしてポテンシャル $U(\mathbf{r})$ は $U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$ を満たし、またブロッホ状態 $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は

$$\begin{aligned} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \\ u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (C.2)$$

である。今、 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ に $\mathbf{k} = 0$ のものを選び、それを $\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | n\mathbf{k} \rangle$ とする。

$$\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n0}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (C.3)$$

$\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は正規完全直行系をなす。

ここで格子ベクトルよりも十分大きい長さで変化するポテンシャル $V(\mathbf{r})$ の元での運動を考える。この系の波動関数を $\psi(\mathbf{r})$ とすると、 $\psi(\mathbf{r})$ は $\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ を用いて展開できる。

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n', \mathbf{k}'} C_{n'}(\mathbf{k}') \varphi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}). \quad (C.4)$$

ここで H に $\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ を作用させると

$$H\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar \frac{\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{m} \right] \varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (C.5)$$

$|n\mathbf{k}\rangle$ を用いて表すと

$$\langle n\mathbf{k} | H | n'\mathbf{k}' \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left\{ \left[E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] \delta_{nn'} + \hbar \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'}}{m} \right\} \quad (C.6)$$

ここで $\mathbf{p}_{nn'} = \langle n | \hat{\mathbf{p}} | n' \rangle$ と表した．この対角要素は

$$\mathbf{p}_{nn} = \frac{m}{\hbar} \frac{\partial E_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \quad (\text{C.7})$$

であり， $\mathbf{k} = 0$ で行列要素の値は 0 である．

格子ベクトルよりも十分ゆっくり変化するポテンシャル $V(\mathbf{r})$ の行列要素は

$$\langle n\mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | n'\mathbf{k}' \rangle \simeq \delta_{nn'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{C.8})$$

である．ここで $V(\mathbf{r})$ が単位胞程度の長さでは定数とみなせる近似をして，さらに $V(\mathbf{r})$ の Fourier 変換 $V(\mathbf{k})$ を次のように定義した．

$$\begin{aligned} V(\mathbf{k}) &= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}), \\ V(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} V(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

H に $V(\mathbf{r})$ を加えたときの系のエネルギーを E とする．波数空間におけるシュレーディンガー方程式は

$$\left[E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] X_n(\mathbf{k}) + \sum_{n' \neq n} \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'}}{m} X_{n'}(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') X_n(\mathbf{k}') = E X_n(\mathbf{k}) \quad (\text{C.10})$$

ここで $X_n(\mathbf{k})$ は，適当な基底関数を $Y_n(\mathbf{k})$ として

$$X_n(\mathbf{k}) = \sum_{n'} -\frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'}}{m} [E_{n0} - E_{n'0}]^{-1} (1 - \delta_{nn'}) Y_{n'}(\mathbf{k}) \quad (\text{C.11})$$

と仮定する．この時

$$\sum_{n' \neq n} \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'}}{m} X_{n'}(\mathbf{k}) = \sum_{n' \neq n, n''} \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'}}{m} \left[-\frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{n'n''}}{m} \frac{1}{E_{n'0} - E_{n''0}} \right] Y_{n''}(\mathbf{k}) \quad (\text{C.12})$$

ここで注目している n 番目のバンドが他のバンドから離れているとして $n'' = n$ の寄与のみを考える．この近似を有効ハミルトニアンの方法と呼ぶ．すると結局

$$\sum_{n' \neq n} \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'}}{m} X_{n'}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha\beta} \frac{\hbar^2 k_\alpha k_\beta}{m^2} \sum_{n' \neq n} \left[\frac{p_{nn'\alpha} p_{n'n\beta}}{E_{n0} - E_{n'0}} \right] Y_{n''}(\mathbf{k}) \quad (\text{C.13})$$

以上より基底 $Y_{n\mathbf{k}}$ に対するシュレーディンガー方程式は

$$\left[E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\hbar^2 k_\alpha k_\beta}{m^2} \sum_{n' \neq n} \frac{p_{nn'\alpha} p_{n'n\beta}}{E_{n0} - E_{n'0}} \right] + \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') Y_n(\mathbf{k}') = E Y_n(\mathbf{k}) \quad (\text{C.14})$$

ここで

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}^*} = \frac{1}{m} \left[\delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{m} \sum_{n' \neq n} \frac{p_{nn'\alpha} p_{n'n\beta}}{E_{n0} - E_{n'0}} \right] \quad (\text{C.15})$$

として有効質量テンソルを定義し，さらに

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = E_{n0} + \sum_{\alpha\beta} \frac{\hbar^2 k_\alpha k_\beta}{2m_{\alpha\beta}^*} \quad (\text{C.16})$$

と表記すると

$$\varepsilon_n(\mathbf{k})Y_n(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')Y_n(\mathbf{k}') = EY_n(\mathbf{k}) \quad (\text{C.17})$$

である。さらに

$$\mathbf{F}_n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} Y_n(\mathbf{k}) \quad (\text{C.18})$$

として包絡関数を定義すると

$$[\varepsilon_n(-i\hbar\nabla) + V(\mathbf{r})] \mathbf{F}_n(\mathbf{r}) = E\mathbf{F}_n(\mathbf{r}) \quad (\text{C.19})$$

が成立する。これを有効質量方程式と呼ぶ。本論中の xy 平面の運動は有効質量近似を仮定している。すなわち xy 方向の波動関数は式 (C.19) の包絡関数 $\mathbf{F}_n(\mathbf{r})$ を表しているが、 xy 平面の無摂動のハミルトニアンは自由粒子のハミルトニアンであるため、包絡関数を平面波 $|\mathbf{k}\rangle$ で表している。

C.3 Kane 模型

III-V 族半導体ではブリュアンゾーンの Γ 点付近でエネルギーバンドの極小点と極大点が存在する。この点の周りをうまく記述できるくらいの少数の基底をとり、有効質量方程式を求める [77, 78, 79]。このようなモデルを Kane モデルと呼ぶ。この節の議論は特に文献 [77] による議論を参考にした。スピン軌道相互作用がある場合は、軌道角運動量 $|l, l_z\rangle$ の状態とスピン角運動量 $|s, s_z\rangle$ の状態が混成する。スピン角運動量演算子の場合と同様に、軌道角運動量演算子 $\hat{l}$ は

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{l}_k \quad (\text{C.20})$$

を満たすように定義され、 $\hat{l}_i$ は $\hat{l}^2 \equiv \hat{l}_1^2 + \hat{l}_2^2 + \hat{l}_3^2$ と交換するので同時固有状態を持つ。通常 $\hat{l}^2$ と $\hat{l}_3 = \hat{l}_z$ の同時固有状態を考え、これを $|l, l_z\rangle$ と表すと

$$\begin{aligned} \hat{l}^2 |l, l_z\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, l_z\rangle, \\ \hat{l}_z |l, l_z\rangle &= \hbar l_z |l, l_z\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

という関係がある。軌道角運動量の場合は $l = 0, 1$ であり、 $l = 0$ の時 $l_z = 0$ のみ、 $l = 1$ の時 $l_z = +1, 0, -1$ である。伝導帯の状態は軌道角運動量 $l_z = 0$ の s 軌道と同じ対称性を持つ状態であり、これを $|S\rangle$ と表す。また価電子帯の状態は $l_z = 1$ の p 軌道と同じ対称性を持つ状態のみを考え、それぞれ $|X\rangle$, $|Y\rangle$, $|Z\rangle$ で表す。これらの状態を $|l, l_z\rangle$ の表記を用いて表すと

$$\begin{aligned} |S\rangle &= |0, 0\rangle, \\ |X\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1\rangle - |1, -1\rangle), \\ |Y\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}} (|1, 1\rangle + |1, -1\rangle), \\ |Z\rangle &= |1, 0\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

である。状態の間の位相因子はクレブシュ・ゴルダン係数に基づき決めた。スピン角運動量演算子とその状態については 1.1.4 節で述べた。今、スピン角運動量演算子 $\hat{\sigma}_3 = \hat{\sigma}_z$ の固有状態を $\hat{\sigma}_z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$,

$\hat{\sigma}_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$ と表記する．スピン軌道相互作用がある場合，角運動量の状態は合成された $|l, s, j, j_z\rangle$ で表されるようになる．ここで角運動量合成によって生じうる状態は全部で 8 状態であり，それぞれ

$$\begin{aligned}
\left|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle &= |S\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \\
\left|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle &= |S\rangle \otimes |\downarrow\rangle, \\
\left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (|X\rangle + i|Y\rangle) \otimes |\uparrow\rangle, \\
\left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{6}} (|X\rangle + i|Y\rangle) \otimes |\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \\
\left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|X\rangle - i|Y\rangle) \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z\rangle \otimes |\downarrow\rangle, \\
\left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|X\rangle - i|Y\rangle) \otimes |\downarrow\rangle, \\
\left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{3}} (|X\rangle + i|Y\rangle) \otimes |\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |Z\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \\
\left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{3}} (|X\rangle - i|Y\rangle) \otimes |\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z\rangle \otimes |\downarrow\rangle
\end{aligned} \tag{C.23}$$

である．これらを基底にして有効質量方程式を書き下す．伝導帯の基底に対する係数を 2 行のベクトルとして $\mathbf{F}_c$ と表す．また，価電子帯の基底に対する係数を 6 行のベクトルとして $\mathbf{F}_v$ と表すと，有効質量方程式は

$$\begin{bmatrix} H_{cc} & H_{cv} \\ H_{vc} & H_{vv} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{F}_c \\ \mathbf{F}_v \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \mathbf{F}_c \\ \mathbf{F}_v \end{bmatrix} \tag{C.24}$$

となる．ここで H_{cc} は 2×2 の行列， H_{cv} は 2×6 の行列， H_{vc} は H_{cv} の複素共役転置行列， H_{vv} は 6×6 の行列である [80]．式 (C.24) を形式的に書き直し，

$$H_{cc}\mathbf{F}_c + H_{cv}\mathbf{F}_v = E\mathbf{F}_c, \tag{C.25}$$

$$H_{vc}\mathbf{F}_c + H_{vv}\mathbf{F}_v = E\mathbf{F}_v \tag{C.26}$$

式 (C.26) から

$$\mathbf{F}_v = (EI_{6 \times 6} - H_{vv})^{-1} H_{vc}\mathbf{F}_c \tag{C.27}$$

ここで $I_{6 \times 6}$ は 6×6 の単位行列である．式 (C.27) を式 (C.25) に代入し

$$\left[H_{cc} + H_{cv}(EI_{6 \times 6} - H_{vv})^{-1} H_{vc} \right] \mathbf{F}_c = E\mathbf{F}_c \tag{C.28}$$

をといて， $\mathbf{F}_c$ について閉じた方程式を得る．しかし方程式の左辺に求めるべき固有エネルギー E が存在するため，この方程式は非線型の方程式であり，解析的な解を得るためには何らかの近似を課す必要がある．

C.4 Rashba スピン軌道相互作用

今，簡単のため有効質量方程式を $|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ ， $|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ ， $|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ ， $|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ の四つの基底に限定し有効質量方程式を具体的に考えることにする．今，伝導帯の底のエネルギーを E_c ，価電子帯の

頂上のエネルギーを E_v とし、さらに $E_c - E_v = E_g$ とする．また、今電子が z 方向に閉じ込められているとして、伝導帯の状態に働くポテンシャルを $U_c(z)$ 、価電子帯の電子に働くポテンシャルを $U_v(z)$ とする．今、固有状態を $|\psi\rangle = F_c^+ |0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + F_c^- |0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + F_v^+ |1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + F_v^- |1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ とし有効質量方程式 (??) を書き下すと次のようになる．

$$\begin{bmatrix} E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_c(z) & 0 & -i\gamma\hat{k}_z & -i\gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) \\ 0 & E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_c(z) & -i\gamma(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) & i\gamma\hat{k}_z \\ i\gamma\hat{k}_z & i\gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) & E_v - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_v(z) & 0 \\ i\gamma(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) & -i\gamma\hat{k}_z & 0 & E_v - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_v(z) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_c^+ \\ F_c^- \\ F_v^+ \\ F_v^- \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} F_c^+ \\ F_c^- \\ F_v^+ \\ F_v^- \end{bmatrix} \quad (C.29)$$

ここで $\gamma = -i\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{\hbar}{m}\langle S|\hat{p}_i|X\rangle$ で定義したパラメータであり、実験や第一原理計算との比較によって定められる．また $\Delta > 0$ は価電子帯において $j = \frac{3}{2}$ のバンドと $j = \frac{1}{2}$ のバンドのスピンスplitである．式 (C.29) の対角要素から $\frac{E_c + E_v - \Delta}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ を差し引くと

$$\begin{bmatrix} \frac{E_g + \Delta}{2} + U_c(z) & 0 & -i\gamma\hat{k}_z & -i\gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) \\ 0 & \frac{E_g + \Delta}{2} + U_c(z) & -i\gamma(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) & i\gamma\hat{k}_z \\ i\gamma\hat{k}_z & i\gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) & -\frac{E_g + \Delta}{2} + U_v(z) & 0 \\ i\gamma(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) & -i\gamma\hat{k}_z & 0 & -\frac{E_g + \Delta}{2} + U_v(z) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_c^+ \\ F_c^- \\ F_v^+ \\ F_v^- \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} F_c^+ \\ F_c^- \\ F_v^+ \\ F_v^- \end{bmatrix} \quad (C.30)$$

この式を元に、式 (C.28) を得たときと同様の手続きをすると

$$\left[\frac{E_g + \Delta}{2} + U_c(z) - \gamma^2 (\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \frac{1}{E + \frac{E_g + \Delta}{2} - U_v(z)} (\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \right] \mathbf{F}_c = E \mathbf{F}_c \quad (C.31)$$

を得る．ここで $\mathbf{F}_c = \begin{bmatrix} F_c^+ \\ F_c^- \end{bmatrix}$ であり、 $\hat{\sigma}_i$ はパウリ行列である．ここで非線型方程式 (C.31) の左辺において、 $E = \frac{E_g + \Delta}{2}$ と置き換える近似をする．また xy 方向には平面波の状態を考え、 $\hat{k}_z$ のみが波数に関連する演算子として方程式を整理すると

$$\left[\frac{E_g + \Delta}{2} + U_c(z) - \gamma^2 \frac{1}{E_g + \Delta - U_v(z)} (\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 + i\gamma^2 \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{E_g + \Delta - U_v(z)} \hat{\sigma}_z (\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \right] \mathbf{F}_c = E \mathbf{F}_c \quad (C.32)$$

面内成分のみを考えて方程式を整理すると、式 (C.32) の左辺第 3 項からはスピンに依存する成分は現れず、単に有効質量に対する補正を与える．左辺第 4 項からもスピンに依存しない成分が現れるが、これはやはり有効質量に対する補正を与え、そしてさらにスピンに依存する成分が現れる．このスピンに依存する成分がスピン軌道相互作用のハミルトニアンである．そのハミルトニアンの形は、係数を $\alpha(z)$ として

$$H_R^{\text{so}} = \alpha(z)(\hat{\sigma}_x k_y - \hat{\sigma}_y k_x) \quad (C.33)$$

となる．これを Rashba のスピン軌道相互作用と呼ぶ． $\alpha(z)$ は z 方向への微分を含んでいる演算子であり、 z 方向の状態で期待値を取ることによって値が確定する．ここでの導出は基底を伝導帯の 2 状態と価電子帯の状態のうち $j = \frac{1}{2}$ の 2 状態に制限した導出である．C.3 説で議論したように、III-V 族半導体の $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ 摂動は 8 状態による模型が考えられており、 $j = \frac{3}{2}$ の状態からの寄与も含めて有効質量方程式が計算されている．その場合、Rashba のスピン軌道相互作用の係数 $\alpha(z)$ に補正が現れる．

今の計算は z 方向に電子が閉じ込められ、 xy 平面で電子が運動するような場合を考えている．このような系を実現するには例えば量子井戸構造を考えればよく、実際に量子井戸系において Kane 模型の $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$

摂動によって有効質量方程式が導出されている [81, 82]. 先行研究における導出では z 方向に空間反転対称性を持つ量子井戸において導出されたものであるが, バンドオフセットをパラメータとした模型を用いている. スピン軌道相互作用の係数はバンドオフセットの関数になり, バンドオフセットを調節することによってスピン軌道相互作用の大きさを変動させることができる.

C.5 Rashba スピン軌道相互作用がある二次元電子系の固有状態

z 方向に成長した量子井戸構造中の電子の運動を考える. z 方向の束縛状態 $|n\rangle$ で三次元のハミルトニアン H_{3D} の期待値を取り, 二次元電子系の運動を考える. 簡単のため, 基底状態 $n=0$ の場合を考える. この場合のシュレーディンガー方程式とハミルトニアン H_{2D} は次の通り.

$$\begin{aligned} H_{2D} &= \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + V(x, y) + \alpha (\hat{\sigma}_x k_y - \hat{\sigma}_y k_x), \\ H_{2D} |\psi^\pm\rangle_{\mathbf{k}} &= E_{\mathbf{k}\pm} |\psi^\pm\rangle_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (\text{C.34})$$

ここで m^* は有効質量, $\alpha = \langle 0|\alpha(z)|0\rangle$ である. 簡単のため $V(x, y) = 0$ とすると, 式 (C.34) の固有状態は解析的に求まり, 固有エネルギーと固有状態はそれぞれ次のようになる [42].

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}\pm} &= \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \mp \alpha \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \\ |\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ ie^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{bmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad |\psi_{\mathbf{k}}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -ie^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{bmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (\text{C.35})$$

$\theta_{\mathbf{k}}$ は $\mathbf{k} = [k_x, k_y]$ が k_x 軸となす角度である. 固有エネルギーは $k=0$ で縮退 (クラマース縮退) しているが, $k \neq 0$ の時 k 軸の左右に分裂する. これを Rashba 分裂と呼ぶ. あるフェルミエネルギーを定めた時, フェルミ面 (線) は内側のバンドと外側のバンドに分裂する. ここに電場を印加するとフェルミ面がシフトして電流が流れるが, 内側のフェルミ面のズレと外側のフェルミ面のズレの面積が異なるため, 系は印加した電場と垂直な方向にスピン偏極が現れる (図 C.1). これを電流誘起スピン偏極と呼び, 半導体において初めて理論的な予言がなされ [5], 実際に観測も行われた [83].

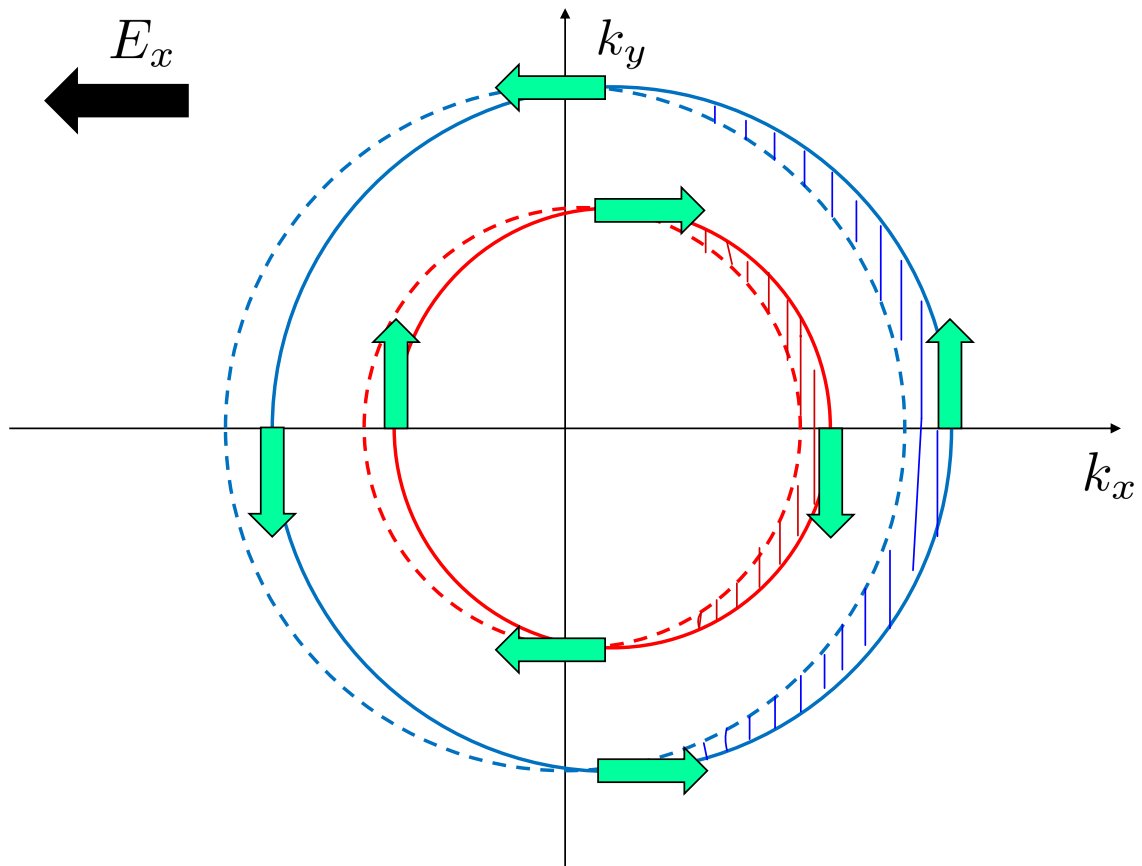


図 C.1: 電流誘起スピン偏極の概念図. 系のエネルギーは Rashba 分裂により, 内側のバンドと外側のバンドに分裂している. これらのバンドはそれぞれスピン偏極の符号 (緑色の矢印) が異なる. 今, 系に電場を印加すると, フェルミ面が僅かにシフトする. しかし外側のバンドのシフト量と内側のバンドのシフト量に差があるため, 系は電場を印加した方向と垂直な方向 (図では y 方向正の向き) に正味のスピン偏極が生じる.

付録 D

Boltzmann 方程式と電気伝導度

D.1 概要

本研究ではスピン・擬スピン流の計算に Boltzmann 方程式を用いる．そこでこの付録では Boltzmann 方程式について簡単に述べる．前半では Boltzmann 方程式を導入し，後半では Boltzmann 方程式を用いて電子の代表的な輸送現象を計算する．

D.2 Boltzmann 方程式

D.2.1 波束の運動

半導体中では電子波束として振る舞うが，波束を考えることでその粒子的挙動を考えることができる．結晶中の電子のハミルトニアンを H ，かつ波束の状態を $|\psi_{\text{WP}}\rangle$ と表すと，

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (D.1)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{\text{WP}}\rangle = H |\psi_{\text{WP}}\rangle$$

を満たす．ただし $\langle \psi_{\text{WP}} | \psi_{\text{WP}} \rangle = 1$ とする．波束の実空間における広がりを Δr ，波数空間における広がりを Δk と設定し，さらにポテンシャル $V(\mathbf{r})$ の空間変動スケールが緩やかであると仮定する．すなわち，ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ の空間変動スケールを λ とした時，

$$\Delta r \ll \lambda \quad (D.2)$$

が満たされている場合を考える．このとき波束の広がり Δr 中ではポテンシャルの値は一定であると見なすことができる．今，運動量演算子 $\hat{p}_x$ の $|\psi_{\text{WP}}\rangle$ における期待値の時間微分は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle &= \frac{d}{dt} \frac{\langle \psi_{\text{WP}} | \hat{p}_x | \psi_{\text{WP}} \rangle}{\langle \psi_{\text{WP}} | \psi_{\text{WP}} \rangle}, \\ &= \frac{d}{dt} \langle \psi_{\text{WP}} | \hat{p}_x | \psi_{\text{WP}} \rangle, \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_{\text{WP}} | [\hat{p}_x, H] | \psi_{\text{WP}} \rangle, \\ &= \langle \psi_{\text{WP}} | (-\nabla_x V(\mathbf{r})) | \psi_{\text{WP}} \rangle \end{aligned} \quad (D.3)$$

と計算される．ここで波束の中心座標の期待値を $\langle \psi_{\text{WP}} | \mathbf{r} | \psi_{\text{WP}} \rangle = \mathbf{r}_0$ と表すと，ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ 中では Δr の広がりを無視できるから $\langle \psi_{\text{WP}} | \psi_{\text{WP}} \rangle = -\nabla_x V(\mathbf{r}_0)$ となる．運動量演算子 $\hat{p}$ の $|\psi_{\text{WP}}\rangle$ にお

ける期待値を $\langle \psi_{\text{WP}} | \hat{\mathbf{p}} | \psi_{\text{WP}} \rangle = \hbar \mathbf{k}_0$ と表せば、運動量の期待値の時間発展方程式として

$$\frac{d}{dt}(\hbar \mathbf{k}_0) = -\nabla V(\mathbf{r}_0) = \mathbf{F} \quad (\text{D.4})$$

が得られる。同様の議論を $\mathbf{r}_0$ に対しても行くと、

$$\frac{d}{dt} \mathbf{r}_0 = \frac{\hbar \mathbf{k}_0}{m} = \mathbf{v}_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}_0) \quad (\text{D.5})$$

という方程式が得られる。この二式が半古典的な電子の運動方程式である。

D.2.2 Boltzmann 方程式

波束の運動は実空間と波数空間両方で記述されるので、これらを同時に扱う位相空間を扱う。一粒子の場合、位相空間の次元は 6 次元になる。今、時刻 t に座標 $\mathbf{r}$ 、波数 $\mathbf{k}$ の電子を見出す確率を $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ と表す。平衡状態では電子の分布関数はフェルミ分布関数に一致する。また、分布関数を用いると、微小体積 $d\mathbf{r}(t)d\mathbf{k}(t) = dx dy dz dk_x dk_y dk_z$ 中に存在する電子数は $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)d\mathbf{r}(t)d\mathbf{k}(t)$ と表すことができる。Boltzmann 方程式は、電子数の時間発展を考えることで導出される。今、時刻が $t \rightarrow t + dt$ と時間発展したとする。このとき、衝突などが存在せず電子数が保存していれば次の関係が成り立つ。

$$f(\mathbf{r} + d\mathbf{r}, \mathbf{k} + d\mathbf{k}, t + dt)d\mathbf{r}(t + dt)d\mathbf{k}(t + dt) - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)d\mathbf{r}(t)d\mathbf{k}(t) = 0. \quad (\text{D.6})$$

ここで位相空間の体積は保存するというリウヴィルの定理を用いると、分布関数について

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r} + d\mathbf{r}, \mathbf{k} + d\mathbf{k}, t + dt) - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \frac{d}{dt} \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \frac{d}{dt} \mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

という方程式が得られる。第一式から第二式に移る際に多変数の Taylor 展開を用いた。さらに半古典運動方程式 (D.4), (D.5) を用いると

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = 0 \quad (\text{D.8})$$

が得られる。以上が衝突により時間発展の前後で電子数に変化がない場合の議論である。衝突により電子数に変化がある場合、その効果を現象論的に衝突の効果 $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$ として導入し、

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} \quad (\text{D.9})$$

が得られる。式 (D.9) が Boltzmann 方程式である。式 (D.9) の第一項は分布関数自身が時間変化する場合には必要になる。例えば交流電場などを印加した場合、分布関数は時々刻々変化するため、この項の影響を考える必要がある。第二項は分布関数が空間的に一様でない場合に存在する項で、拡散項と呼ばれる。この項から生じる電流を拡散電流と呼ぶ。第三項は外場によって電子の運動流分布が変化する場合に存在する項で、外場項と呼ばれる。この項から生じる電流をドリフト電流と呼ぶ。

D.2.3 緩和時間近似

衝突の効果 $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$ は、例えば不純物ポテンシャルによる散乱の効果として考えることができる。通常は不純物ポテンシャルの 2 次の効果までを考えれば十分である。一休問題の場合、衝突項は分布関数に

関して線型の形で表されるため、原理的には解析的に Boltzmann 方程式を解くことができるが、高次の効果を考えると計算は複雑になる。また、フォノンとの衝突などを考え電子系以外とエネルギーのやりとりがある多体系を考える場合は衝突項は非線型となり、一般に Boltzmann 方程式を解析的に解くことは難しい。

そこで、衝突項の効果を現象論的に記述する方法の一つが緩和時間近似である。これは、衝突によって時刻 t の分布関数と平衡状態の分布関数 $f^{(0)}$ の差が時間 τ で緩和すると考える方法で、この場合

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll.}} = -\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - f^{(0)}}{\tau} \quad (\text{D.10})$$

と衝突項の形を仮定することを意味する。緩和時間近似により Boltzmann 方程式は分布関数に対し線型の方程式となり、解析的に解くことが容易になる。

D.3 電子系の電気伝導

以下では簡単のため、空間的に一様な 2 次元電子系において、緩和時間近似を用いて Boltzmann 方程式を解き、電子の電気伝導率を電場の 1 次までの範囲で求めよう。今、分布関数を電場の 0 次の項 $f^{(0)}(\varepsilon_k)$ と 1 次の項 $f^{(1)}(\mathbf{k}, t)$ に分割し、それぞれの足し合わせとして解を求める。すなわち

$$f(\mathbf{k}, t) = f^{(0)}(\varepsilon_k) + f^{(1)}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{D.11})$$

として解を求める。ここで ε_k は系の運動エネルギーであり、波数の大きさのみに依存する。電子系では $f^{(0)}(\varepsilon_k)$ はフェルミ分布関数である。 x 方向に交流電場 $E_x e^{-i\omega t}$ を印加した場合の Boltzmann 方程式は

$$\frac{\partial f(\mathbf{k}, t)}{\partial t} + \frac{-eE_x e^{-i\omega t}}{\hbar} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial k_x} = -\frac{f(\mathbf{k}, t) - f^{(0)}(\varepsilon_k)}{\tau} \quad (\text{D.12})$$

である。

まず、電場の 0 次の解は $f^{(0)}(\varepsilon_k)$ である。これは直接代入して確かめることができる。次に電場の 1 次の効果を考えると、Boltzmann 方程式は次のようになる。

$$\frac{\partial f^{(1)}(\mathbf{k}, t)}{\partial t} + (-eE_x) e^{-i\omega t} v_x \frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon_k)}{\partial \varepsilon_k} = -\frac{f^{(1)}(\mathbf{k}, t)}{\tau}. \quad (\text{D.13})$$

$f^{(1)}(\mathbf{k}, t)$ について解くと

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, t) = (-e)E_x e^{-i\omega t} \frac{\tau}{1 - i\omega\tau} v_x \left(-\frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon_k)}{\partial \varepsilon_k} \right) \quad (\text{D.14})$$

が得られる。以上の分布関数を用いて、電流密度 $\mathbf{j}$ を計算する。電流密度は次のように定義される。

$$\mathbf{j} = \frac{-e}{S} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t). \quad (\text{D.15})$$

S は 2 次元電子系面内の面積である。2 次元電子系面内は十分に大きいとし、上で求めた分布関数を代入

すると

$$\begin{aligned}
 \mathbf{j} &= \frac{-e}{S} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f^{(1)}(\mathbf{k}, t), \\
 &= \frac{e^2 \tau}{1 - i\omega \tau} E_x e^{-i\omega t} \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk_x dk_y v_x \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \end{bmatrix} \left(-\frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right), \\
 &= \frac{e^2 \tau}{1 - i\omega \tau} E_x e^{-i\omega t} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\theta d\varepsilon_{\mathbf{k}} \frac{m}{2\pi \hbar^2} \frac{1}{2\pi} \left[\frac{\hbar^2 k^2 \cos^2 \theta}{\hbar^2 k^2 \cos \theta \sin \theta} \frac{m^2}{m^2} \right] \left(-\frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right).
 \end{aligned} \tag{D.16}$$

絶対零度の場合を考えると $\left(-\frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \rightarrow \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\mathbf{k}})$ となる．積分を実行すると

$$\begin{aligned}
 \mathbf{j} &= \frac{e^2}{m} \frac{\tau}{1 - i\omega \tau} \frac{m}{2\pi \hbar^2} \varepsilon_F \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} E_x e^{-i\omega t}, \\
 &= \frac{ne^2}{m} \frac{\tau}{1 - i\omega \tau} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} E_x e^{-i\omega t}.
 \end{aligned} \tag{D.17}$$

ここで $n = \frac{m}{2\pi \hbar^2} \varepsilon_F$ は 2 次元電子系におけるフェルミエネルギーでの電子密度である．これより，電場を印加した方向にのみ電流が流れることがわかる．電流と電場の間の比例係数を電気伝導度 σ_{xx} として定義し，今の場合

$$\sigma_{xx} = \frac{ne^2 \tau}{m} \frac{1}{1 - i\omega \tau}. \tag{D.18}$$

$\omega = 0$ の場合の伝導率を Boltzmann 伝導率と呼ぶ場合がある． $\omega \neq 0$ の場合， σ_{xx} の絶対値は ω の関数として $\frac{1}{1 + \omega^2 \tau^2}$ という Lorentz 型の曲線を描き，偏角は $\omega \rightarrow \infty$ の極限で $\frac{\pi}{2}$ に漸近する．

D.4 緩和時間近似をこえて

緩和時間近似は解析的に解く場合に便利な近似であるものの，記述できない現象も存在する．その代表的なものが skew 散乱によるスピン流である．skew 散乱による電子の流れは電子スピン σ の符号によって流れる向きが変化する．これは不純物由来のスピン軌道相互作用からくる効果であるが，これを導出するためには衝突項を考察する現象が見れるように範囲で計算しなければならない．

また，緩和時間 τ は現象論的に導入したものであり，緩和時間近似では，この緩和機構が具体的にどのような機構からなっているものなのかを探ることができない．また，一般に緩和時間にはエネルギー依存性が存在するが，緩和時間近似では緩和時間を定数として与えているので，その依存性を取り入れることができない．

付録 E

スピンホール効果

E.1 概要

2次元電子系を対象に、外因性スピンホール効果の機構の skew 散乱と side jump を共に取り入れた場合についての計算を示す。この節における解説は文献 [36] を参考にした。また、2次元電子系における内因性スピンホール効果について、Sinova らによって予言された二次元電子系におけるスピン Hall 伝導率を半古典論によって計算する。

E.2 外因性スピンホール効果

外因性 spin Hall 効果の機構は skew 散乱と side jump の二つの機構がある。skew 散乱は不純物ポテンシャルによる散乱の方向がスピンによって異なるという機構であり、side jump はスピンによって波束の中心位置にシフトが生じるという現象である。これら二つの機構を考慮して、二次元電子系における外因性スピンホール効果によるスピン流を計算する。今、次のハミルトニアンの下での電子の運動を考える。

$$H_{2D} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + V_{\text{imp}}(x, y) + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} - \frac{\eta}{\hbar} ((\nabla_x V_{\text{imp}})\hat{p}_y - (\nabla_y V_{\text{imp}})\hat{p}_x). \quad (\text{E.1})$$

ここで不純物ポテンシャルを $V_{\text{imp}}(x, y) = \sum_i u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ とし、輸送現象なので不純物配置についてはアンサンブル平均を考える。さらに電場については $\mathbf{E} = [E_x, E_y, 0]$ とし、面内電場のみが存在する場合を考える。以下、スピン軌道相互作用について1次の範囲で、Boltzmann 方程式によりスピン流を計算する。

E.2.1 Boltzmann 方程式

定常状態における Boltzmann 方程式は、波数 $\mathbf{k}$ 、スピン σ の分布関数を $f_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ として次のように表される。

$$\frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \cdot \frac{\partial f_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} + \frac{(-e)\mathbf{E}}{\hbar} \cdot \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \frac{\partial f_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial \varepsilon_k} = \left(\frac{\partial f_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial t} \right)_{\text{coll.}} \quad (\text{E.2})$$

ここで $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2)$ は2次元電子系面内の運動エネルギーである。今、温度一定のもと、スピンの依存する化学ポテンシャルを $\mu_\sigma(\mathbf{r})$ とすると

$$\frac{\partial f_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial f_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial \mu_\sigma} \nabla \mu_\sigma \quad (\text{E.3})$$

である．ここで電気化学ポテンシャルを

$$\mu_{\sigma}^{\text{ec}} \equiv e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} + \mu_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (\text{E.4})$$

と定義し，この勾配を

$$\mathbf{F}_{\sigma}(\varepsilon_k) = -\nabla \mu_{\sigma}^{\text{ec}} \quad (\text{E.5})$$

と表記する．また今の場合，式 (E.2) の右辺において，衝突項中で緩和時間近似を用いることができない．これは不純物ポテンシャルによる遷移確率がスピンに依存する効果を取り入れることができないためである．不純物ポテンシャルについて 3 次までの範囲で遷移確率を計算すると，衝突項は次のように表される．

$$\left(\frac{\partial f_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial t} \right)_{\text{coll.}} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)} [-f_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) + f_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{k}')] + \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}\sigma}^{\text{ss}(3)} [-f_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) + f_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{k}')] \quad (\text{E.6})$$

ここで

$$\begin{aligned} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)} &= W_n(\varepsilon_k, \theta) \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'} + e\mathbf{E} \cdot \Delta\mathbf{r}), \\ W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}\sigma}^{\text{ss}(3)} &= \sigma \sin \theta W_{\text{ss}}(\varepsilon_k, \theta) \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'} + e\mathbf{E} \cdot \Delta\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

である． θ は波数 $\mathbf{k}'$ が波数 $\mathbf{k}$ となす角度である． $W_n(\varepsilon_k, \theta)$ は不純物ポテンシャルについて 2 次，かつスピン軌道相互作用について 0 次の関数であり， $W_{\text{ss}}(\varepsilon_k, \theta)$ は不純物ポテンシャルについて 3 次，スピン軌道相互作用について 1 次の関数である． $W_n(\varepsilon_k, \theta)$ と $W_{\text{ss}}(\varepsilon_k, \theta)$ は共に θ について奇関数である．また， $\Delta\mathbf{r}$ は side jump の効果によるシフトベクトルであり，

$$\Delta\mathbf{r} = -2\frac{\eta}{\hbar} \sigma \hbar(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \times \mathbf{e}_z \quad (\text{E.8})$$

である [32]．

ここで分布関数を $f_{\sigma} = f_{\sigma}^{(0)}(\varepsilon_k, \mu_{\sigma}) + f_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ と分割する． $f_{\sigma}^{(0)}(\varepsilon_k, \mu_{\sigma})$ は式 (E.5) について 0 次であり， $f_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ は式 (E.5) について 1 次である．これを式 (E.6) に代入し整理すると，

$$\left(\frac{\partial f_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial t} \right)_{\text{coll.}} = C_{n0} + C_{n1} + C_{\text{ss}0} + C_{\text{ss}1} \quad (\text{E.9})$$

ここで

$$\begin{aligned} C_{n0} &= \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)} [-f_{\sigma}^{(0)}(\varepsilon_k, \mu_{\sigma}) + f_{\sigma}^{(0)}(\varepsilon_{k'}, \mu_{\sigma})], \\ C_{n1} &= \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)} [-f_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) + f_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}')], \\ C_{\text{ss}0} &= \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}\sigma}^{\text{ss}(3)} [-f_{\sigma}^{(0)}(\varepsilon_k, \mu_{\sigma}) + f_{\sigma}^{(0)}(\varepsilon_{k'}, \mu_{\sigma})], \\ C_{\text{ss}1} &= \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}\sigma}^{\text{ss}(3)} [-f_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) + f_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}')] \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

$C_{\text{ss}0}$ はスピン軌道相互作用について 1 次までの範囲で $\mathbf{k}'$ についての角度積分を行うと 0 になる．ここで $f_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{V}_{\sigma}(\varepsilon_k) \left(-\frac{\partial f_{\sigma}^{(0)}}{\partial \varepsilon_k} \right)$ と仮定する．これを代入し，エネルギーが ε である時の衝突項は次のように整理される．

$$\left(\frac{\partial f_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial t} \right)_{\text{coll.}} = \frac{\partial f_{\sigma}^{(0)}}{\partial \varepsilon_k} \hbar \mathbf{k} \cdot \left[\frac{\mathbf{V}_{\sigma}(\varepsilon)}{\tau_p(\varepsilon)} + \frac{\sigma \mathbf{V}_{\sigma}(\varepsilon) \times \mathbf{e}_z}{\tau_{\text{ss}}(\varepsilon)} + \frac{2\frac{\eta}{\hbar} \sigma \mathbf{e}_z \times \mathbf{F}_{\sigma}}{\tau_p(\varepsilon)} \right] \quad (\text{E.11})$$

ここで

$$\begin{aligned}\tau_p^{-1}(\varepsilon) &= \sum_{\mathbf{k}'} W_n(\varepsilon, \theta) (1 - \cos \theta) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}'}), \\ \tau_{ss}^{-1}(\varepsilon) &= \sum_{\mathbf{k}'} W_{ss}(\varepsilon, \theta) \sin^2 \theta \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}'})\end{aligned}\quad (\text{E.12})$$

である． $\mathbf{V}_\sigma(\varepsilon)$ を $\mathbf{F}_\sigma$ の 1 次の求めると

$$\mathbf{V}_\sigma(\varepsilon) = \frac{\tau_p(\varepsilon)}{m} \left[\mathbf{F}_\sigma - \sigma \frac{\tau_p(\varepsilon)}{\tau_{ss}(\varepsilon)} \mathbf{F}_\sigma \times \mathbf{e}_z \right] + 2 \frac{\eta}{\hbar} \sigma \mathbf{F}_\sigma \times \mathbf{e}_z \quad (\text{E.13})$$

となり，これで $f_\sigma^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ が求められた．

ここで電子の速度演算子 $\hat{\mathbf{v}}$ は

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} + 2 \frac{\eta}{\hbar} \sigma \nabla V_{\text{imp}} \times \mathbf{e}_z \quad (\text{E.14})$$

となるが， $\nabla V_{\text{imp}} = -\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt}$ となり，時間平均を考えるとこの項による速度の寄与はない．従って，スピン σ の電子流 $\mathbf{j}^\sigma$ は次のように求められる．

$$\begin{aligned}\mathbf{j}^\sigma &= \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \left[f^{(0)}(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \mu_\sigma) + f_\sigma^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \right], \\ &= \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{k}} f_\sigma^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}), \\ &= \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} \cdot \left[\frac{\tau_p(\varepsilon) \mathbf{F}_\sigma}{m} - \sigma \frac{\tau_p(\varepsilon)^2}{m \tau_{ss}(\varepsilon)} \mathbf{F}_\sigma \times \mathbf{e}_z + 2 \frac{\eta}{\hbar} \sigma \mathbf{F}_\sigma \times \mathbf{e}_z \right] \left(-\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right).\end{aligned}\quad (\text{E.15})$$

ここで $f^{(0)}(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \mu_\sigma)$ は波数の大きさ $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ を通してのみ波数に依存するので， $\mathbf{k}$ についての角度積分を行うと消えることを用いた．絶対零度の場合， ε_F をフェルミエネルギーとして $-\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} = \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F)$ となる． $n = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \varepsilon_F$ を 2 次元電子系におけるフェルミエネルギーでの電子密度とし，粒子流を計算すると

$$\begin{bmatrix} j_x^\sigma \\ j_y^\sigma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{xx} & L_{xy} \\ L_{yx} & L_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} \quad (\text{E.16})$$

ここで $L_{xx} = L_{yy} = \frac{n(-e)\tau_p}{m}$ ， $L_{xy} = -L_{yx} = \sigma \frac{n(-e)\tau_p^2}{m\tau_{ss}} + 2n(-e)\sigma \frac{\eta}{\hbar}$ である．今，スピン流 $\mathbf{j}^s$ を

$$\mathbf{j}^s \equiv \frac{\mathbf{j}^\uparrow - \mathbf{j}^\downarrow}{2} \quad (\text{E.17})$$

と定義する．簡単のため $\mathbf{E} = [E_x, 0, 0]$ とすると

$$\begin{aligned}j_x^s &= 0, \\ j_y^s &= \left(\frac{n(-e)\tau_p^2}{m\tau_{ss}} + 2n(-e)\frac{\eta}{\hbar} \right) E_x \\ &= (\sigma^{\text{skew}} + \sigma^{\text{sidejump}}) E_x.\end{aligned}\quad (\text{E.18})$$

ここで $\sigma^{\text{skew}} = \frac{n(-e)\tau_p^2}{m\tau_{ss}}$ は skew 散乱における寄与， $\sigma^{\text{sidejump}} = 2n(-e)\frac{\eta}{\hbar}$ は side jump による寄与である．ここで，式 (D.18) より，直流の場合の Boltzmann 伝導度を用いて，

$$\sigma^{\text{skew}} = \frac{\sigma_{xx}}{(-e)} \frac{\tau_p}{\tau_{ss}}. \quad (\text{E.19})$$

と表せる．これは skew 散乱が電流に比例すること，すなわち縦電流が流れることによって横方向の流れが生じることを示している．さらに時定数部分は $\frac{1}{\tau_{ss}} / \frac{1}{\tau_p}$ と表され，スピンの依存しない不純物ポテンシャルの二次の散乱確率と，skew 散乱を起こす最低次の散乱確率の比になっている．これは，不純物散乱の機構の割合を表していて，スピン軌道相互作用が大きいほどこの比の値は大きくなる．また，Boltzmann 伝導度は不純物の数に反比例するが，side jump は不純物数に依存しない．従って不純物の数が少ない極限では，skew 散乱の寄与が支配的になる．これは side jump の寄与は，電場の一次の応答について，分布関数は熱平衡状態のものを用いるが，エネルギー保存の条件にスピン軌道相互作用を考慮した場合の結果を用いることから生じるためである．

E.3 内因性スピンホール効果

内因性スピンホール効果は固体のバンド構造によって生じる効果であり，不純物ポテンシャルを必要としない．現象の理論的な予測は，二次元電子系において Sinova らによって [19]，三次元電子系において村上らによってなされた [18]．本節では，内因性スピンホール効果を半古典論によって示す．

Rashba スピン軌道相互作用は，次のようにスピン $\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_x, \sigma_y]$ に対する有効磁場と見なすことができる．

$$\begin{aligned} H_R^{\text{so}} &= \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \\ &= \alpha[\sigma_x, \sigma_y] \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{e}_z), \\ &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}^{\text{eff}} \end{aligned} \quad (\text{E.20})$$

ここで $\mathbf{e}_z$ は xy 平面に垂直な単位ベクトルであり， $\mathbf{B}^{\text{eff}} = \alpha(\mathbf{k} \times \mathbf{e}_z)$ である．この標識からわかるように，有効磁場は波数 $\mathbf{k}$ の向きによって異なる．今， x 方向に電場 E_x を印加した時，時間 Δt の間に変化する波数 $\Delta \mathbf{k}$ は，半古典方程式 (D.4) から

$$\hbar \Delta \mathbf{k} = -e E_x \Delta t \mathbf{e}_x \quad (\text{E.21})$$

と見積もられる．波数が変わることによって有効磁場の向きも変わる．従ってスピンの運動方程式 $\frac{d\sigma_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\sigma_i, \mathbf{B}^{\text{eff}} \cdot \boldsymbol{\sigma}]$ を考えると

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_x}{dt} &= \frac{2}{\hbar} B_y^{\text{eff}} \sigma_z, \\ \frac{d\sigma_y}{dt} &= -\frac{2}{\hbar} B_x^{\text{eff}} \sigma_z, \\ \frac{d\sigma_z}{dt} &= -\frac{2}{\hbar} (B_x^{\text{eff}} \sigma_y - B_y^{\text{eff}} \sigma_x) \end{aligned} \quad (\text{E.22})$$

これよりスピンは歳差運動をし，面内成分だけでなく面内に垂直な成分の偏極が生じうる．Sinova らによる議論に従い， x 方向に電場を印加したことによって生じる z 方向のスピンを求めると

$$\begin{aligned} \sigma_z &= \frac{\hbar}{4\alpha^2 k^2} \frac{\alpha(+e)E_x}{\hbar} \frac{k_y}{k}, \\ &= \frac{ek_y}{4\alpha k^3} E_x \end{aligned} \quad (\text{E.23})$$

ここで Sinova らによるスピン流の定義に従い， y 方向に流れる z 方向のスピン偏極を持つスピン流は

$$\begin{aligned} j_y^z &\equiv \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar k_y}{m} \hbar \sigma_z, \\ &= \frac{(+e)\hbar^2}{16m\alpha\pi} (k_F^+ - k_F^-) E_x \end{aligned} \quad (\text{E.24})$$

と計算される．ここで k_F^+ はラシュバ分裂したエネルギーバンドの外側のフェルミ波数， k_F^- はラシュバ分裂したエネルギーバンドの内側のフェルミ波数であり，

$$k_F^+ - k_F^- = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \quad (\text{E.25})$$

であるから，

$$j_y^z = \frac{e}{8\pi} E_x \quad (\text{E.26})$$

これよりスピンホール伝導率は

$$\sigma_{yx}^{\text{SH}} \equiv \frac{j_y^z}{E_x} = \frac{e}{8\pi} \quad (\text{E.27})$$

と計算される．

以上の計算によれば，Rashba スピン軌道相互作用による内因性スピンホール効果は，有効磁場の向きが波数によって変化することで，スピンの磁場の変化の方向に追従し歳差運動をすることにある．このような半古典論による導出は物理的描像が得やすいという利点があるが，一方で詳しい計算によると，Rashba スピン軌道相互作用による内因性スピンホール効果は不純物散乱に弱く，そのポテンシャル強度が無限小の時もスピンホール伝導率には影響が残り，この場合のスピンホール伝導率は消失すると预言した理論的な研究もある [84, 85]．

付録 F

磁場中における 2 次元電子系

F.1 概要

磁場 $\mathbf{B}$ の下での 2 次元電子系の運動を簡潔に記述する．まず古典論を用いてサイクロトロン運動と Hall 効果を議論する．さらに分数量子 Hall 効果の研究に関して，二層系の擬スピンを取り入れた研究が存在する．二層系の分数量子 Hall 効果では， Δ_{SAS} と面間の電子間相互作用の競合によって分数量子 Hall 効果の発現・消失の相転移現象が生じる．この研究について簡単にレビューを行うために，量子 Hall 効果の最低限度の解説を行う．

まず強磁場中における Landau 量子化について述べた後，伝導率が $\frac{e^2}{h}$ の整数倍に量子化される整数量子 Hall 効果，および多体効果である分数量子 Hall 効果についてごく簡単に述べる．最後に二層系の擬スピンの用いた研究について述べる．

F.2 古典論

F.2.1 サイクロトロン運動

xy 面内を運動する，電場 $\mathbf{E}e^{-i\omega t} = [E_x, E_y, 0]e^{-i\omega t}$ ，磁場 $\mathbf{B} = 0, 0, B$ 中を運動する質量 m の電子の古典的な運動方程式は次の通り．

$$\begin{aligned} m \frac{d}{dt} v_x &= -eBv_y, \\ m \frac{d}{dt} v_y &= eBv_x. \end{aligned} \tag{F.1}$$

ここでサイクロトロン振動数 $\omega_c = \frac{eB}{m}$ を定義すると

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} v_x &= -\omega_c v_y, \\ \frac{d}{dt} v_y &= \omega_c v_x. \end{aligned} \tag{F.2}$$

式 (F.2) は 2 次元の調和振動子であり，解は直ちに得られ

$$\begin{aligned} v_x &= v_0 \cos(\omega_c t + \phi_1), \\ v_y &= v_0 \sin(\omega_c t + \phi_1). \end{aligned} \tag{F.3}$$

および

$$\begin{aligned} x &= x_0 + \frac{v_0}{\omega_c} \sin(\omega_c t + \phi_1), \\ y &= y_0 - \frac{v_0}{\omega_c} \cos(\omega_c t + \phi_1). \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

である．これより，電子は $[x_0, y_0]$ の周りを，半径 $\frac{v_0}{\omega_c}$ ，角振動数 ω_c で円運動をする．これをサイクロトロン運動と呼ぶ．

F.2.2 サイクロトロン共鳴

式 (F.2) に振動電場 $\mathbf{E}e^{-i\omega t} = [E_x, E_y, 0]e^{-i\omega t}$ を印加し，また現象論的に摩擦の効果を取り入れた場合の電子の古典的な運動方程式は次の通り．

$$\begin{aligned} m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_x &= -e (E_x e^{-i\omega t} + B v_y), \\ m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_y &= -e (E_y e^{-i\omega t} - B v_x). \end{aligned} \quad (\text{F.5})$$

ここで τ は現象論的に導入した緩和時間である． ω_c を用いて整理すると

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} v_x &= -\omega_c v_y - \frac{1}{\tau} v_x - \frac{e E_x}{m} e^{-i\omega t}, \\ \frac{d}{dt} v_y &= +\omega_c v_x - \frac{1}{\tau} v_y - \frac{e E_y}{m} e^{-i\omega t}. \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$

電子密度を n とすると，電流密度 $\mathbf{j}$ は

$$\mathbf{j} = -en\mathbf{v}. \quad (\text{F.7})$$

で定義され，計算の結果

$$\begin{bmatrix} j_x \\ j_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} e^{-i\omega t}. \quad (\text{F.8})$$

と表される． σ_{ij} ($i, j = x, y$) は電気伝導率テンソルである．ここで $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$ として

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} = \sigma_{yy} &= \frac{1 - i\omega\tau}{(1 - i\omega\tau)^2 + \omega_c^2\tau^2} \sigma, \\ \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} &= -\frac{\omega_c\tau}{(1 - i\omega\tau)^2 + \omega_c^2\tau^2} \sigma. \end{aligned} \quad (\text{F.9})$$

である． ω を変化させることで伝導率の絶対値にピークが現れる．これがサイクロトロン共鳴である．

F.2.3 Hall 効果

x 方向に無限に長い導線に定常電流 I が流れる場合を考える．このとき式 (F.8)，式 (F.9) で $\omega = 0$ ，かつ $j_y = 0$ から

$$E_y = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}} E_x = \rho_{xx}^{-1} E_x = \rho_{xy}^{-1} E_x. \quad (\text{F.10})$$

が成り立つ．一般に電流と垂直方向に発生する電場を Hall 電場と呼ぶ．ここで

$$j_x = \frac{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}{\sigma_{xx}} E_x. \quad (\text{F.11})$$

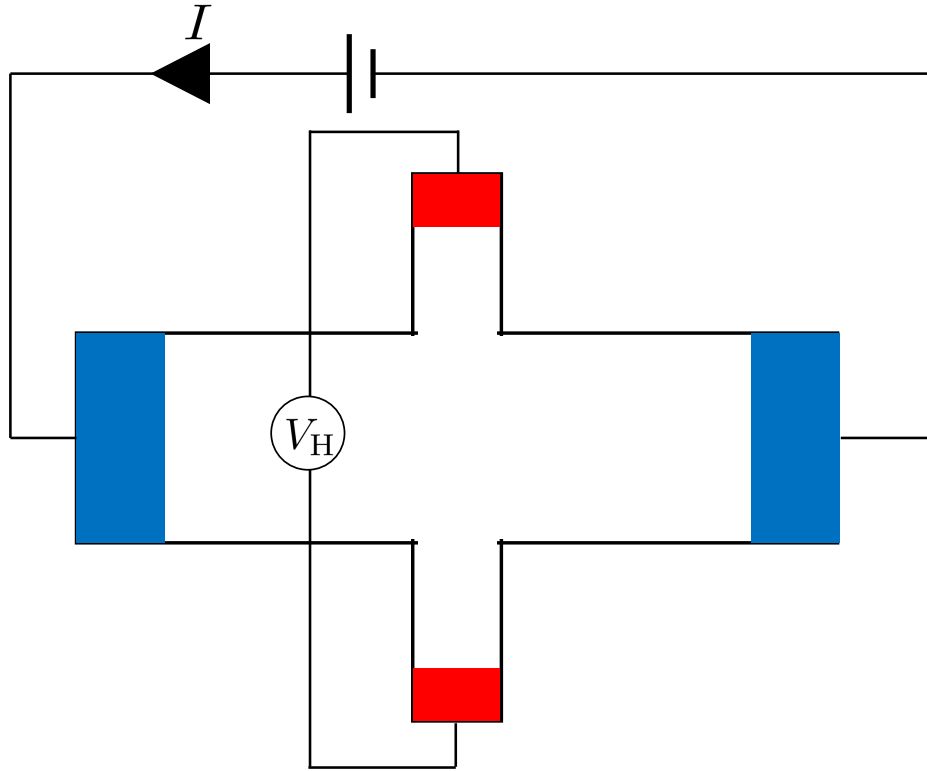


図 F.1: Hall 効果を測定する時の実験装置の幾何学的配置．紙面に垂直な方向に磁場が印加されている．

ここで ρ_{ij} ($i, j = x, y$) は電気抵抗率テンソルである．図 F.1 のような配置で，電流方向の電位差 V と電流に垂直な方向に発生する電位差 V_H を測定することで，抵抗率 ρ_{xx} ，および ρ_{xy} が求まり，そこから電気伝導率テンソルも求まる．今，次のように Hall 係数 R_H と Hall 角 θ_H を定義する．

$$\begin{aligned} R_H &\equiv \frac{E_y}{j_x B}, \\ \tan \theta_H &\equiv \frac{|\sigma_{xy}|}{\sigma_{xx}}. \end{aligned} \quad (\text{F.12})$$

今の場合これらを計算すると

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{1}{n(-e)}, \\ \tan \theta_H &= \omega_c \tau. \end{aligned} \quad (\text{F.13})$$

ホール係数 R_H の符号はキャリアのタイプにより，今は電子のみが伝導する場合を考えているため $R_H < 0$ となるが，正孔がキャリアの場合 $R_H > 0$ となる．

F.3 Landau 量子化

F.3.1 ハミルトニアン

磁場中の 2 次元電子系のハミルトニアンを導く．ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ 中の電子を考える．今， $\mathbf{p} = [p_x, p_y]$ を正準運動量として，力学的運動量 $\boldsymbol{\pi}$ は

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}. \quad (\text{F.14})$$

で表される。これはラグランジアンが

$$L = \frac{1}{2}mv^2 + e\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{F.15})$$

で表されることに起因している。磁場はゲージ不変であるが、ベクトルポテンシャルはスカラーポテンシャルの分だけ自由度があり、ここではランダウゲージのベクトルポテンシャルを考える。このとき

$$\mathbf{A} = [0, Bx, 0]. \quad (\text{F.16})$$

このベクトルポテンシャルのもとで、磁場 $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = [0, 0, B]$ である。

量子力学におけるハミルトニアンを書き下すと

$$H_{2d,B} = \frac{1}{2m} [\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y + eB\hat{x})^2]. \quad (\text{F.17})$$

$H_{2d,B}$ は正準座標 y を含まないことから

$$[\hat{p}_y, H_{2d,B}] = 0. \quad (\text{F.18})$$

であり、 $\hat{p}_y$ と $H_{2d,B}$ の同時固有状態が存在する。 x 方向の固有状態を $\phi(x)$ とすると、 $H_{2d,B}$ の固有状態 $\psi(x, y)$ は

$$\psi(x, y) = \phi(x) \times \left(\frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{ik_y y} \right). \quad (\text{F.19})$$

ここで y 方向に周期境界条件を課し、 n_y を整数として $k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y$ である。今

$$\begin{aligned} H_{2d,B} &= \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + \frac{(eB)^2}{2m} \left(\frac{\hbar k_y}{eB} + \hat{x} \right)^2, \\ &= \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 \left(\frac{\hbar k_y}{eB} + \hat{x} \right)^2, \\ &= \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (\hat{x} - X)^2. \end{aligned} \quad (\text{F.20})$$

と変形する。ここで $X = -\frac{\hbar k_y}{eB} = -l_B^2 k_y$ をガイド座標と呼び、 $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} k_y$ を磁気長と呼ぶ。式 (F.20) は中心座標がずれた調和振動子とみなせ、固有状態は Hermite 多項式 H_n で表されることが知られている。固有状態 $\phi(x)$ は離散的な指数 $n > 0$ でラベリングできるため、改めて $\phi_n(x)$ と表すと

$$\phi_n(x) = \left(\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi} l_B} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-i \frac{1}{2} \left(\frac{x}{l_B} \right)^2 \right] H_n \left(\frac{x}{l_B} \right). \quad (\text{F.21})$$

これより固有状態は

$$\psi_{n,X} \propto \exp \left[-i \frac{X}{l_B^2} y \right] \phi_n(x - X). \quad (\text{F.22})$$

ここで $X = -l_B^2 k_y$ から k_y を X で表した。また、固有エネルギーは

$$E_n = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{F.23})$$

と得られる。 n で指定される離散的な準位を n 次の Landau 準位と呼び、磁場中でエネルギー準位が離散化することを Landau 量子化と呼ぶ。

F.3.2 電場が存在する場合の議論

次に、ランダウゲージの下、定常電場 $\mathbf{E} = [E, 0, 0]$ を印加した場合のハミルトニアンは次の通り.

$$\begin{aligned} H_{2d,B} &= \frac{1}{2m} [\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y + eB\hat{x})^2] + eE\hat{x}, \\ &= \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (\hat{x} - X_E)^2 + eEX_E + \frac{m}{2} \left(\frac{E}{B} \right)^2. \end{aligned} \quad (\text{F.24})$$

ここで $X_E = -\frac{l_B^2}{\hbar} (\hbar k_y + m \frac{E}{B})$ である. k_y を定めた時 X_E は定数になるので, $eEX_E + \frac{m}{2} \left(\frac{E}{B} \right)^2$ はエネルギーの定数シフトを与える. 固有状態も式 (F.22) において $X \rightarrow X_E$ と置き換えれば良い. 今, この波動関数に対応する状態を $|n, X_E\rangle$ と表し, この状態における速度演算子の期待値を計算する. 今, 速度演算子は

$$\begin{aligned} \hat{v}_x &\equiv \frac{1}{m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right), \\ \hat{v}_y &\equiv \frac{\hbar k_y}{m} + \frac{eB\hat{x}}{m} = \omega_c (\hat{x} - X_E) - \frac{E}{B}. \end{aligned} \quad (\text{F.25})$$

である. まず, $\langle n, X_E | \hat{v}_x | n, X_E \rangle$ について

$$\begin{aligned} \langle n, X_E | \hat{v}_x | n, X_E \rangle &= \frac{1}{L_y} \int dx dy \exp \left[i \frac{X_E}{l_B^2} y \right] \phi_n(x - X_E) \left(\frac{1}{m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \right) \exp \left[-i \frac{X_E}{l_B^2} y \right] \phi_n(x - X_E), \\ &= \frac{-i\hbar}{m} \int dx \phi_n(x - X_E) \frac{d}{dx} \phi_n(x - X_E), \\ &= \int dz e^{-z^2} H_n(z) [-z H_n(z) + 2n H_{n-1}(z)] \end{aligned} \quad (\text{F.26})$$

ここで $z = \frac{x - X_E}{l_B}$ とおいた. Hermite 多項式について

$$\begin{aligned} H_{n+1}(z) - 2z H_n(z) + 2n H_{n-1}(z) &= 0, \\ \int dz e^{-z^2} H_n(z) H_m(z) &= 2^m \sqrt{\pi} m! \delta_{nm} \end{aligned} \quad (\text{F.27})$$

を用いると

$$\langle n, X_E | \hat{v}_x | n, X_E \rangle = 0 \quad (\text{F.28})$$

となる. 次に $\langle n, X_E | \hat{v}_y | n, X_E \rangle$ について

$$\begin{aligned} \langle n, X_E | \hat{v}_y | n, X_E \rangle &= \langle n, X_E | \omega_c (\hat{x} - X_E) | n, X_E \rangle - \langle n, X_E | \frac{E}{B} | n, X_E \rangle, \\ &= -\frac{E}{B} \end{aligned} \quad (\text{F.29})$$

この結果より, 電磁場以外の相互作用がない場合は量子 Hall 効果は生じないことがわかる. 量子 Hall 効果が生じるためには不純物散乱や電子間相互作用の存在が必須である.

F.3.3 状態密度

十分大きいバルク系 ($L_x \times L_y$) を考える. y 方向に周期境界条件を課しているので, ガイド座標 X についての和は k_y についての積分に変換され,

$$\sum_X = \frac{L_y}{2\pi l_B^2} \int_0^{L_x} dX. \quad (\text{F.30})$$

これより状態密度 $D_{2d,B}(E)$ は

$$\begin{aligned} D_{2d,B}(E) &= \frac{1}{L_x L_y} \sum_{n,X} \delta(E - E_n), \\ &= \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_n \delta(E - E_n). \end{aligned} \quad (\text{F.31})$$

明らかに各 Landau 準位の状態数は, 自由粒子の状態密度を $\hbar\omega_c$ の範囲で積分したものに等しい. 一つの n あたりの状態密度の重みが $\frac{1}{2\pi l_B^2}$ なので, 一つの Landau 準位に $N_\phi = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2}$ だけ電子が縮退していることがわかる. 電子数 N_e との比

$$\varphi = \frac{N_e}{N_\phi} \quad (\text{F.32})$$

を Landau 準位の占有率と呼ぶ.

F.4 整数量子 Hall 効果

F.3.2 節で議論したように, 電磁場以外の相互作用が存在しない場合, 電子の運動は等速直線運動である. しかし実際には電子系には不純物によるランダム・ポテンシャルや電子間相互作用などが存在する. これらによって, Hall 伝導率が $\frac{e^2}{h}$ の精度に量子化されたり, またその分数倍に量子化されるなどの現象が生じる. これらを整数量子 Hall 効果 [86, 87, 88], 分数量子 Hall 効果 [89, 90] と呼ぶ. 本節では, 整数量子 Hall 効果について簡潔に記述する.

ここではまず, Laughlin による理論について説明する [91]. 2 次元電子系を円筒状に丸め, 両端に電極をつける. このとき x 軸は円筒の軸に沿って取り, y 軸は円筒の周に沿って取る (図 F.2). 今, この円筒を貫くように磁束 Φ を通す. x 方向に電場を印加したときに y 方向に流れる電流 j_y は, 速度演算子がハミルトニアンの磁束 Φ による微分で表現されることから, エネルギーを E として

$$j_y = \frac{1}{L_x} \frac{\partial E}{\partial \Phi} \quad (\text{F.33})$$

で与えられる. L_x は x 方向の筒の長さである. この磁束を生じさせるベクトルポテンシャルは円筒表面でゼロでない値を持つ. また, それとは別に円筒表面に垂直な方向に磁場を印加する. これは xy 平面に垂直に磁場を印加した状況と同じであるから, この磁場を与えるベクトルポテンシャルはランダウゲージで考えられる. すると, ランダウゲージでベクトルポテンシャルを与えたときの前節の議論はそのまま成立し, 新たに円筒を貫く磁束 Φ についての影響を考えれば良い. これはすなわち, y 方向の状態は平面波として考えることができ, 非局在状態であるということを意味する. このとき, 円筒の半径を R として波動関数は

$$\psi(x, y + 2\pi R) = \psi(x, y) \quad (\text{F.34})$$

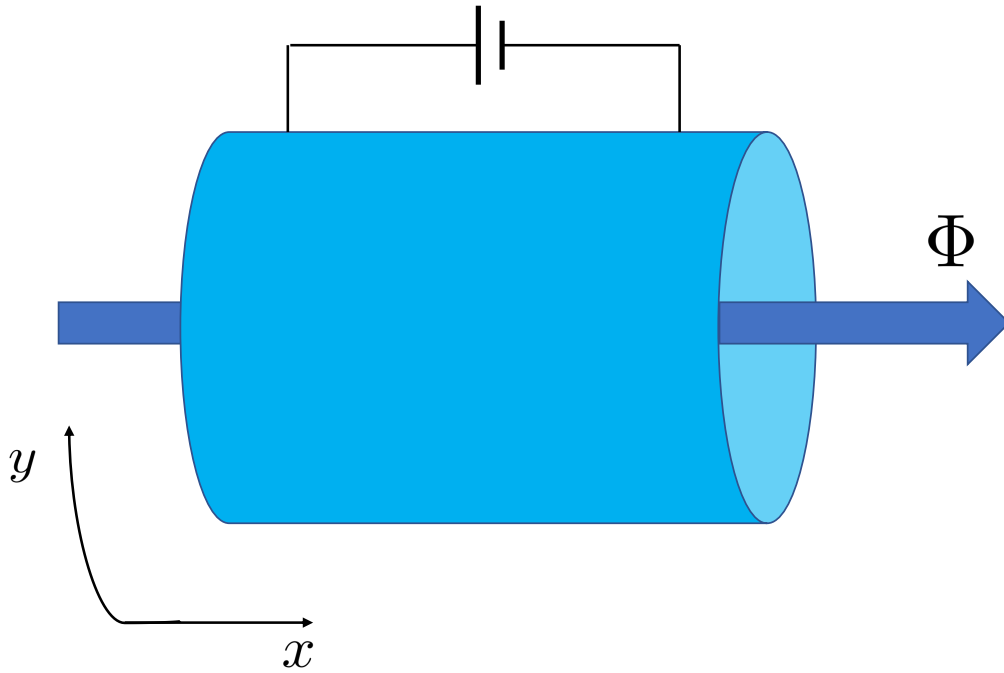


図 F.2: Laughlin による仮想的な試料. 磁束 Φ を通したシリンダー状の試料を考え, 側面を磁場が印加された二次元電子系と考える.

という周期境界条件を満たす.

ここで, 磁束 Φ を $\Phi \rightarrow \Phi + \Delta\Phi$ と変化させた場合を考える. 電子の感じる磁場は磁束 Φ を変化させても変わらないため, この変換に対し波動関数は

$$\begin{aligned}\psi(x, y) &\rightarrow \psi(x, y) \exp \left[-i \frac{e}{\hbar} \varphi(x, y) \right], \\ \varphi(x, y) &= \frac{\Delta\Phi}{2\pi R} y\end{aligned}\tag{F.35}$$

と変換される. ところが今は y 方向に周期境界条件が化されていることを考えると, ゲージ不変性により,

$$\begin{aligned}\psi(x, y + 2\pi R) &\rightarrow \psi(x, y) \exp \left[-i \frac{e}{\hbar} (\varphi(x, y) + \Delta\Phi) \right], \\ &= \psi(x, y) \exp \left[-i \frac{e}{\hbar} \varphi(x, y) \right]\end{aligned}\tag{F.36}$$

を満たす必要がある. すなわち m を整数として

$$\Delta\Phi = \frac{h}{e} m\tag{F.37}$$

の離散的な変換しか許されない. 今, 磁束 Φ を加えることは波数 k_y の定数シフト, ガイド座標の定数シフトと考えることができる. この電子の移動は, ハミルトニアン固有状態に対し一斉に起こる. ガイド座標は k_y を用いて表されるが, 周期境界条件によって k_y は離散化されている. 従ってガイド座標は等間隔に離散的に並んでいるが, ガイド座標の間隔はちょうど $\frac{h}{e}$ に等しい. 今, N 個の Landau 準位が占

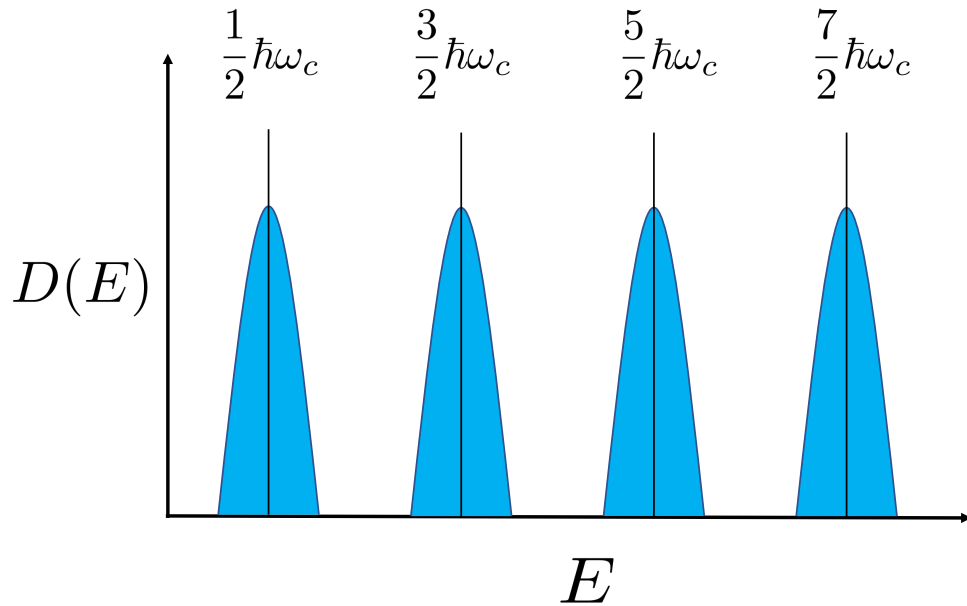


図 F.3: Landau 準位と状態密度の広がり．強磁場中のエネルギーは式 F.23 のように離散化する．系に不純物ポテンシャルのようなランダムポテンシャルが存在すると，系の状態密度に広がりが生じる．しかしスケーリング理論によれば，この広がった状態のほとんどは局在状態であり伝導に寄与しない．数値計算によれば，ランダウ準位の中心に非局在状態が存在する．

有されている場合に対し，磁束をちょうど一個分の $\Delta\Phi$ だけ変化させたとして．この磁束の変化によって $N_e = NN_\phi$ だけの電子が移動することになる．この電子の移動に伴うエネルギー変化 ΔE は

$$\Delta E = eE_x L_x \frac{N}{N_e} \times N_e = eE_x L_x N \quad (\text{F.38})$$

従って y 方向に流れる電流は

$$\begin{aligned} j_y &= \frac{1}{L_x} \frac{\Delta E}{\Delta\Phi}, \\ &= N \frac{e^2}{h} E_x \end{aligned} \quad (\text{F.39})$$

となる．これより Hall 伝導率が $\frac{e^2}{h}$ の整数倍に量子化される．これが整数量子 Hall 効果である．

系に不純物がランダムに配置されているような場合を考えても，この事情は変わらない．不純物によるポテンシャルによって，電子の状態密度は離散的な Landau 準位から広がりを持つようになる（図 F.3）．しかしスケーリング理論によって，これらの状態のはほとんど全てが局在状態であり，伝導に寄与しない．しかし数値計算によって，Landau 準位の中心にある状態は非局在状態であり，伝導に寄与することがわかっている．従って磁束の変化によってガイド座標のシフトが起きるが，フェルミエネルギー以下のランダウ準位の数以外の状態は伝導に寄与しない．すなわち移動する電子の数は占有されているランダウ準位の本数と同じである．従って，不純物ポテンシャルが存在しない場合と同様に整数量子 Hall 効果が生じる．

F.5 分数量子ホール効果

整数量子 Hall 効果は、Landau 準位の中心に存在する非局在電子状態の振る舞いによって生じる現象であった。フェルミエネルギーを変えていったときに伝導率に変化が生じうるのは新たなランダウ準位を占有した時のみであり、その間のエネルギーでは局在状態のみが存在し、伝導率は変化しない。しかし、例えば電子間相互作用によって局在状態が非局在状態になることがある。するとこのような非局在状態に対しガイド座標のシフトが起こるので、 $\frac{e^2}{h}$ の分数倍の伝導率を持つ量子 Hall 効果が生じる。このように、多体効果を考えることによって初めて生じる現象が分数量子 Hall 効果である [89, 90]。

分数量子 Hall 効果の状態は多体問題を解くことによって初めて明らかにされる。しかし Laughlin による優れた洞察により、Laughlin 波動関数という形で波動関数が与えられている [92]。Laughlin 波動関数は厳密な波動関数ではないが、Laughlin 波動関数を厳密な波動関数として持つ多体系の考察が Haldane らによって行われている [93]。

F.6 二層系の擬スピンを考慮した研究

2 枚の 2 次元電子系がある系は二層系と呼ばれ、量子ホール効果の分野で盛んに研究がなされてきた [94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101]。二層系の研究において重要なパラメータは、結合状態（対称状態）と反結合状態（反対称状態）の間のエネルギー差 Δ_{SAS} である。ランダウ準位の充填率 ν が奇数の場合、 Δ_{SAS} を変化させると、量子ホール効果を起こす相と起こさない相の間で相転移が生じるという報告が理論的になされ [102, 103]、実験的にも確かめられている [104, 105, 106, 107] (図 F.4)。この現象において、 Δ_{SAS} は、波動関数を二層に広げる役割を担っている。 Δ_{SAS} を変化させることで、二次元電子系面内の電子間相互作用の大きさと層間の電子間相互作用の大きさの比が変化する。これによって分数量子 Hall 効果を生じさせる状態の発現・消失が変化する。このように Δ_{SAS} を考えることによって一層系では生じなかった現象を観測することができたり、またパラメータの値を変更することで現象の制御が可能になっている。

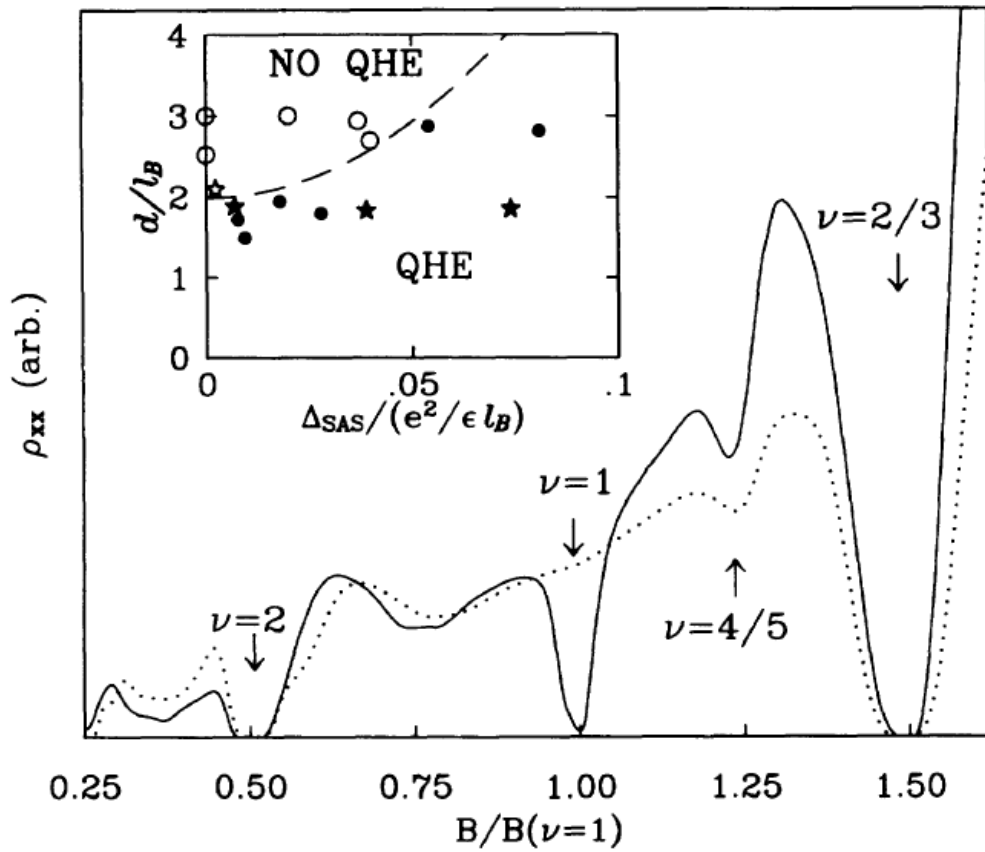


図 F.4: 量子ホール効果の起こる相と起こらない相の間の相転移の実験データ。実験の温度は 0.3K である。縦軸は縦抵抗, 横軸は磁場の大きさである。ただし, 横軸は, ランダウ準位 $\varphi = 1$ の値で規格化した値である。実線は二重量子井戸のバリア層の厚さ $d_b = 30\text{\AA}$, 二層合計の電子密度 $N_{\text{tot}} = 1.26 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$ の試料であり, 量子ホール効果が起きている。破線は二重量子井戸のバリア層の厚さ $d_b = 40\text{\AA}$, 二層合計の電子密度 $N_{\text{tot}} = 1.45 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$ の試料であり, 量子ホール効果が起っていない。挿入図はこの相転移の相図であり, 縦軸が井戸間の静電エネルギー, 横軸は Δ_{SAS} である。いずれも, $\varphi = 1$, 磁気長 l_B における静電エネルギーの値で規格化している。[107] から転載した。

付録 G

衝突項の計算

この章では、本論中の 2.3.1 節で省略した、Boltzmann 方程式の衝突項についての計算の詳細について記す。用いる近似などは本論中の 2.3.1 節に記述したが、必要に応じて、付録内でも言及する。

G.1 $J_{\mathbf{k}\sigma}^n(t)$ の導出

Boltzmann 方程式は以下のようなになる。

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}(t)}{\hbar} \cdot \frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial \mathbf{k}} = \left(\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial t} \right)_{\text{prec. \& coll.}} \quad (\text{G.1})$$

右辺は密度行列の運動方程式から計算する。密度行列の運動方程式は次の通り。

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H, \hat{\rho}] = \frac{1}{i\hbar} [H_w, \hat{\rho}] + \frac{1}{i\hbar} [V, \hat{\rho}]. \quad (\text{G.2})$$

ここで H_w は無摂動のハミルトニアン、 V は不純物に由来する摂動ポテンシャルで、それぞれ式 (2.2) と式 (2.16) で定義される。式 (G.2) の右辺第一項が歳差項、右辺第二項が不純物由来のポテンシャルによる衝突項を表す。

衝突項を計算するために相互作用表示の演算子を次のように導入する。

$$\hat{\rho}_I(t) = U^\dagger(t) \hat{\rho}(t) U(t), \quad V_I(t) = U^\dagger(t) V(t) U(t). \quad (\text{G.3})$$

ここで $U(t)$ は相互作用表示における時間発展演算子であり、

$$U(t) \equiv \exp\left(\frac{H_w}{i\hbar} t\right). \quad (\text{G.4})$$

と定義される。相互作用表示を用いると、式 (G.2) は次のように表される。

$$\frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [V_I, \hat{\rho}_I(t)]. \quad (\text{G.5})$$

ここで V_{imp} と Δ_{SAS} が結合した運動を考えないという仮定から、 $H_w = H_{\parallel}$ とした。衝突項における Δ_{SAS} の効果は運動量緩和時間 τ_p とフェルミエネルギー ε_F を用いて $\tau_p^{-1}(\frac{\Delta_{\text{SAS}}}{\varepsilon_F})$ で与えられるが、 $\Delta_{\text{SAS}} \ll \varepsilon_F$ の時この補正は無視できる。本研究ではこのような状況を考えている。

ここで時刻 t_0 に摂動 V が印可されたとき、十分時間が経過したときの時刻 t における密度行列を求める。(2.27) を時刻 t_0 から時刻 t まで積分すると

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' [V_I(t'), \hat{\rho}_I(t')]. \quad (\text{G.6})$$

式 (G.6) の左辺で $t \rightarrow t'$ と置き換え、右辺の $\hat{\rho}_I(t')$ に代入すると

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' [V_I(t'), \hat{\rho}_I(t_0)] + \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' [V_I(t'), [V_I(t''), \rho_I(t'')]]. \quad (\text{G.7})$$

摂動 V について 3 次までの効果を考え、次の式を得る。

$$\frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} = J_1(t, t_0) + J_2(t, t_0) + J_3(t, t_0). \quad (\text{G.8})$$

ここで $J_1(t, t_0)$, $J_2(t, t_0)$, $J_3(t, t_0)$ は次のように定義される。

$$\begin{aligned} J_1(t, t_0) &= \frac{1}{i\hbar} [V_I(t), \hat{\rho}_I(t_0)], \\ J_2(t, t_0) &= \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' [V_I(t), [V_I(t'), \hat{\rho}_I(t_0)]], \\ J_3(t, t_0) &= \frac{1}{(i\hbar)^3} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' [V_I(t), [V_I(t'), [V_I(t''), \hat{\rho}_I(t_0)]]]. \end{aligned} \quad (\text{G.9})$$

衝突項は、衝突項の計算では、 $\tau_{\text{coll}} \ll \tau_p$ であるため、式 (G.9) 中の $\rho_I(t_0)$ を $\rho_I(t)$ に置き換えてよい。従って $n = 1, 2, 3$ として、 $J_n(t, t_0) = J_n(t)$ となる。ここで

$$J_{\mathbf{k}\sigma}^n(t) = \langle \mathbf{k}\sigma | U(t) J_n(t) U^\dagger(t) | \mathbf{k}\sigma \rangle, \quad (n = 1, 2, 3). \quad (\text{G.10})$$

を定義する。また、摂動 V の行列要素は次のようになる。

$$\langle \ell' \mathbf{k}' \sigma | V | \ell \mathbf{k} \sigma \rangle = [1 - i\eta \sigma (\mathbf{k}' \times \mathbf{k})_z] \langle \ell' \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k} \rangle. \quad (\text{G.11})$$

ここで、 $(\mathbf{k}' \times \mathbf{k})_z \equiv k'_x k_y - k'_y k_x$ 、また $\ell = \text{L, R}$ である。以下、 $\langle \ell' | J_{\mathbf{k}\sigma}^n(t) | \ell \rangle$ を計算していくことにより、衝突項の表式を求める。

G.2 $J_{\mathbf{k}\sigma}^1(t)$ の計算

まず、 $\langle \ell' | J_{\mathbf{k}\sigma}^1(t) | \ell \rangle$ を展開すると、

$$\langle \ell' | J_{\mathbf{k}\sigma}^1(t) | \ell \rangle = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} [\langle \ell \mathbf{k} \sigma | V | \ell' \mathbf{k}' \sigma \rangle \langle \ell' \mathbf{k}' \sigma | \rho(t) | \ell \mathbf{k} \sigma \rangle - \langle \ell \mathbf{k} \sigma | \rho(t) | \ell' \mathbf{k}' \sigma \rangle \langle \ell' \mathbf{k}' \sigma | V | \ell \mathbf{k} \sigma \rangle]. \quad (\text{G.12})$$

計算の途中 Δ_{SAS} の効果を見捨て $H_w = H_{\parallel}$ であることを用いている。また式 (2.19) の仮定を用いて、層間を遷移する行列要素を見捨てている。

さて、一個の不純物ポテンシャルの行列要素は

$$\langle \ell \mathbf{k}' | u(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_i, z - z_i) | \ell \mathbf{k} \rangle = \langle \ell \mathbf{k}' | u(\boldsymbol{\rho}, z - z_i) | \ell \mathbf{k} \rangle e^{i(-\mathbf{k}' + \mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\rho}_i}, \quad \overline{e^{i(-\mathbf{k}' + \mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\rho}_i}} = \langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle \quad (\text{G.13})$$

となる。ここで $\boldsymbol{\rho} = [x, y]$, $\boldsymbol{\rho}_i = [x_i, y_i]$ である。一個の不純物ポテンシャルのアンサンブル平均を考えると

$$\overline{\langle \ell \mathbf{k}' | u(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_i, z - z_i) | \ell \mathbf{k} \rangle} = 0, \quad (\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}). \quad (\text{G.14})$$

また $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ の時は次のように仮定する。

$$\langle \ell \mathbf{k} | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k} \rangle = 0, \quad (\text{G.15})$$

これは、 $V_{\text{imp}}(\mathbf{r})$ から適当な定数 V_0 を取り出し $H_{\perp}$ に付け加えることで、常にこのように仮定することができる。これより

$$\overline{\langle \ell' | J_{\mathbf{k}\sigma}^1(t) | \ell \rangle} = 0. \quad (\text{G.16})$$

G.3 $J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t)$ の計算

次に, $J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t)$ について考える.

$$\langle \ell' | J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) | \ell \rangle = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \langle \ell' \mathbf{k}\sigma | [G_a(t, t') - G_b(t, t')] | \ell \mathbf{k}\sigma \rangle. \quad (\text{G.17})$$

ここで,

$$\begin{aligned} G_a(t, t') &= V_I(t) V_I(t') \hat{\rho}_I(t) + \hat{\rho}_I(t) V_I(t') V_I(t), \\ G_b(t, t') &= V_I(t) \hat{\rho}_I(t) V_I(t') + V_I(t') \hat{\rho}_I(t) V_I(t) \end{aligned} \quad (\text{G.18})$$

である. 従って, $\overline{\langle \ell' | J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) | \ell \rangle}$ は, 次の行列要素の線型結合で表されることがわかる.

$$\overline{\langle \ell' \mathbf{k}'' | V_{\text{imp}} | \ell' \mathbf{k}' \rangle \langle \ell \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k} \rangle} = \sum_{i,j} \overline{\langle \ell' \mathbf{k}'' | u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) | \ell' \mathbf{k}' \rangle \langle \ell \mathbf{k}' | u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) | \ell \mathbf{k} \rangle}. \quad (\text{G.19})$$

式 (G.14) から, $i \neq j$ の項は 0 になるため

$$\overline{\langle \ell' \mathbf{k}'' | V_{\text{imp}} | \ell' \mathbf{k}' \rangle \langle \ell \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k} \rangle} = \delta_{\ell' \ell} \delta_{\mathbf{k}'' \mathbf{k}} \overline{\langle \ell \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k}' \rangle \langle \ell \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k} \rangle}. \quad (\text{G.20})$$

ここで不純物ポテンシャルのアンサンブル平均について次を仮定する.

$$\overline{|\langle \ell \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | \ell \mathbf{k} \rangle|^2} = \overline{|\langle R \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | R \mathbf{k} \rangle|^2}. \quad (\text{G.21})$$

すると $J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t)$ の計算では, $\overline{\langle L | J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) | L \rangle}$ と $\overline{\langle R | J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) | L \rangle}$ の項を計算すれば十分である.

$\langle L | J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) | L \rangle$ について, $G_a(t, t')$ の部分を計算すると, 次の通り.

$$\frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \overline{\langle L \mathbf{k}\sigma | G_a(t, t') | L \mathbf{k}\sigma \rangle} = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{k}'} (L \mathbf{k} \mathbf{k}' \mathbf{k}\sigma) \langle L \mathbf{k}\sigma | \hat{\rho}(t) | L \mathbf{k}\sigma \rangle 2\pi\hbar \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \quad (\text{G.22})$$

計算の途中で, 衝突項では Δ_{SAS} の効果を見捨てることを用いた. また,

$$(L \mathbf{k} \mathbf{k}' \mathbf{k}\sigma) \equiv \overline{\langle L \mathbf{k}\sigma | V | L \mathbf{k}'\sigma \rangle \langle L \mathbf{k}'\sigma | V | L \mathbf{k}\sigma \rangle} \quad (\text{G.23})$$

と定義した. 式 (G.11) から

$$\langle L \mathbf{k}\sigma | V | L \mathbf{k}'\sigma \rangle \langle L \mathbf{k}'\sigma | V | L \mathbf{k}\sigma \rangle = [1 + \eta^2[(\mathbf{k}' \times \mathbf{k})_z]^2] |\langle L \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | L \mathbf{k} \rangle|^2 \quad (\text{G.24})$$

である. 同様に $G_b(t, t')$ は

$$\frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \overline{\langle L \mathbf{k}\sigma | G_b(t, t') | L \mathbf{k}\sigma \rangle} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{k}'} (L \mathbf{k} \mathbf{k}' \mathbf{k}\sigma) \rho_{\mathbf{k}\sigma}^{LL} 2\pi\hbar \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (\text{G.25})$$

ここで密度行列の行列要素について $\langle \ell | \hat{\rho}_{\mathbf{k}\sigma} | \ell \rangle$ as $\rho_{\mathbf{k}\sigma}^{\ell\ell}$ とした. また,

$$\frac{1}{\hbar^2} (L \mathbf{k} \mathbf{k}' \mathbf{k}\sigma) 2\pi\hbar \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|\langle L \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | L \mathbf{k} \rangle|^2} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) + O(\eta^2) \quad (\text{G.26})$$

である. 本研究ではスピン軌道相互作用については 1 次までの効果を考え, $O(\eta^2)$ は無視する. 以上より, 不純物ポテンシャルの 2 次の遷移確率を次のように定義する.

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(2)} \equiv W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{(2)} = W_{R\mathbf{k}'R\mathbf{k}}^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|\langle L \mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | L \mathbf{k} \rangle|^2} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \quad (\text{G.27})$$

ここで式 (G.21) を用いた.

したがって、次の式を得る.

$$\overline{\langle L | J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) | L \rangle} = \sum_{\mathbf{k}'} \left[-W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(2)} \rho_{\mathbf{k}\sigma}^{LL}(t) + W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(2)} \rho_{\mathbf{k}'\sigma}^{LL}(t) \right] = \sum_{\mathbf{k}'} W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(2)} \left[-\rho_{\mathbf{k}\sigma}^{LL}(t) + \rho_{\mathbf{k}'\sigma}^{LL}(t) \right]. \quad (\text{G.28})$$

同様に、 $\overline{\langle R | J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) | L \rangle}$ について計算を行うと次の通り.

$$\overline{\langle R | J_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) | L \rangle} = - \sum_{\mathbf{k}'} W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(2)} \rho_{\mathbf{k}\sigma}^{RL}(t). \quad (\text{G.29})$$

ここで、式 (2.19) から $\langle R\mathbf{k}\sigma | V | R\mathbf{k}\sigma \rangle \langle L\mathbf{k}\sigma | V | L\mathbf{k}\sigma \rangle = 0$ であるため、 $G_b(t, t')$ に由来する項が消えることを用いた.

G.4 $J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t)$ の計算

次に、 $J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t)$ について考える. $\langle \ell' | J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t) | \ell \rangle$ を展開すると、

$$\langle \ell' | J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t) | \ell \rangle = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^3 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle \ell' \mathbf{k}\sigma | [G_c(t, t', t'') + G_d(t, t', t'')] | \ell \mathbf{k}\sigma \rangle. \quad (\text{G.30})$$

ここで

$$\begin{aligned} G_c(t, t', t'') &= V_I(t) V_I(t') V_I(t'') \hat{\rho}_I(t) - \hat{\rho}_I(t) V_I(t'') V_I(t') V_I(t), \\ G_d(t, t', t'') &= -V_I(t) V_I(t') \hat{\rho}_I(t) V_I(t'') - V_I(t) V_I(t'') \hat{\rho}_I(t) V_I(t') - V_I(t') V_I(t'') \hat{\rho}_I(t) V_I(t) \\ &\quad + V_I(t) \hat{\rho}_I(t) V_I(t'') V_I(t') + V_I(t') \hat{\rho}_I(t) V_I(t'') V_I(t) + V_I(t'') \hat{\rho}_I(t) V_I(t') V_I(t), \end{aligned} \quad (\text{G.31})$$

とした. $J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t)$ の計算でも、 $\overline{\langle L | J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t) | L \rangle}$ と $\overline{\langle R | J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t) | L \rangle}$ の項を計算すれば十分である.

$\langle L | J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t) | L \rangle$ について、 $G_c(t, t')$ の部分を計算すると、次の通り.

$$\frac{1}{(i\hbar)^3} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \overline{\langle L\mathbf{k}\sigma | G_c(t, t', t'') | L\mathbf{k}\sigma \rangle} = -\frac{1}{i\hbar} \rho_{\mathbf{k}\sigma}^{LL} A_{\mathbf{k}} \quad (\text{G.32})$$

ここで

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}} &= 2\pi i \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \left[\frac{\overline{(L\mathbf{k}\mathbf{k}''\mathbf{k}'\mathbf{k}\sigma)}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''} - i\delta} + \frac{\overline{(L\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}\sigma)}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''} + i\delta} \right], \\ (L\mathbf{k}\mathbf{k}''\mathbf{k}'\mathbf{k}\sigma) &= \{1 - i\eta\sigma[(\mathbf{k} \times \mathbf{k}')_z + (\mathbf{k}' \times \mathbf{k}'')_z + (\mathbf{k}'' \times \mathbf{k})_z]\} (L\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k})_0 + O(\eta^2), \\ (L\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k})_0 &\equiv \langle L\mathbf{k} | V_{\text{imp}} | L\mathbf{k}' \rangle \langle L\mathbf{k}' | V_{\text{imp}} | L\mathbf{k}'' \rangle \langle L\mathbf{k}'' | V_{\text{imp}} | L\mathbf{k} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{G.33})$$

今、不純物ポテンシャルの 3 次の効果の遷移確率を次のように定義する.

$$W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(3)} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \sum_{\mathbf{k}''} \left[\frac{\overline{(L\mathbf{k}\mathbf{k}''\mathbf{k}'\mathbf{k}\sigma)}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''} + i\delta} + \text{c.c.} \right] \quad (\text{G.34})$$

本研究では、 $W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(3)}$ 中で、 η について 0 次の項は無視する. これは、 η について 0 次の項は既に $W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(2)}$ を考えており、さらに $W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(3)}$ に比べて $W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(2)}$ の寄与の方が支配的になるためである. スピン軌道相互作用については 1 次までの効果を考えるため、 $W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(3)}$ 中で η に比例する部分を、改めて $W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(3)\text{ss}}$ と表す. $W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(3)\text{ss}}$ は、skew 散乱について最低次の効果であり、次のように表される.

$$W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(3)\text{ss}} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \sum_{\mathbf{k}''} \left[\frac{(-i\eta\sigma)[(\mathbf{k} \times \mathbf{k}')_z + (\mathbf{k}' \times \mathbf{k}'')_z + (\mathbf{k}'' \times \mathbf{k})_z] (L\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k})_0}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''} + i\delta} + \text{c.c.} \right]. \quad (\text{G.35})$$

式 (2.18) を考慮し,

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma}^{(3)\text{ss}} \equiv W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} = -W_{R\mathbf{k}R\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}}, \quad (\text{G.36})$$

と定義する. 今, 式 (G.32) を遷移確率 $W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}}$ を用いて表すと

$$\frac{1}{(i\hbar)^3} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \overline{\langle L\mathbf{k}\sigma | G_c(t, t', t'') | L\mathbf{k}\sigma \rangle} = - \sum_{\mathbf{k}'} W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \rho_{\mathbf{k}\sigma}^{LL} \quad (\text{G.37})$$

ここで $(L\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k})_0$ は

$$(L\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k})_0 = \sum_i \langle L\mathbf{k} | u(x, y, z - z_i) | L\mathbf{k}' \rangle \langle L\mathbf{k}' | u(x, y, z - z_i) | L\mathbf{k}'' \rangle \langle L\mathbf{k}'' | u(x, y, z - z_i) | L\mathbf{k} \rangle \quad (\text{G.38})$$

と表せる. $u(x, y, z - z_i)$ が $|\boldsymbol{\rho}| = \sqrt{x^2 + y^2}$ を通してのみ x, y に依存するため, $(L\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k})_0$ は, $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$, $|\mathbf{k}' - \mathbf{k}''|$, $|\mathbf{k}'' - \mathbf{k}|$ を通してのみ $\mathbf{k}$, $\mathbf{k}'$, $\mathbf{k}''$ に依存する. これより,

$$\sum_{\mathbf{k}'} W_{L\mathbf{k}'L\mathbf{k}}^{\sigma(3)\text{ss}} = 0 \quad (\text{G.39})$$

が導かれる.

次に, $\langle L | J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t) | L \rangle$ について, $G_d(t, t')$ の部分を計算すると, 次の通り.

$$\frac{1}{(i\hbar)^3} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \overline{\langle L\mathbf{k}\sigma | G_d(t, t', t'') | L\mathbf{k}\sigma \rangle} = \sum_{\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}\sigma}^{LL}(t) \frac{1}{i\hbar} B_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (\text{G.40})$$

ただし

$$B_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 2\pi i \sum_{\mathbf{k}''} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''}) \left[\frac{(L\mathbf{k}\mathbf{k}''\mathbf{k}'\mathbf{k}\sigma)}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''} + i\delta} + \frac{(L\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}\sigma)}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''} - i\delta} \right] \quad (\text{G.41})$$

である. V について 3 次の単位時間あたりの遷移確率 (G.34) で表すと

$$\frac{1}{i\hbar} B_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(3)} \quad (\text{G.42})$$

$W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(3)}$ を $W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}}$ に置き換え整理すると, $\overline{\langle L | J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t) | L \rangle}$ について次の式を得る.

$$\overline{\langle L | J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t) | L \rangle} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{L\mathbf{k}L\mathbf{k}'}^{\sigma(3)\text{ss}} \rho_{\mathbf{k}'\sigma}^{LL}(t) \quad (\text{G.43})$$

同様に $\overline{\langle R | J_{\mathbf{k}\sigma}^3(t) | L \rangle}$ を計算すると, このとき残る項はない.

参考文献

- [1] I. Žutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 2, 323 (2004).
- [2] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn, *Phys. Rev. B* **39**, 4828–4830 (1989).
- [3] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472–2475 (1988).
- [4] T. Miyazaki and N. Tezuka, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **139**, 3, L231–L234 (1995).
- [5] V. Edelstein, *Solid State Commun.* **73**, 3, 233 – 235 (1990).
- [6] D. Pesin and A. H. MacDonald, *Nat. Mater.* **11**, 409 (2012).
- [7] M. Ezawa, *Phys. Rev. B* **86**, 161407 (2012).
- [8] J. Sinova, S. Murakami, S. Q. Shen, and M. S. Choi, *Solid State Commun.* **138**, 4, 214–217 (2006).
- [9] M. I. Dyakonov and A. V. Khaetskii, Spin hall effect, In M. I. Dyakonov, editor, *Spin Physics in Semiconductors*, 211–243, Springer Berlin Heidelberg (2008).
- [10] G. Vignale, *J. Supercond. Nov. Magn.* **23**, 1, 3–10 (2010).
- [11] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, *Sov. Phys. JETP* **13**, 467 (1971).
- [12] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, *Phys. Lett. A* **35**, 6, 459 – 460 (1971).
- [13] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 9, 1834–1837 (1999).
- [14] S. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2, 393–396 (2000).
- [15] H.-A. Engel, B. I. Halperin, and E. I. Rashba, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 166605 (2005).
- [16] E. M. Hankiewicz and G. Vignale, *Phys. Rev. B* **73**, 115339 (2006).
- [17] W. K. Tse and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 5, 056601 (2006).
- [18] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, *Science* **301**, 5638, 1348–1351 (2003).
- [19] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126603 (2004).
- [20] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Science* **306**, 5703, 1910 (2004).
- [21] V. Sih, R. C. Myers, Y. K. Kato, W. H. Lau, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Nat. Phys.* **1**, 1, 31–35 (2005).
- [22] S. O. Valenzuela and M. Tinkham, *Nature* **442**, 7099, 176–179 (2006).
- [23] N. P. Stern, S. Ghosh, G. Xiang, M. Zhu, N. Samarth, and D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 126603 (2006).
- [24] T. Kimura, Y. Otani, T. Sato, S. Takahashi, and S. Maekawa, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 156601

- (2007).
- [25] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova, and T. Jungwirth, Phys. Rev. Lett. **94**, 4, 047204 (2005).
 - [26] N. F. Mott, Proc. R. Soc. A **124**, 794, 425–442 (1929).
 - [27] J. Smit, Physica **21**, 6, 877–887 (1955).
 - [28] J. Smit, Physica **24**, 1-5, 39–51 (1958).
 - [29] L. Berger, Phys. Rev. B **2**, 11, 4559–4566 (1970).
 - [30] L. Berger, Phys. Rev. B **5**, 5, 1862–1870 (1972).
 - [31] S. K. Lyo and T. Holstein, Phys. Rev. Lett. **29**, 7, 423–425 (1972).
 - [32] D. Culcer, E. M. Hankiewicz, G. Vignale, and R. Winkler, Phys. Rev. B **81**, 12, 125332 (2010).
 - [33] P. Nozières and C. Lewiner, J. Phys. (Paris) **34**, 10, 901–915 (1973).
 - [34] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong, Rev. Mod. Phys. **82**, 2, 1539 (2010).
 - [35] R. J. Haug, R. R. Gerhardts, K. von Klitzing, and K. Ploog, Phys. Rev. Lett. **59**, 12, 1349–1352 (1987).
 - [36] H. Akera and H. Suzuura, Phys. Rev. B **87**, 7, 075301 (2013).
 - [37] X. Xu, W. Yao, D. Xiao, and T. F. Heinz, Nat. Phys. **10**, 343 (2014).
 - [38] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 11, 114704 (2015).
 - [39] T. Ishikawa and H. Akera, Phys. Rev. B **100**, 125307 (2019).
 - [40] F. J. Ohkawa and Y. Uemura, J. Phys. Soc. Jpn. **37**, 5, 1325–1333 (1974).
 - [41] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, J. Phys. C **17**, 33, 6039 (1984).
 - [42] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, JETP Lett. **39**, 2, 78 (1984).
 - [43] G. Dresselhaus, Phys. Rev. **100**, 2, 580–586 (1955).
 - [44] M. I. Dyakonov and V. Y. Kachorovskii, Sov. Phys. Semicond. **20**, 1, 110–112 (1986).
 - [45] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, Sov. Phys. JETP **33**, 1053 (1971).
 - [46] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, Sov. Phys. Solid State **13**, 12, 3023–3026 (1972).
 - [47] X. Hu, R. De Sousa, and S. Das Sarma, Decoherence and dephasing in spin-based solid state quantum computers, In Y. A. Ono and K. Fujikawa, editors, Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology, 3–11, World Scientific (2002).
 - [48] E. L. Ivchenko, Sov. Phys. Solid State **15**, 1048–1050 (1973).
 - [49] M. M. Glazov and E. Ivchenko, J. Supercond. **16**, 4, 735–742 (2003).
 - [50] E. G. Mishchenko and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **68**, 045317 (2003).
 - [51] T. Ishikawa and H. Akera, Japanese Journal of Applied Physics **61**, 6, 063002 (2022).
 - [52] W. Hanle, Z. Phys. **30**, 1, 93–105 (1924).
 - [53] R. R. Parsons, Phys. Rev. Lett. **23**, 1152–1154 (1969).
 - [54] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, Theory of optical spin orientation of electrons and nuclei in semiconductors, In F. Meier and B. P. Zakharchenya, editors, Optical Orientation, 11–71, North Holland, Amsterdam (1984).
 - [55] E. M. Hankiewicz, L. W. Molenkamp, T. Jungwirth, and J. Sinova, Phys. Rev. B **70**, 241301 (2004).
 - [56] P. W. . J. W. T. Jungwirth, X. Marti, Nat. Nanotechnol **11**, 231 (2016).

- [57] M. A. Shiro Hidaka and S. Yamada, *Appl. Phys. Express* **5**, 1134001 (2012).
- [58] F. Dettwiler, J. Fu, S. Mack, P. J. Weigele, J. C. Egues, D. D. Awschalom, and D. M. Zumbühl, *Phys. Rev. X* **7**, 031010 (2017).
- [59] H. Akera, H. Suzuura, and Y. Egami, *Phys. Rev. B* **92**, 205311 (2015).
- [60] C. J. Trowbridge, B. M. Norman, Y. K. Kato, D. D. Awschalom, and V. Sih, *Phys. Rev. B* **90**, 085122 (2014).
- [61] J. Strand, A. F. Isakovic, X. Lou, P. A. Crowell, B. D. Schultz, and C. J. Palmström, *Applied Physics Letters* **83**, 16, 3335–3337 (2003).
- [62] K. R. Wald, L. P. Kouwenhoven, P. L. McEuen, N. C. van der Vaart, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1011–1014 (1994).
- [63] T. Machida, T. Yamazaki, and S. Komiyama, *Applied Physics Letters* **80**, 22, 4178–4180 (2002).
- [64] Y. Komori, S. Sakuma, and T. Okamoto, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 146807 (2007).
- [65] G.-M. Choi and D. G. Cahill, *Phys. Rev. B* **90**, 214432 (2014).
- [66] T. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 11, 114705 (2015).
- [67] N. S. Averkiev, L. E. Golub, A. S. Gurevich, V. P. Evtikhiev, V. P. Kochereshko, A. V. Platonov, A. S. Shkolnik, and Y. P. Efimov, *Phys. Rev. B* **74**, 033305 (2006).
- [68] C. Józsa, T. Maassen, M. Popinciuc, P. J. Zomer, A. Veligura, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **80**, 241403 (2009).
- [69] S. P. Dash, S. Sharma, J. C. Le Breton, J. Peiro, H. Jaffrès, J.-M. George, A. Lemaître, and R. Jansen, *Phys. Rev. B* **84**, 054410 (2011).
- [70] S. Omar and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **95**, 081404 (2017).
- [71] A. Dankert and S. P. Dash, *Nat. Commun.* **8**, 16093 (2017).
- [72] Y. K. Luo, J. Xu, T. Zhu, G. Wu, E. J. McCormick, W. Zhan, M. R. Neupane, and R. K. Kawakami, *Nano Lett.* **17**, 3877–3883 (2017).
- [73] H. Min, G. Borghi, M. Polini, and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. B* **77**, 041407 (2008).
- [74] P. San-Jose, E. Prada, E. McCann, and H. Schomerus, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 247204 (2009).
- [75] W. Kohn and J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **108**, 3, 590 (1957).
- [76] T. Ando, *Journal of the Physical Society of Japan* **74**, 3, 777–817 (2005).
- [77] E. O. Kane, *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 4, 249–261 (1957).
- [78] R. Lassnig, *Phys. Rev. B* **31**, 12, 8076 (1985).
- [79] P. Pfeffer and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **59**, 8, R5312–R5315 (1999).
- [80] J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869–883 (1955).
- [81] E. Bernardes, J. Schliemann, M. Lee, J. C. Egues, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 7, 076603 (2007).
- [82] R. S. Calsaverini, E. Bernardes, J. C. Egues, and D. Loss, *Phys. Rev. B* **78**, 15, 155313 (2008).
- [83] C. L. Yang, H. T. He, L. Ding, L. J. Cui, Y. P. Zeng, J. N. Wang, and W. K. Ge, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 186605 (2006).
- [84] J. Inoue, G. E. W. Bauer, and L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. B* **70**, 041303 (2004).
- [85] O. Chalaev and D. Loss, *Phys. Rev. B* **71**, 245318 (2005).
- [86] J. Wakabayashi and S. Kawaji, *J. Phys. Soc. Jpn.* **44**, 6, 1839–1849 (1978).

- [87] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494–497 (1980).
- [88] M. A. Paalanen, D. C. Tsui, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **25**, 5566–5569 (1982).
- [89] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1559–1562 (1982).
- [90] R. Willett, J. P. Eisenstein, H. L. Störmer, D. C. Tsui, A. C. Gossard, and J. H. English, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1776–1779 (1987).
- [91] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. B* **23**, 5632–5633 (1981).
- [92] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1395–1398 (1983).
- [93] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 605–608 (1983).
- [94] T. Chakraborty and P. Pietiläinen, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2784–2787 (1987).
- [95] D. Yoshioka, A. H. MacDonald, and S. M. Girvin, *Phys. Rev. B* **39**, 1932–1935 (1989).
- [96] H. A. Fertig, *Phys. Rev. B* **40**, 1087–1095 (1989).
- [97] S. He, X. C. Xie, S. Das Sarma, and F. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **43**, 9339–9342 (1991).
- [98] Y. W. Suen, L. W. Engel, M. B. Santos, M. Shayegan, and D. C. Tsui, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1379–1382 (1992).
- [99] J. P. Eisenstein, G. S. Boebinger, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and S. He, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1383–1386 (1992).
- [100] X.-G. Wen and A. Zee, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1811–1814 (1992).
- [101] Z. F. Ezawa and A. Iwazaki, *Phys. Rev. B* **47**, 7295–7311 (1993).
- [102] A. H. MacDonald, P. M. Platzman, and G. S. Boebinger, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 775–778 (1990).
- [103] L. Brey, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 903–906 (1990).
- [104] G. S. Boebinger, H. W. Jiang, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1793–1796 (1990).
- [105] Y. W. Suen, J. Jo, M. B. Santos, L. W. Engel, S. W. Hwang, and M. Shayegan, *Phys. Rev. B* **44**, 5947–5950 (1991).
- [106] G. S. Boebinger, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **45**, 11391–11394 (1992).
- [107] S. Q. Murphy, J. P. Eisenstein, G. S. Boebinger, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 728–731 (1994).

研究業績目録

(論文)

- (1) Antiparallel spin Hall current in a bilayer with skew scattering, Toshiya Ishikawa and Hiroshi Akera, Phys. Rev. B **100**, 125307
- (2) AC response of spin-pseudospin current in a double quantum well, Toshiya Ishikawa and Hiroshi Akera, Jpn. J. Appl. Phys. **61** 063002

(講演)

- 石川俊也, 明楽浩史: 複数サブバンドをもつ量子井戸における外因性スピンホール効果, 日本物理学会 2017 秋季大会, 岩手大学, 2017 年 9 月
- 石川俊也, 明楽浩史: 二重量子井戸における外因性スピンホール効果, 日本物理学会 第 73 回年次大会, 東京理科大学, 2018 年 3 月
- T.Ishikawa, T.Kato, H.Akera: Extrinsic spin Hall effect and the Edelstein effect in double quantum wells, PASPS10, Linz, August, 2018.
- 石川俊也, 明楽浩史: 二重量子井戸における外因性スピンホール効果の発現・消失のクロスオーバー, 日本物理学会 2018 秋季大会, 同志社大学, 2018 年 9 月
- 石川俊也, 明楽浩史: 二重量子井戸におけるスピン・擬スピン流の Hanle 効果, PASPS-23, 東京工業大学, 2018 年 12 月
- 石川俊也, 明楽浩史: 二重量子井戸における反平行スピンホール流, 日本物理学会 第 74 回年次大会, 九州大学, 2019 年 3 月
- 石川俊也, 明楽浩史: グラフェンの面内ヘテロ接合における透過率, 日本物理学会 2019 秋季大会, 岐阜大学, 2019 年 9 月
- 石川俊也, 明楽浩史: 原子層ヘテロ接合系における透過率のバレー依存性, 日本物理学会 2019 秋季大会, オンライン開催, 2020 年 9 月
- 石川俊也, 明楽浩史: 二重量子井戸における反平行スピンホール流の交流応答, 日本物理学会 第 76 回年次大会, オンライン開催, 2021 年 3 月

謝辞

昔話になりますが、私が大学に入ったときには、自分が物質科学を専攻することになるとは思ってもいませんでした。しかし、兄に勧められて参加した学科説明会で、所属研究室となる、物性物理工学研究室の説明を聞きました。鉛筆で紙の上に書いた式で実際の物理現象を説明できるということに強い関心を抱いていた私は、すっかり「理論物理ができる」という宣伝文句に、そして「スピン」という高校までの物理の講義では聞いたことがない（不勉強なだけだったのかもしれませんが）物理量の深淵さに魅せられて、「この研究室に入りたい！」という思いで工学部への、そして応用物理工学コースへの進学を決意しました。

その後、不思議だが気のいい仲間に恵まれ学生生活を謳歌していた時に、物性物理工学研究室の准教授である鈴浦先生のお誘いを受け、研究室インターンという形で、本研究室に席をいただきました。研究室インターンでは、明楽教授の下で一次元の強束縛模型のエネルギーバンドを計算する課題をいただき、人に説明することの難しさ、そしてようやく自分の考えていたことが伝わった時の喜びを教えていただきました。思えば、この小さな成功体験が、この先の研究におけるモチベーションの原点になったのかもしれませんが。また、当時研究室に所属されていた先輩方の研究に向かう姿勢を見て、「ここで学びたい・ここで研究をしたい」という思いをさらに深めたことを覚えています。その後、かねてから望んでいた本研究室への正式な配属を迎え、何より素晴らしい同期に恵まれ、研究を続けてきました。進捗が良い日もあれば悪い日もあり、ゼミの前日に必死でスライドをまとめていた日が何度もありました。教科書の勉強と一緒にしている時に、何度考えても計算しても再現ができず、夜を徹して議論をしていた日が何度もありました。勉強したこと・研究したことをスライドにまとめ、発表練習をしていた時には、江上助教に有益な助言を何度もいただきました。一生懸命に研究を続けているうちに、優秀で面白い後輩も増え、研究室に来る毎日が、そしてたまに（たまにですよ）居酒屋に向向日々がとても楽しかったことを思い出します。特に修士一年の冬、明楽教授と同期と共に、毎日のようにホワイトボードで計算と議論を重ねながら、本論文の雛形となる理論を構築した日々は、今でも鮮やかに思い出すことができます。

学会発表では緊張し、うまく発表できないこともありました。会心の発表だと思ったら質問をもらえずに気落ちしたこともありました。充実した日々が続いていたところ、身内に不幸があり、そのまま私自身も体調を崩し、研究に真正面から向かえない日々がありました。そんな時も、励ましのお言葉をいただき、また少しでも研究に向かえるよう支えてくれた先生方には、どれだけ感謝しても感謝しきれません。

本研究を進めるにあたり、明楽教授、鈴浦准教授、江上助教の三人の先生方には、たくさんのご助言と、そして励ましをいただきました。深く感謝いたします。また、楽しい日々を一緒に過ごしてくれた同期の皆様、先輩・後輩の皆様に感謝いたします。なかなか一筋縄ではいかない性格の自分を支え、見守り続けてくれた家族に感謝いたします。

私は研究を精一杯頑張ったと、少なくとも自分自身ではそう思います。しかし、頑張ることができたのは、いつだって、皆様のおかげでした。

また、最後に、私が博士の学位を取ることを楽しみにしていた祖父と父に、深く感謝をいたします。