



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	バンド間遷移機構に基づく交換スピン軌道結合と電子状態・輸送特性・熱力学的特性に関する理論研究
Author(s)	林田, 健二
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第15345号
Issue Date	2023-03-23
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k15345
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/91387
Type	doctoral thesis
File Information	Kenji_Hayashida.pdf



令和四年度 博士論文
バンド間遷移機構に基づく交換スピン軌道結合と
電子状態・輸送特性・熱力学的特性に関する
理論研究

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

林田 健二

要旨

本論文では、スピン軌道結合のバンド間遷移による一般的な発生機構を理論提案し、その具体例として n 型強磁性半導体の p - d 交換相互作用がもたらすスピン軌道結合 (交換スピン軌道結合) を導出し、その交換スピン軌道結合が電子状態、輸送特性および熱力学的特性に大きい影響を与えることを示す。

スピントロニクスにおいて重要な役割を果たしている相対論的スピン軌道結合は、III-V 族半導体ではバンド間遷移による発生機構で理解されてきた。価電子帯でのスピンの依存する LS 結合が、波数に依存するバンド間遷移を通して、伝導帯においてスピンと波数に依存するスピン軌道結合をもたらす。この相対論的スピン軌道結合は III-V 族半導体とその微細構造においてスピンホール効果や Edelstein 効果によりスピン流やスピン偏極を生成しスピントロニクスの土台となっている。このバンド間遷移による相対論的スピン軌道結合はバンドギャップ等の重要なバンドパラメータを含む $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンから解析式で表されるので、結合の制御さらには材料・デバイスの改良の理論的指針を与えることができる。この解析式に基づくと、相対論的スピン軌道結合において結合強度を大きくするには LS 結合が強い重元素が必要であり、材料が重元素を含む物質に限定されるという問題点が明らかになっている。

最近、軽元素からなる反強磁性体において大きいスピン軌道結合が理論的に見出された。このスピン軌道結合は、LS 結合ではなく交換相互作用に由来することが分かっている、結合を強くするのに重元素は必要ないという利点がある。ところが、これまでの理論手法が第一原理計算や多軌道 Hubbard 模型であって結合強度の解析式がないため、結合制御の理論的指針が得られていない。

そこで本研究では、相対論的スピン軌道結合で用いられてきた $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法を一般化することにより、交換相互作用とバンド間遷移によるスピン軌道結合 (交換スピン軌道結合) を導出し、結合制御の理論的指針を得ることを目的とする。交換スピン軌道結合と相対論的スピン軌道結合は、バンド間遷移による発生機構では、価電子帯におけるスピン依存相互作用が交換相互作用か LS 結合かの違いがあるだけで統一的に記述することができる。そこで本研究ではまずスピン軌道結合のバンド間遷移による一般的な発生機構を理論提案する。次にその具体例として、 n 型強磁性半導体において価電子帯での p - d 交換相互作用がバンド間遷移により伝導帯に誘起する交換スピン軌道結合を導出し、伝導帯の電子状態を解明する。この p - d 交換スピン軌道結合の役割を明らかにするため、輸送特性として内因性異常 Hall 伝導率、熱力学的特性として強磁性転移温度 (Curie 温度) の計算結果を示す。

n 型強磁性半導体は、III-V 族半導体に鉄を添加した物質で、III 族元素を置換する鉄イオンは局在スピンを形成する。この局在スピンと半導体の伝導帯の電子スピンとの間には s - d 交換相互作用、価電子帯の電子スピンとの間には p - d 交換相互作用が働く。価電子帯での p - d 交換相互作用は、波数に依存するバンド間遷移を通して、伝導帯の電子スピンの波数と局在スピンの依存する有効磁場をもたらす。これが p - d

交換スピン軌道結合であり、ハミルトニアンには局在スピンと電子スピンと波数を含む項として現れる。

本研究において電子状態は、III-V 族半導体の $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンと s - d および p - d 交換相互作用により記述する。半導体のハミルトニアンは伝導帯と価電子帯の合わせて 8 つのバンドを記述するハミルトニアンを採用し、それ以外のエネルギーが離れたバンドの影響を取り入れる際は波数 $\mathbf{k}$ について二次の $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 近似を用いた。交換相互作用には平均場近似を適用し局在スピンを一様磁化で表す。この平均場近似により交換相互作用はキャリアスピンと局在スピンのそれぞれに働く有効磁場による Zeeman 相互作用として記述される。キャリアスピんに働く有効磁場は局在スピンの偏極（磁化）に比例し、局在スピんに働く有効磁場はキャリアスピンの偏極に比例するため自己無撞着な計算を実行する。

まず p - d 交換スピン軌道結合の解析式を得るために、伝導帯の電子に対する有効ハミルトニアンを $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論によって構築した。この有効ハミルトニアンにおいて p - d 交換スピン軌道結合は磁化とキャリアスピンと波数が結合する項として表され、その結合強度がエネルギーギャップに反比例することを解析的に明らかにした。次に p - d 交換スピン軌道結合の大きさを定量的に見積もるために、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンの数値対角化を実行した。数値的に得られた p - d 交換スピン軌道結合による伝導帯のスピン分裂は相対論的スピン軌道結合に比べて 10 倍以上大きいことが明らかになった。また n 型強磁性半導体と III-V 族半導体からなる量子井戸におけるスピン分裂の数値計算も行い、井戸に垂直な波数の量子化により、面内波数がゼロでもスピン分裂が現れることを見出した。

以上の電子状態の計算により明らかになった p - d 交換スピン軌道結合による伝導帯のスピン分裂が輸送現象にどのように反映するかを解明するため、内因性異常 Hall 伝導率を計算し、 p - d 交換相互作用を起源とする Hall 伝導率が、これまで考慮されてきた s - d 交換相互作用と相対論的スピン軌道結合を起源とする Hall 伝導率に比べて桁違いに大きいことが判明した。さらに p - d 交換 Hall 伝導率が鉄濃度とともに増加する一因がエネルギーギャップに反比例する結合強度にあることが明らかになり、 p - d 交換スピン軌道結合の解析式の有用性も示すことができた。

最後に熱力学的特性である Curie 温度における p - d 交換相互作用の影響を解明した。 n 型強磁性半導体の Curie 温度は、先行研究において s - d 交換相互作用のみを考慮して計算され、実験値に比べて桁違いに小さい値しか得られていなかった。本研究において s - d 交換相互作用とともに p - d 交換相互作用を取り入れて Curie 温度を計算したところ、実験値とオーダーが一致する計算値が得られた。また、InFeAs と InFeSb とで Curie 温度に顕著な差があるのはエネルギーギャップの違いが原因であることを突き止め、ここでも p - d 交換スピン軌道結合の解析式の有用性が示された。さらに Curie 温度が電子密度にほとんど依存しないことも見出した。これまで p 型と同様に n 型の強磁性半導体も強磁性発生機構はキャリア媒介型と考えられてきたが、本研究で得られた電子密度依存性はバンドギャップが小さい半導体の強磁性がキャリア媒介型でないことを示し、 p - d 交換相互作用とバンド間遷移によって説明できることを明らかにした。

本研究では交換スピン軌道結合が輸送特性と熱力学的特性に大きい影響を与えることを n 型強磁性半導体に対して示したが、交換相互作用とバンド間遷移をもつ系であれば交換スピン軌道結合が同様の効果をもたらす可能性があり、スピントロニクスに大きく寄与することが期待される。

目次

第 1 章	イントロダクション - スピン軌道結合の現状と課題および本研究の目的	7
1.1	相対論的スピン軌道結合	7
1.1.1	物質中の相対論的スピン軌道結合	7
1.1.2	相対論的スピン軌道結合の課題	9
1.2	交換相互作用によるスピン軌道結合 - 交換スピン軌道結合	10
1.2.1	先行研究 - 金属反強磁性体での交換スピン軌道結合	10
1.2.2	交換スピン軌道結合の課題	12
1.3	本研究の目的と本論文の構成	13
1.3.1	本研究の目的	13
1.3.2	本論文の構成および出版論文との関連	14
第 2 章	バンド構造に基づくスピン軌道結合の統一的な発生機構の提案と交換スピン軌道結合への適用	15
2.1	非自明な交換スピン軌道結合と発生機構	15
2.1.1	交換スピン軌道結合の非自明さの条件	15
2.1.2	発生機構	16
2.2	n 型強磁性半導体と方針	16
2.2.1	結晶構造とバンド構造および p - d 交換スピン軌道結合	16
2.2.2	p - d 交換スピン軌道結合の非自明さ	18
2.2.3	Curie 温度の現状と課題	19
第 3 章	任意の温度での系の設定とハミルトニアン	20
3.1	系の設定と全ハミルトニアン	20
3.1.1	全ハミルトニアン	20
3.1.2	仮想結晶近似に相当する近似	21
3.1.3	表現基底と最終的なハミルトニアン	21
3.2	半導体のハミルトニアン	22
3.2.1	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 近似	22
3.2.2	8-バンドハミルトニアン	24
3.3	交換相互作用	27

3.3.1	交換相互作用の一様成分	27
3.3.2	平均場近似	28
3.3.3	密度行列と各スピン偏極	30
3.4	化学ポテンシャル	32
3.5	ハミルトニアンのもとめと自己無撞着方程式	33
3.6	本理論の仮定のもとめ	35
第 4 章	n 型強磁性半導体における p-d 交換スピン軌道結合 - 電子構造	36
4.1	ハミルトニアン	36
4.2	量子井戸への応用	38
4.2.1	包絡関数近似とハミルトニアン	38
4.2.2	8 バンドの場合	39
4.2.3	各種ポテンシャルと境界条件	41
4.2.4	面電荷密度と化学ポテンシャル	44
4.2.5	実際の計算方法	45
4.2.6	有限差分化ハミルトニアン	45
4.3	伝導帯の有効ハミルトニアン	47
4.3.1	対称性解析による有効ハミルトニアン	47
4.3.2	摂動論による有効ハミルトニアン	51
4.4	バンド構造, スピン分裂, スピン配向の解析	57
4.4.1	三次元バルク結晶での解析	57
4.4.2	量子井戸での解析	60
第 5 章	p-d 交換スピン軌道結合の輸送特性 - 異常 Hall 効果	62
5.1	内因性異常 Hall 効果	62
5.1.1	計算方法と方針	62
5.2	Dresselhaus スピン軌道結合による Hall 伝導率	63
5.2.1	二準位系の Berry 曲率	63
5.2.2	Dresselhaus スピン軌道結合系への適用	68
5.3	p - d 交換スピン軌道結合による伝導率	70
5.4	計算結果と議論	71
第 6 章	p-d 交換スピン軌道結合の熱力学的特性 - Curie 温度	73
6.1	Curie 温度の解析方法とハミルトニアン	73
6.1.1	解析方法	73
6.1.2	ハミルトニアン	74
6.2	InFeAs	75
6.2.1	局在スピンとキャリアスピンのスピン偏極, Curie 温度の鉄濃度依存性	75
6.2.2	Curie 温度の電子密度依存性	76

6.3	InFeSb の Curie 温度と母体半導体依存性	78
第 7 章	まとめと展望	81
付録 A	III-V 族半導体の価電子帯バンド端の基底関数	85
A.1	方針	85
A.2	HH, LH の固有状態の構成	86
A.2.1	$ 3/2, +1/2\rangle$ の構成	86
A.2.2	$ 3/2, -1/2\rangle$ の構成	86
A.2.3	$ 3/2, -3/2\rangle$ の構成	87
A.3	SO の固有状態の構成	87
A.4	構成まとめ	88
付録 B	価電子帯バンド端の基底関数によるスピン演算子の行列表現	89
B.1	行列要素の計算方針	89
B.2	$\hat{s}_z$ の行列要素	89
B.2.1	$ 3/2, \pm 3/2\rangle$ の列	89
B.2.2	$ 3/2, \pm 1/2\rangle$ の列	89
B.2.3	$ 1/2, \pm 1/2\rangle$ の列	91
B.2.4	$\hat{s}_z$ の行列表示	92
B.3	$\hat{s}_{\pm}$ の行列要素	92
B.3.1	$ 3/2, +3/2\rangle$ の列	92
B.3.2	$ 3/2, +1/2\rangle$ の列	92
B.3.3	$ 3/2, -1/2\rangle$ の列	92
B.3.4	$ 3/2, -3/2\rangle$ の列	93
B.3.5	$ 1/2, +1/2\rangle$ の列	93
B.3.6	$ 1/2, -1/2\rangle$ の列	93
B.3.7	$\hat{s}_{\pm}$ の行列表示	94
B.4	$\hat{s}_{x,y}$ の行列表示	94
付録 C	Quasi-Degenerate Perturbation Theory - 有効ハミルトニアンの摂動論的構築	95
C.1	一般的な有効ハミルトニアンの表式	95
C.1.1	前提	95
C.1.2	ブロック対角化	96
C.1.3	摂動二次までの有効ハミルトニアン	99
C.2	半導体の 8 バンドハミルトニアン導出の概略	99
C.2.1	方針	100
C.2.2	運動量演算子の行列要素	104
C.2.3	位相の取り方も取り入れた行列要素	104

C.2.4	(a) 伝導帯のみを記述する有効ハミルトニアン	104
C.2.5	(b) 価電子帯のみを記述する有効ハミルトニアン	106
C.2.6	(c) での有効ハミルトニアン	108
C.2.7	(b') での有効ハミルトニアン	111
C.2.8	(b'') での有効ハミルトニアン	117
C.2.9	(a'') での有効ハミルトニアン	125
C.2.10	(c'') での有効ハミルトニアン	129
付録 D	対称性による有効ハミルトニアンの別導出法	135
D.1	Theory of Invariants による導出	135
D.2	時間反転対称操作を要素に持つ群による導出	136
付録 E	内因性異常 Hall 伝導率の線形応答理論による表式	138
付録 F	内因性異常 Hall 伝導率の母体半導体ハミルトニアンに関する比較	141
付録 G	主要な記号と用語一覧	142
付録 H	用いた物質パラメータ値	143
付録 I	有限差分ハミルトニアンの詳細	145
I.1	(1, 1), (1, 2), (2, 2) ブロック	145
I.2	(1, 3), (1, 4), (1, 5), と (2, 4), (2, 5), (2, 6) ブロック	147
I.3	(1, 7), (1, 8) と (2, 7), (2, 8) ブロック	148
I.4	(3, 3), (4, 4), (5, 5), (6, 6) と (3, 4), (4, 5), (5, 6) ブロック	150
I.5	(3, 7), (4, 7), (4, 8), (5, 7), (5, 8), (6, 8) ブロック	152
I.6	(7, 7), (7, 8), (8, 8) ブロック	153
付録 J	ハミルトニアンに現れる行列 T と J の表式	155
付録 K	量子井戸での有効ハミルトニアンに現れる Rashba 型の項の係数	156
付録 L	Curie 温度の平均場理論による解析式	157
L.1	前提	157
L.2	密度行列	158
L.3	帯磁率の定義	158
L.4	T_c の解析式	160

第 1 章

イントロダクション - スピン軌道結合の現状と課題および本研究の目的

1.1 相対論的スピン軌道結合

電子は基本的な自由度として軌道とスピンの二つの自由度を持ち、それぞれは金属、半導体や磁性の物理で中心的な役割を果たし、現代の半導体技術、磁気記録の科学技術へと結実した。近年では、その二つの自由度を結合させる際の物性物理およびデバイス応用が幅広く研究され、スピンを用いたエレクトロニクス（スピントロニクス）という広範な分野を形成している [図 1.1].

スピントロニクスの基礎物性で重要な指導原理はスピンと軌道を結合させることであり、結合様式は金属や磁性体など物質によって様々であるが、共通して重要な結合の一つに相対論的スピン軌道結合がある [1]. この結合は、真空中で運動する電子に対して印加された電場が Lorentz 変換により磁場に変換され、この磁場が Zeeman 相互作用で電子スピンと結びついて形成される結合である [図 1.2]. 厳密には Dirac 方程式の非相対論的極限で自然に導かれる結合である。

1.1.1 物質中の相対論的スピン軌道結合

真空中での相対論的スピン軌道結合が印加された電場を構成要素としたように、物質中での相対論的スピン軌道結合は印加された電場に等価であるポテンシャルの空間反転対称性の破れを必須要素とする。

素子や結晶構造などで形成されるポテンシャルが空間反転対称性の破れを伴う際、そのポテンシャルが電子に対して実効的な電場となり、真空中でそうであったように有効的な磁場（以下、**有効磁場**）に変換され、スピン自由度と結びつく [図 1.3]. ただし、物質中では併進対称性から Bloch の定理が成り立ち、波動関数が包絡波とユニットセルを繰り返しの単位とする周期部分からなる。そのため空間反転対称性の破れも基本的に包絡波と周期部分での効果に分けられる。代表的な結合は素子構造の反転対称性の破れによる包絡波部分に関する Rashba スピン軌道結合 [2-4], 三次元結晶のユニットセルの反転対称性の破れに起因した周期部分に関する Dresselhaus スピン軌道結合 [5] である。そして、いずれの場合でも多バンドの効果（特にバンド間遷移）が重要である。

物質中の相対論的スピン軌道結合は軌道とスピンを結びつけるため、その結合はエネルギーバンドで波

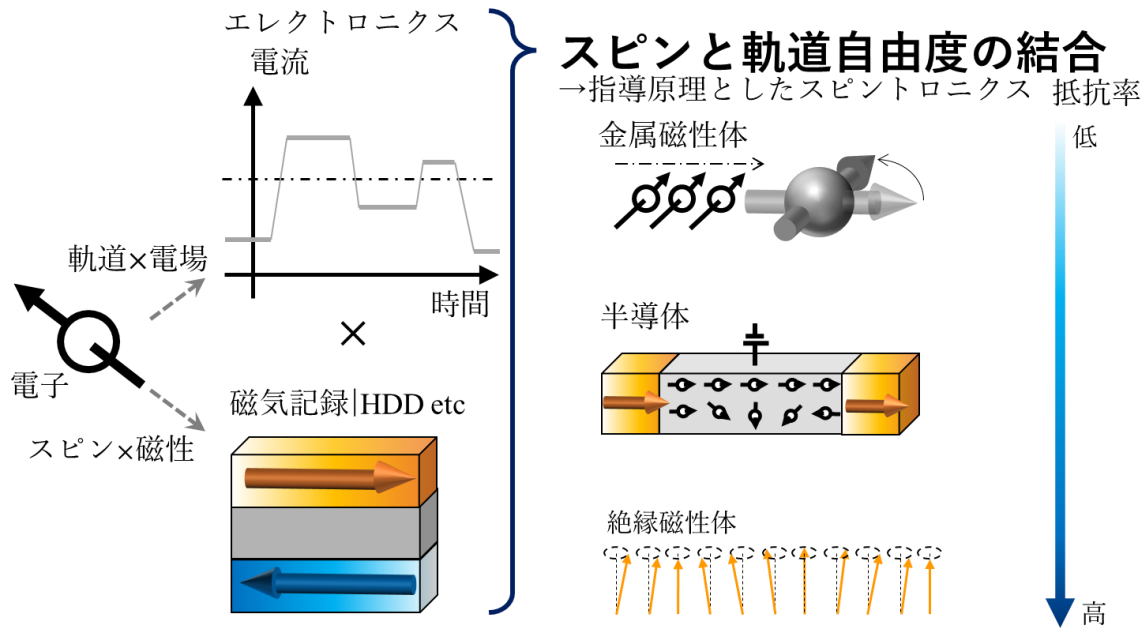


図 1.1 スピントロニクス概念図. エレクトロニクスと磁気記録で発展してきた軌道自由度とスピン自由度の制御がスピンの結合を介して合流し, その結合は金属から半導体, 絶縁体にいたるまでの広範な物質にわたる分野を形成している.

数ベクトル $\mathbf{k}$ に依存したスピン分裂をもたらす [図 1.3] [1, 6–8]. スピン分裂およびスピンの向きは $\mathbf{k}$ 依存の有効磁場から決まる. そういったスピン軌道結合誘起の有効磁場はスピントロニクスでスピンの電気的制御 [9–13], 例えばスピンホール効果によるスピン流 [14], 電流誘起スピン偏極 [15], スピン軌道トルク [12, 13, 16] として利用され [図 1.4], 新たなスピントロニクス素子の原理として活用されている. 例えばスピン軌道トルクは電流誘起スピン偏極によって生成される磁化への非平衡トルクであり, 強磁性体や反強磁性体, 磁性体のヘテロ構造での磁化スイッチングに利用されている [16].

このように応用にまで活用される有効磁場を調べる一つの理論的な手法が $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法である [1, 6, 17–20]. この手法は相対論的スピン軌道結合で重要な多バンド系を取り扱い, 加えて伝導帯など着目したバンドが他のバンドから十分に離れている (エネルギーギャップが最も大きいエネルギースケールである) 時に, エネルギーギャップといったバンド構造のパラメータで有効磁場の摂動論的な解析式を与えられる. 有効磁場の解析式は不純物ポテンシャルによるスピン軌道結合もそうだが [18–22], 有効磁場を実験で制御したり [23, 24], 量子井戸でのスピン緩和 (二重 [25, 26], 三重量子井戸 [27]) や二重量子井戸での外因性スピンホール効果 [28], 永久スピンラセン [29, 30] といったスピンの巨視的な現象の設計にも役立つ. 有効磁場は解析式による解析のみならず, 数値的なバンド計算からも解析されている [1, 6]. 実際, III-V 族半導体の量子井戸で面直方向の電場を印加したり, 井戸の成長方向の結晶方位を変えて有効磁場が調べられ, Rashba スピン軌道結合 と Dresselhaus スピン軌道結合の有効磁場が解析されている.

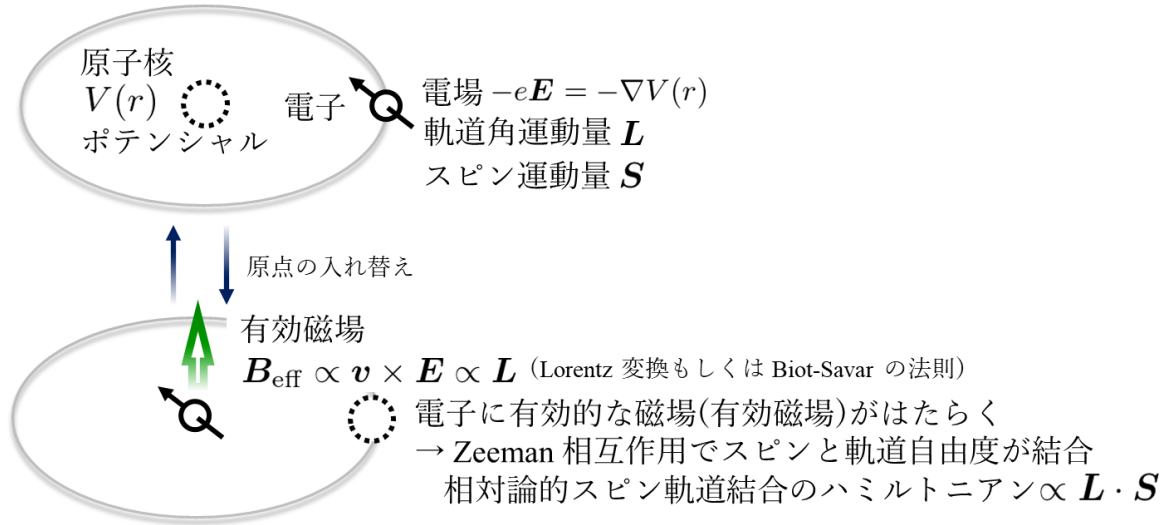


図 1.2 原子における相対論的スピン軌道結合. 原子核の周りを電場によって回転している電子を原点にとると, 古典的には Lorentz 変換もしくは Biot-Savart の法則により電子に有効的な磁場 (有効磁場) がはたらく. その磁場が Zeeman 相互作用で電子スピンと結合して相対論的スピン軌道結合が形成される.

1.1.2 相対論的スピン軌道結合の課題

物質中の相対論的スピン軌道結合は電子構造から輸送現象, 磁性体中のトルクへの応用など多岐にわたる利用が検討されている. しかし, その結合は次に挙げる基本的な課題を抱えている:

- 相対論的スピン軌道結合を利用するためには比較的重い元素を必要とする. たとえば鉛 Pb やビスマス Bi, 金 Au, プラチナ Pt, パラジウム Pd などがよく利用される. この原子番号依存性は, スピン軌道結合が原子核ポテンシャルを起源の一部に持つためである.
- 相対論的スピン軌道結合は不純物散乱 [31–34] や熱的に励起されたフォノン [21] など電子の軌道自由度に作用するランダム性を介して, 信号処理に利用する電子スピンの統計平均値 (スピン偏極) を散逸させてしまう. この現象をスピン緩和という [図 1.5]. 相対論的スピン軌道結合は信号そのものを生成する一方で, 系のランダム性によって意図しない信号の挙動も生み出してしまう.

これらの課題は相対論的スピン軌道結合を利用する限り避けられない課題であり, いずれも元素由来や系の清浄さなど微妙な困難さである. これらの詳細な課題を乗り越えていく方向は一つの研究の在り方であるが, 本論文では抜本的に, **スピンと軌道自由度を結合させる効果は相対論的スピン軌道結合のみであるのか**, という原理にまで立ち返って考察する. 相対論的でない新たなスピンと軌道の結合を提案できれば, 相対論的結合に伴う原子番号依存性の課題を回避できる. さらにスピン緩和は半導体の比較的小さな相対論的な結合のために発生していたが, 新たなスピン軌道結合が相対論的な結合よりも十分大きくなる

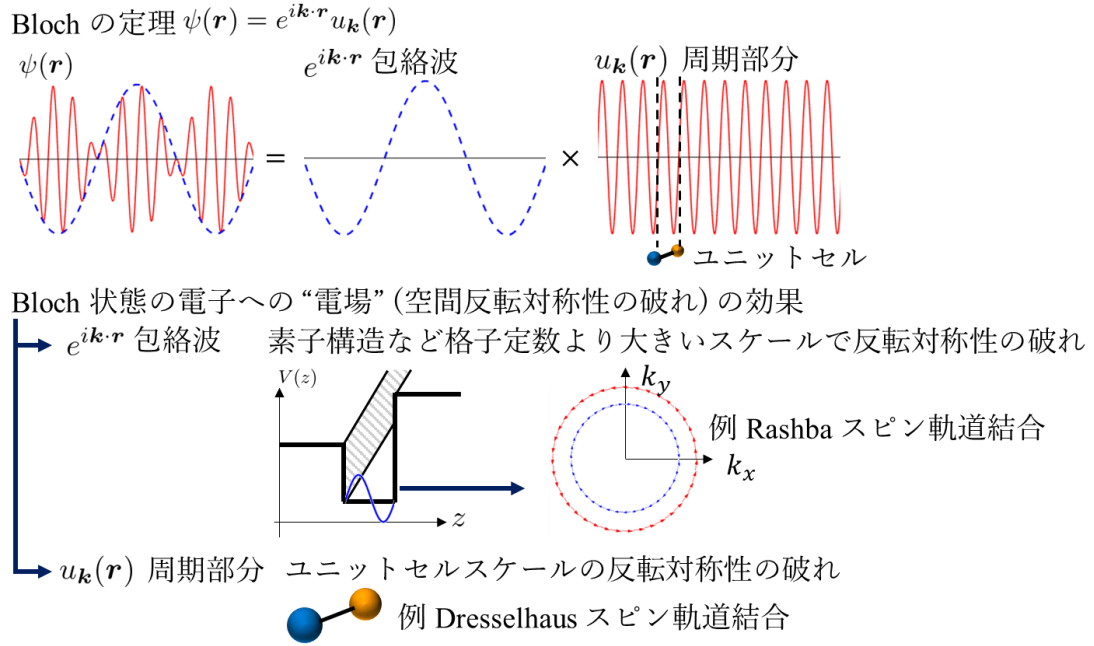


図 1.3 物質中の相対論的スピン軌道結合の概念図. 波動関数が Bloch の定理から包絡波と単位セルを繰り返しの単位とする周期部分へ分けられ, 各部分への空間反転対称性の破れの効果が各相対論的スピン軌道結合を誘起する. 包絡波への効果によるスピン軌道結合の例は Rashba スピン軌道結合であり, この結合は図のように各波数で時計回りもしくは反時計回りの有効磁場によるスピン構造を Fermi 面にもたらす. 周期部分の例は Dresselhaus スピン軌道結合を挙げられる.

ことで, スピンのダイナミクスを前提から見直すことになり, スピン緩和と異なるダイナミクスが顕著に現れると期待できる. 将来的に新たなスピン軌道結合は相対論的スピン軌道結合と並行したかたちで基礎物性から新たなスピントロニクス分野を開拓する基礎となる可能性を秘めている.

1.2 交換相互作用によるスピン軌道結合 - 交換スピン軌道結合

相対論的スピン軌道結合以外にスピンと軌道自由度を結合させる効果として交換相互作用が挙げられ, 代表的な例は分子の共有結合形成や磁性合金中のスピンの振動である [図 1.6]. 実際, 水素分子では結合性軌道で電子を原子核の中間に移動させ, 同時にスピナー重項状態を形成している. 磁性合金の局在スピンと伝導電子の交換相互作用によって, 伝導電子のスピンは局在スピンから離れるにつれて図 1.6 に示すように振動し, スピンと軌道自由度が結合している. 他にも超伝導の Cooper 対のように電子相関で結合する例も存在するが, 本研究の時点で交換相互作用によるスピン軌道結合ですら発展途上であるため, 電子相関による結合は対象としない.

1.2.1 先行研究 - 金属反強磁性体での交換スピン軌道結合

交換相互作用によるスピン軌道結合 (以下, 交換スピン軌道結合) の中でも近年, 伝導電子に現れる結合が注目されている. なお, 先行研究で交換スピン軌道結合という用語は使われていないが, 本論文で取り扱

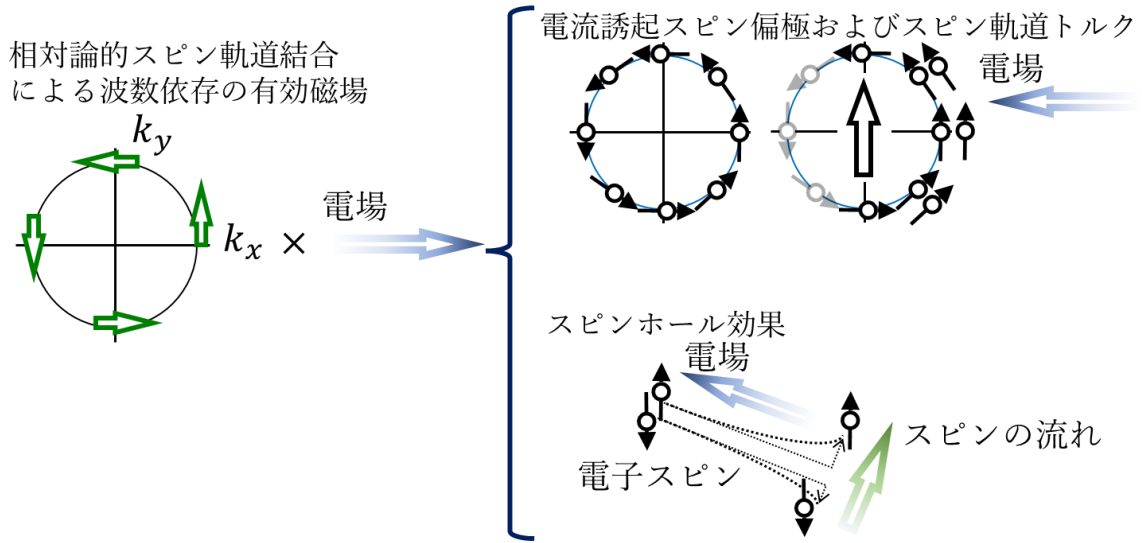


図 1.4 相対論的スピン軌道結合の応用例. 外部電場により電子の軌道自由度を励起することで, 有効磁場を励起でき, その応答として巨視的な非平衡磁気モーメントを生成する電流誘起スピン偏極, スピンホール効果によるスピンの流れが発生する. いずれでも巨視的な磁気モーメントが生成され, その磁気モーメントは磁性体に注入されてトルクとして利用されている.

う概念を明確にするために交換スピン軌道結合を用いる.

このスピン軌道結合は電子構造におけるキャリアと磁気秩序の交換相互作用の結果であり, 近年そのメカニズムとスピントロニクスへの応用へ向けて精力的に研究されている [35–44]. 研究されてきた交換スピン軌道結合はエネルギーバンドの Fermi エネルギー近傍で, 反強磁性秩序 [36, 37, 39–44] との交換相互作用により発生すると知られており, 波数 (k) 依存の非相対論的なスピン分裂をもたらす. 有機反強磁性体での理論 [35], 金属反強磁性体の理論 [36, 39–44] と実験 [37, 38, 45] は交換スピン軌道結合, その結合によるスピンホール類似の新規輸送現象とスピンへのトルク生成, GMR や TMR に類似したスピンの信号処理を提案している.

交換スピン軌道結合の例として金属反強磁性体 RuO_2 の計算例を紹介する [39, 46] [図 1.7]. 第一原理計算によると, 反強磁性体 RuO_2 の副格子を取り囲む配位子の配置が副格子間で非等価であるために [図 1.7 (b)], スピンごとに見た Fermi 面は空間的に異方性を示す [図 1.7 (a)]. このスピン依存の異方的な電子状態は反強磁性秩序に起因するため, 交換スピン軌道結合による電子状態である. なお RuO_2 の理論研究 [46] はしばしば交換スピン軌道結合という用語をつかわず, Altermagnetism という別の用語を用いている. この二つの用語の指す物理は磁性誘起の k 依存スピン分裂という点では共通しているが, 必須要素で異なる. Altermagnetism は特定の群を必須要素とするが, 後で論じるように交換スピン軌道結合はバンド間遷移を必須要素の一つとする. 注意として, バンド間遷移は結晶の対称性に関連をもつため, 交換スピン軌道結合と Altermagnetism は本質的に関連していると予想される. しかし, その違いを詳細に論じることは本論文の目的から外れるため, これ以上の議論を行わない.

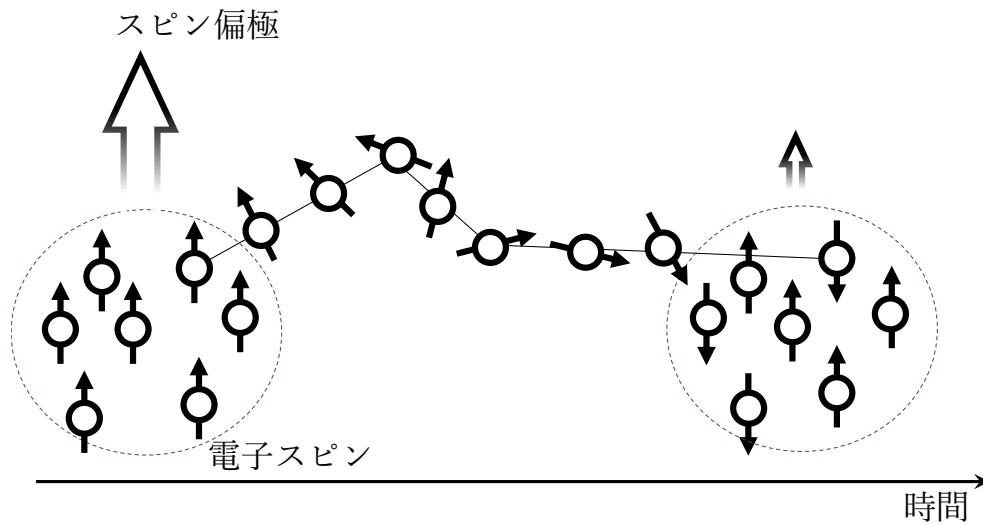


図 1.5 スピン緩和の概念図. ある時刻で相対論的スピン軌道結合と電場等によって電子スピンの向きをマクロに揃え、スピン偏極を生成したとする. 電子は物質内部で不純物散乱やフォノン散乱をうけ、軌道をランダムに変える. そのランダムな事象ごとにスピン軌道結合が電子スピンのランダムな有効磁場として作用する. その結果、一定の時間の後に電子スピンの向きがそろわなくなりスピン偏極が減衰する.

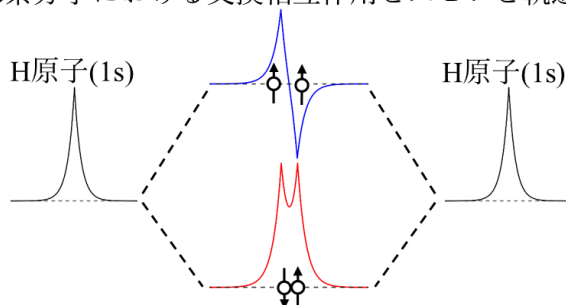
交換スピン軌道結合は起源を電子と磁気秩序の交換相互作用に持つため、相対論的スピン軌道結合のような元素依存性を持たない. 実際、有機反強磁性体の Hubbard モデルによる計算 [35] や金属反強磁性体 RuO_2 の第一原理計算 [39] は相対論的スピン軌道結合でなく磁気秩序との相互作用がスピン分裂やスピン関連の輸送係数で支配的であることを示している. このようにして交換スピン軌道結合は相対論的スピン軌道結合の抱えていた元素依存性という課題を見事に乗り越えることができる. そのため、この結合はスピントロニクスで利用可能な物質を軽元素の系まで押し広げるほどの潜在的な可能性を持っている.

1.2.2 交換スピン軌道結合の課題

交換スピン軌道結合の理論的な探索は第一原理計算や複雑な Hubbard モデルで行われている. そのため重要なバンドパラメータや結合の解析式、ひいては結合制御の理論的な指針が不明である. 例えば、有機反強磁性体の理論研究 [35] で交換相互作用によって生成された k 依存の有効磁場が提案されているが、四軌道の Hubbard モデルに基づいており、有効磁場で重要なバンドパラメータの特定や解析式、結合制御の知見を得られていない. 他に金属反強磁性体の理論計算 [36, 39, 42, 43] は第一原理計算と群論による特定のバンドの解析に基づいており、依然として交換スピン軌道結合制御の指針は不明である. 一方で相対論的な結合では $k \cdot p$ 法が用いられ、その手法はバンドパラメータの特定から解析式の導出、結合制御の指針を与えて素子の改良方法と材料の選択といった知見へと結実した. このことから、交換スピン軌道結合においても結合制御の指針を得ることは重要な課題である.

加えて交換スピン軌道結合では、この結合の磁気秩序形成での役割、反強磁性秩序以外での交換スピン軌道結合の有無 (交換スピン軌道結合の普遍性) が不明である. 具体的には交換スピン軌道結合は磁気秩序と伝導電子の交換相互作用に起因するため、自己無撞着に磁気秩序の安定化に寄与しているはずである.

水素分子における交換相互作用とスピンと軌道の結合 (2電子系)



磁性合金における交換相互作用とスピンと軌道の結合 (“1”電子系)

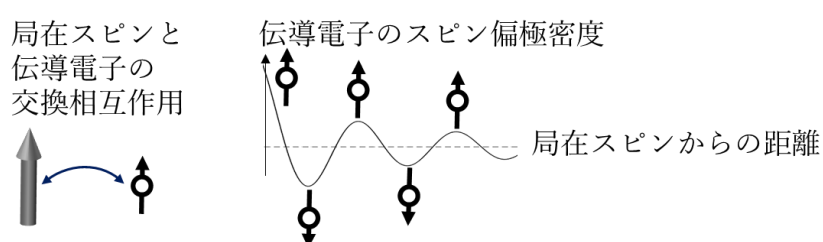


図 1.6 交換相互作用によるスピン軌道結合の代表例. 水素分子を形成する際に交換相互作用はスピン一重項を形成し, 同時に電子の位置を原子核の間へと遷移させ共有結合を形成する. 磁性合金中で局在スピンの伝導電子が交換相互作用し, 局在スピンの距離に依って伝導電子のスピン偏極密度が振動し, スピンと軌道の結合が現れている.

しかし, その熱力学的な性質は磁気秩序の種類を選ばず調べられていない. さらに交換スピン軌道結合は反強磁性体で専ら調べられており, 他の磁性体での結合といった普遍性も明らかでない.

1.3 本研究の目的と本論文の構成

1.3.1 本研究の目的

交換スピン軌道結合の課題 [1.2.2 節] をふまえて本論文での研究目的は交換スピン軌道結合制御の理論的指針を得ることである. そのため, 次の三つのステップ

- 相対論的スピン軌道結合も射程に含めたスピン軌道結合の統一的な機構を提案すること
- その機構を具体的な物質, 特に交換スピン軌道結合の普遍性を明らかにするために反強磁性体以外に適用し, 未だ知られていなかった交換スピン軌道結合を理論提案すること
- 交換スピン軌道結合による電子構造 (バンド構造, スピン分裂, スピン構造), 輸送特性, 熱力学的性質 (磁性相の安定化) といった基礎物性を明らかにすること

を通じて結合制御の理論的指針を得る.

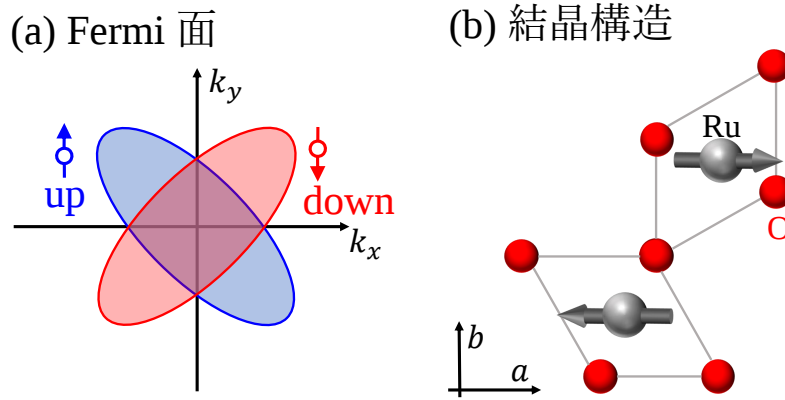


図 1.7 金属反強磁性体 RuO_2 における交換スピン軌道結合による電子状態 [39]. (a) 波数空間におけるスピン up (左) と down (右) に関する Fermi 面. (b) 反強磁性秩序を持つ際の結晶構造. 各副格子を取り囲む配位子の幾何学的な配置が副格子間で非等価であるために (b), スピン依存の異方的な電子状態が現れる (a). このスピン依存の異方性は反強磁性秩序によってもたらされるため, 交換スピン軌道結合による電子状態の性質である.

1.3.2 本論文の構成および出版論文との関連

本論文の構成は次の通りである. まず 2 章で統一的なスピン軌道結合の機構を提案し, その機構を n 型強磁性半導体に適用, p - d 交換スピン軌道結合を提示する. つづく 3 章では本論文で中心となるハミルトニアンを導き, そのハミルトニアンを単純化して電子構造の解析 [4 章], 内因性異常 Hall 効果 [5 章] に応用する. 最後に 3 章の精密なハミルトニアンに戻り, n 型強磁性半導体の磁気相転移を Curie 温度から解析し, その Curie 温度における p - d 交換相互作用の役割や実験で調べられている鉄濃度, 電子密度, 母体半導体依存性を解析, 議論する [6 章]. より詳細なまとめと展望は 7 章で述べる. 付録で本研究で用いたパラメータの値, 主要な記号と用語の一覧, 論文や文献等で導出が省かれているハミルトニアンやスピン演算子の行列表示の導出などを述べた.

本論文の 2, 4, 5 章の一部を出版論文 [47] で出版済みであり, 3, 6 章の一部を出版予定である.

第 2 章

バンド構造に基づくスピン軌道結合の統一的な発生機構の提案と交換スピン軌道結合への適用

2.1 非自明な交換スピン軌道結合と発生機構

2.1.1 交換スピン軌道結合の非自明さの条件

交換スピン軌道結合はエネルギーバンドで波数依存スピン分裂として現れるが、そのスピン分裂には空間依存する交換相互作用によるものなど自明なスピン分裂も含まれる。そこで本論文で非自明とする条件を二点挙げる：

- 一点目：交換相互作用は空間依存性を持たないとする。言い換えると、Fourier 変換した際に波数ゼロの一樣成分が支配的で、その一樣成分のみを考慮すればよいとする。もし空間依存性のある交換相互作用を対象に入れてしまうと、その実空間依存性が波数空間で波数依存スピン分裂となって現れると予想できる。この波数依存スピン分裂の出現は実空間の段階で明らかであり、自明な交換スピン軌道結合と見なせる。この自明なスピン分裂を議論から除くため、交換相互作用は空間的に一様とする。
- 二点目：着目したバンドの交換相互作用起源ではなく、別のバンドの交換相互作用によるスピン軌道結合を対象とする。例えば Fermi エネルギーが伝導帯を横切るなら、伝導帯以外のバンド、たとえば価電子帯の交換相互作用を対象とする。

またキャリア間の交換相互作用が存在すると、一般に Fermi 液体の効果として相対論的スピン軌道結合の係数が補正されると考えられる。実際、キャリア間の交換相互作用によって Rashba のスピン軌道結合によるスピン分裂が補正されると理論提案されている [48]。しかし、本理論の交換スピン軌道結合は従来の相対論的スピン軌道結合と異なる。

有機反強磁性体 [35]、金属反強磁性体の理論 [35, 36, 39–44] では理論解析を複雑なモデルか第一原理計算で解析している。そのため、得られた波数依存スピン分裂から上記の条件で予測できる自明なスピン分

裂が除かれているか明らかでない。本理論では上記の条件を踏まえて発生機構の考案まで行う。

2.1.2 発生機構

非自明な交換スピン軌道結合を探索する際、探索手法に求められる基本的な性格は物質パラメータを多バンド構造で理解しやすい形で含むこと、必要に応じて物理を見やすくするために特定のバンドへ射影して有効ハミルトニアンへの繰りこみが可能であることである。この性質を持ち合わせた電子状態の解析手法にはちょうど $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法と呼ばれる方法がある。理論的な詳細は 3.2.1 節で述べるが、要点は特定の波数 $\mathbf{k}$ 近傍で複数のバンドをエネルギーギャップや交換相互作用など理解しやすい物質パラメータから解析でき、特定のバンドへの繰りこみも容易である点である。実際、相対論的スピン軌道結合の理論研究ではその特性を利用して Dresselhaus スピン軌道結合 [5], Rashba [2–4, 18, 20] スピン軌道結合の系統的な解析がなされた。

そこで本論文は $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法を用いて交換スピン軌道結合の発生機構を提案する。特に相対論的スピン軌道結合との関連を明示するために、統一的な機構を提案する。非自明さの条件 [2.1.1 節] から発生機構で重要である要素は三つあり、ハミルトニアン中の $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ に比例した項による異なるバンド間での遷移 ($\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移)、異なるバンドをまたぐゆえにエネルギーギャップ、そしてスピン依存の相互作用である。以下、簡単さのために 2-バンドモデルで伝導帯のスピン軌道結合を対象として模式的に述べる。

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法を用いて伝導電子にはたらくスピン軌道結合の有効磁場を $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移と価電子帯に含まれる任意のスピン依存相互作用の複合効果として記述する [図 2.1]。具体的には次の三つの過程からなる。(1) 伝導帯の電子が中間過程で価電子帯に $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移する。(2) 続いて、交換相互作用や LS 結合のような価電子帯でのスピン依存相互作用によって、その電子スピンの回転する。(3) 最後に、再び $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移によって伝導帯に戻る。 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移が $\mathbf{k}$ 依存性をもつために、この機構での有効磁場は $\mathbf{k}$ 依存性を伴う。

2.2 n 型強磁性半導体と方針

本研究は $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法によるスピン軌道結合の発生機構を用いて新たな交換スピン軌道結合を提案する。そのために $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法を III-V 族半導体に磁性不純物の鉄を添加して得られる、本研究目的に適した n 型強磁性半導体 [49–56] に応用する。 n 型強磁性半導体が適している理由は三点あり、III-V 族半導体の電子構造が伝統的に $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法で解析され、 n 型半導体であるために伝導帯に着目でき、磁性イオンによって交換相互作用を価電子帯に取り入れられるためである。この物質の結晶構造など基本情報を述べたのちに、得られる交換スピン軌道結合の非自明さを議論する。

2.2.1 結晶構造とバンド構造および p - d 交換スピン軌道結合

$\text{In}_{1-x}\text{Fe}_x\text{As}$ [50, 55, 56] や $\text{In}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Sb}$ [57–59] を代表例とする n 型強磁性半導体は鉄を磁性不純物とする III-V 族、キャリア媒介型と考えられている強磁性半導体であり、マンガン添加の強磁性半導体 [10, 60–63] のようにスピントロニクスへの応用に向けて研究されてきた。強磁性半導体の強磁性相がキャリア媒介型であることは電子密度を変化させると急激に T_c が立ち上がることから予想されている [49]。

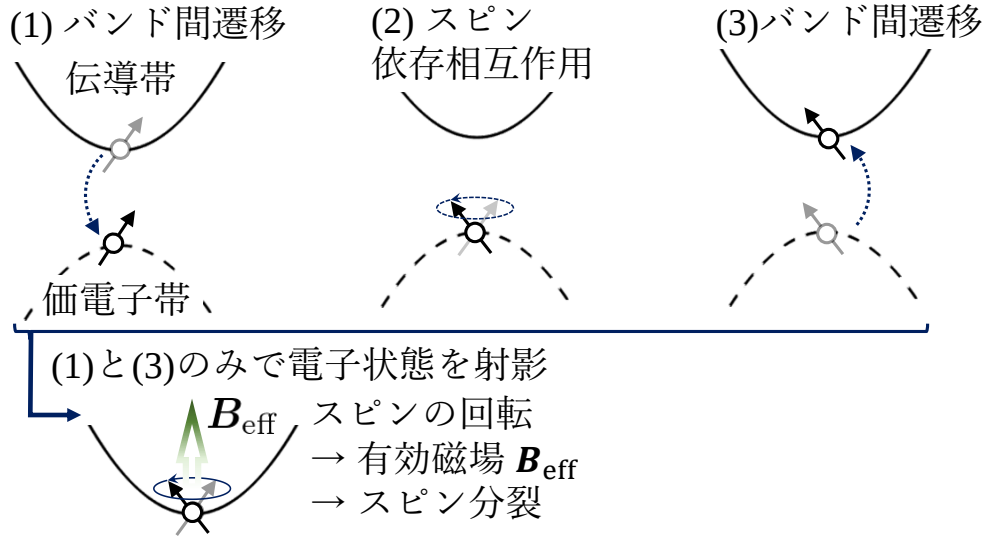


図 2.1 $k \cdot p$ バンド間遷移 [17] とスピン依存相互作用を通じて有効磁場 B_{eff} を生成する統一的な機構. ただし, 簡単さのために伝導帯と価電子帯から成る 2-バンドモデルで示した. 過程 (1) と (3) のバンド間遷移は電子の波数 k に依存しており, 過程 (2) の価電子帯でのスピン依存相互作用はその電子スピンを回転させる. 伝導帯に電子状態を射影して見た際, (1-3) の結果として電子スピンの回転が現れており, その回転は伝導電子に作用する k 依存の有効磁場 $B_{\text{eff}}(k)$ による回転として理解でき, バンド構造では波数依存スピン分裂として現れる. 図は文献 [47] より引用 (©2022 American Physical Society).

結晶構造は, インジウム In を鉄イオンが x パーセント不規則に置換した zinc-blende 構造である [図 2.2 (a)]. 鉄不純物は大きさ $5/2$ のスピンをもつ Fe^{3+} イオンの磁性不純物としてのみ機能し, インジウムイオン In^{3+} を置換しても電子数に変化をもたらさず, 他の不純物がキャリアを注入する. 例えば, ベリリウム Be は InFeAs において不純物一つにつき電子二つを供給するドナーとしてはたらく [50, 55, 56]. なお実験で鉄のクラスター等が発生していないことは確認されている [50]. 興味深いことに狭いエネルギーギャップの母体半導体であるほど (例えば InFeSb [57–59]), より広いギャップの強磁性半導体 (例えば InFeAs) よりも高い Curie 温度 T_c を示す [49].

結晶構造がそうであるように, バンド構造もまた各バンドで d 軌道の局在スピンとバンド電子間の交換相互作用によるスピン分裂を伴った III-V 族半導体のバンド構造である. 実際, ドナーをドーピングした InFeAs の ARPES 測定 [56] (エネルギー分解能 120 meV) で母体半導体のバンド構造が確認されている. 伝導帯と価電子帯の各バンド端が s, p 軌道であるため, 各バンドはそれぞれ $s-d$ と $p-d$ 交換相互作用を持っている [図 2.2 (b)]. n 型強磁性半導体は, 図 2.1 の過程 (2) におけるスピン依存相互作用として, 価電子帯の相対論的スピン軌道結合と $p-d$ 交換相互作用を持つ. 実際, 図 2.1 の過程 (1-3) が図 2.2 (b1-b3) に対応し, $p-d$ 交換相互作用とバンド間遷移に起因したスピン軌道結合 (以下, $p-d$ 交換スピン軌道結合) が生み出される.

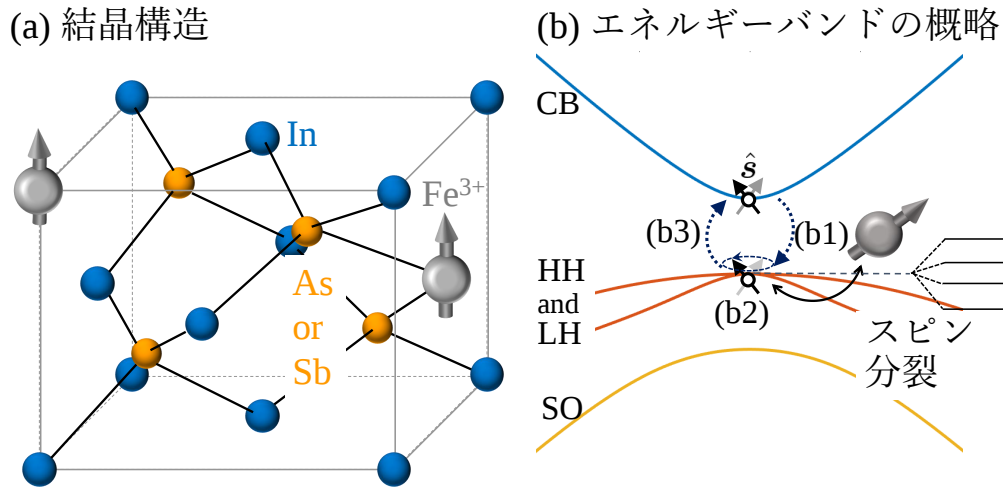


図 2.2 (a) n 型強磁性半導体の結晶構造. 基本的な結晶構造は zinc-blende 構造であり, 鉄イオン (Fe^{3+}) のスピンはインジウム In のサイトをランダムに占有する. (b) n 型強磁性半導体のエネルギーバンドの概形と図 2.1 の機構に従う, 伝導帯 (CB) で発生するスピン軌道結合 (b1-b3). 伝導帯と価電子帯それぞれで s - d , p - d 交換相互作用を持つ. Heavy Hole (HH) と Light Hole (LH) バンドでのキャリアスピン $\hat{s}$ と Fe^{3+} スピン間の p - d 交換によるスピン分裂を示している. 見やすさのために CB と split-off バンド (SO) でのスピン分裂を省略した. CB のスピン軌道結合は相対論的, 交換スピン軌道結合両方に関して $\mathbf{k}$ 依存のスピンの回転として現れる. その機構は次の通りである (b1-b3). (b1) 最初に CB の電子が $\mathbf{k}$ 依存のバンド間遷移によって価電子帯のいずれかに遷移する. (b2) 次に電子スピンはスピン依存相互作用によって回転する (図では p - d 交換相互作用のみ図示). (b3) 最後にスピンを回転させた電子が CB にバンド間遷移を通じて戻り, 有効的なスピンの回転が現れる. 図 (a) は文献 [47] より引用 (©2022 American Physical Society).

2.2.2 p - d 交換スピン軌道結合の非自明さ

前節 2.2.1 で定性的に予測された p - d 交換スピン軌道結合は一般的な機構 [図 2.1] もしくは n 型強磁性半導体での機構 [図 2.2 (b1-b3)] から 2.1.1 節で示した非自明さの要件を満たしているとわかる.

まず交換相互作用の空間依存性を見ると, 考慮する交換相互作用は Γ 点 ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$ の点) での相互作用であり, ちょうど交換相互作用の一様成分である.

さらに n 型強磁性半導体であるため, 低エネルギー励起などの基本的な物性のために着目するバンドは伝導帯である. 一方で, その伝導帯にスピン軌道結合をもたらす交換相互作用として着目する相互作用は価電子帯の交換相互作用であり, 着目するバンドと異なる.

このようにして n 型強磁性半導体で研究する交換スピン軌道結合は非自明な結合である.

2.2.3 Curie 温度の現状と課題

1.2.2 節で述べたように交換スピン軌道結合は磁気秩序との交換相互作用に起因するため、本来は自己無撞着に磁性相の安定化に寄与しているはずである。本論文で取り上げる n 型強磁性半導体の Curie 温度には伝導帯の s - d 交換のみで説明できない点があり、価電子帯 p - d 交換相互作用による寄与を期待できる。

伝導帯のスピン分裂を測定するトンネル分光測定 [55] では、 n 型強磁性半導体の InFeAs の T_c を、測定したスピン分裂と平均場理論の T_c の表式から s - d 交換のみで見積もった。その見積もられた値は数ケルビン程度であり、同時に Fe 6, 8 % の試料に対して測定された T_c の 42, 65 ケルビンとオーダーで一致していない。

本論文は伝導帯で s - d 交換のみならず p - d 交換も考慮するため、伝導帯で考慮されていなかったスピン分裂を理論的に得られ、 T_c で新たな理解を期待できる。また、 n 型強磁性半導体で T_c への交換スピン軌道結合の効果を明確にしておくことはスピン軌道結合の基礎物性の側面からも重要である。

第 3 章

任意の温度での系の設定とハミルトニアン

この章では本論文で中心となる $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンを母体半導体のハミルトニアンと交換相互作用で構成する. このハミルトニアンを後の章で n 型強磁性半導体の電子状態や輸送特性, 熱力学的特性の解析に用いる.

3.1 系の設定と全ハミルトニアン

3.1.1 全ハミルトニアン

対象とする物質は n 型強磁性半導体 [図 2.2 (a)] である. そこで電子状態を記述するハミルトニアンも結晶構造同様に, 半導体のハミルトニアンと磁性不純物の局在スピンと半導体中の電子スピンの結合である交換相互作用から成る. 対象とする全ハミルトニアンと Schrödinger 方程式は

$$H = H_0 + H_{\text{ex}}, \quad (3.1)$$

$$(H_0 + H_{\text{ex}}) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle, \quad (3.2)$$

であり, E と $|\Psi\rangle$ は固有エネルギーと固有ケット, H_0 と H_{ex} は母体半導体の $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアン, そしてキャリアと局在スピンの交換相互作用である.

半導体のハミルトニアン H_0 は

$$H_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_0(\hat{\mathbf{r}}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla V_0(\hat{\mathbf{r}})) \cdot \hat{\mathbf{p}}, \quad (3.3)$$

$$V_0(\hat{\mathbf{r}} + \mathbf{R}) = V_0(\hat{\mathbf{r}}), \quad (3.4)$$

である. $\hat{\mathbf{r}}$ は電子の位置演算子, $\hat{\mathbf{p}}$ は正準運動量演算子, m_0 は真空の質量, $\hbar$ はプランク定数を 2π で割った値, c は真空中の光の速度, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ はパウリスピン, $V_0(\hat{\mathbf{r}})$ は周期性を持つ結晶のポテンシャル, $\mathbf{R}$ は格子ベクトルを表す.

交換相互作用 H_{ex} は

$$H_{\text{ex}} = - \sum_{\mathbf{R}_I} J(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}_I) \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_I, \quad (3.5)$$

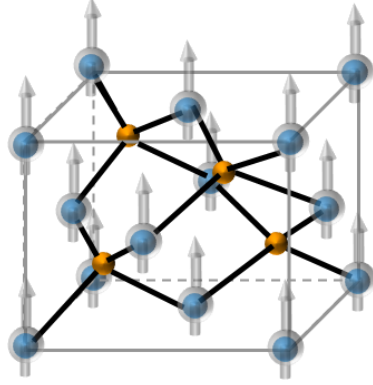


図 3.1 仮想結晶近似に相当する近似の概念図. 本来ランダムに配置されている磁性不純物がドーピングの割合だけ全ての III 族サイトを占める. 図中の薄い鉄原子はドーピングの割合だけ III 族サイトを占めている様子を指し示す. この仮定により母体半導体の周期性が回復される.

であり, $\mathbf{R}_I$ は磁性不純物の位置, $\hat{s}(=\hat{\sigma}/2)$ はキャリアのスピン演算子, $\hat{\mathbf{S}}_I$ は局在スピンの演算子, J は交換相互作用の係数である. 和は局在スピンすべてにわたって取るとする.

3.1.2 仮想結晶近似に相当する近似

以下, 磁性不純物によるランダムなポテンシャルを簡単に取り扱うために仮想結晶近似に相当する近似を採用する [図 3.1]. この近似はランダムに鉄原子の分布した結晶を全てのインジウムサイトでその添加割合だけ重ね合わさった結晶で近似する. この近似のために母体半導体の周期性が回復している. その結果, Bloch 関数に課す周期性が母体半導体と一致し, 交換相互作用の扱いやすい行列表示は母体半導体の Bloch 関数を用いた表示である. この近似は鉄-V 族元素間のポテンシャル差と In-V 族元素のポテンシャル差が比較的近いときに良い近似となる.

3.1.3 表現基底と最終的なハミルトニアン

半導体のハミルトニアン H_0 と交換相互作用 H_{ex} の最終的な表現基底は表 3.1 の基底とする. 初めの表現基底は式 (3.6) であるが, 表 3.1 の基底にユニタリー変換 U で変換する. このユニタリー変換の過程を陽に述べると, Schrödinger 方程式 (3.2) に対して

$$U^\dagger(H_0 + H_{\text{ex}})UU^\dagger|\Psi\rangle = EU^\dagger|\Psi\rangle,$$

の形で表せる. $U^\dagger H_0 U$ が 3.2.2 節で示すハミルトニアンであり, $U^\dagger H_{\text{ex}} U$ は 3.3.2 節で示す交換相互作用である. このようにして, 最終的にハミルトニアンが表 3.1 の表現基底で得られる.

以下, 各ハミルトニアンの導出を議論する.

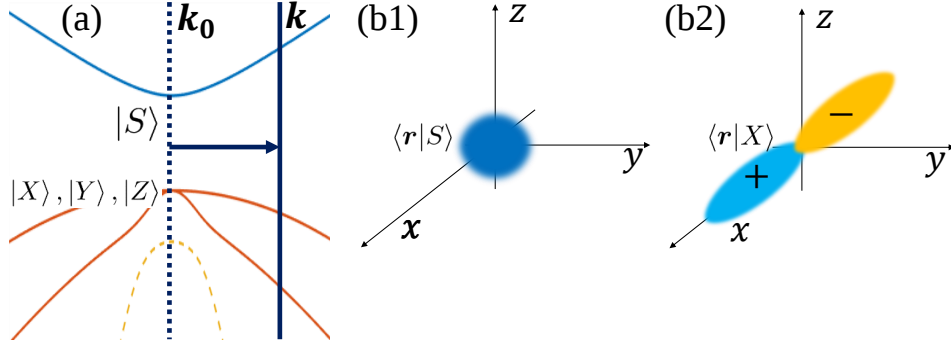


図 3.2 (a) $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法概念図と (b1, b2) 用いる基底関数の軌道の例. (a) $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法はある波数 $\mathbf{k}_0$ での固有状態が判明していると仮定し、ハミルトニアンに現れる $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ という内積の項 ($\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移の項) を摂動項とし、任意の波数 $\mathbf{k}$ における電子状態を求める. (a) と (b1, b2) での $|S\rangle$ は実空間で球対称な軌道であり、波数 $\mathbf{k}_0$ での伝導帯下端にあり、 $|X\rangle$ は p_x 軌道のような分布を示す軌道であり、 x 軸方向に鉄アレイ状に伸びる. $|Y\rangle, |Z\rangle$ は $|X\rangle$ で x 軸を y, z 軸に取り替えて得られる軌道である.

3.2 半導体のハミルトニアン

3.2.1 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 近似

半導体のハミルトニアン H_0 [式 (3.3)] に $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法 ($\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 近似) [64] による多バンドハミルトニアンを用いる.

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法は特定の波数 $\mathbf{k}_0$ での固有状態が判明していると仮定し、その状態からのずれを摂動的に取り入れて電子状態を近似する [図 3.2 (a)]. たとえば、波数 $\mathbf{k}_0$ での固有状態が各バンドごとに図 3.2 (b1, b2) に示すような軌道を持つ状態で判明しているとする. その状態を用いて $\mathbf{k}_0$ 近傍の任意の波数 $\mathbf{k}$ の状態を求める. 特にハミルトニアンで $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ という内積に比例する項 ($\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移の項) によってノンゼロの $\mathbf{k}$ において、価電子帯の効果を伝導帯に取り入れて電子状態が得られる. 価電子帯の代表的な効果の一つは伝導帯の有効質量である [17]. 他にも、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法は相対論的スピン軌道結合 (Rashba [2–4, 18], Dresselhaus [5]) を記述でき、本論文で議論するように交換スピン軌道結合も統一的に記述できる [図 2.2 (b1-b3)]. H_{ex} は 3.3 節で議論し、本節は H_0 のみに着目する.

Schrödinger 方程式は

$$\begin{aligned} H_0 |n\mathbf{k}\rangle &= E_{n\mathbf{k}} |n\mathbf{k}\rangle, \\ \langle \mathbf{r} | n\mathbf{k} \rangle &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \\ \langle \mathbf{r} | u_{n\mathbf{k}} \rangle &= u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

である. $\langle \mathbf{r} | n\mathbf{k} \rangle$ はバンド n , 波数 $\mathbf{k}$ の固有エネルギー $E_{n\mathbf{k}}$ に関する位置 $\mathbf{r}$ での Bloch 関数である. 先の

Schrödinger 方程式に Bloch 関数を代入し, $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ で両辺を割ると, 方程式は

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla V_0(\mathbf{r})) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0c^2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla V_0(\mathbf{r}) \right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

である. 特定の波数 $\mathbf{k}_0$ における Bloch 関数の周期部分 $\{|u_{n\mathbf{k}_0}\rangle\}$ は完全系をなすため, バンド n , 波数 $\mathbf{k}$ での $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ を $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}$ (Γ 点) の周期部分 $\{|u_{n\mathbf{k}_0}\rangle\}$ で展開して

$$|u_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\nu', \sigma'} c_{n\nu'\sigma'}(\mathbf{k}) |\nu'\sigma'\rangle, \quad (3.6)$$

$$|\nu'\sigma'\rangle \equiv |u_{\nu'\mathbf{0}}\rangle \otimes |\sigma'\rangle \quad \sigma' = \uparrow, \downarrow,$$

である. ν' は図 3.2 (b1, b2) に示すような軌道の指標であり, $c_{n\nu'\sigma'}$ を展開係数とし, 後の解析のためにスピンを含まないバンド端で展開した. このバンド端の固有ベクトルは先の Schrödinger 方程式で相対論的スピン軌道結合を落として

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \right] |u_{\nu'\mathbf{0}}\rangle = E_{\nu'\mathbf{0}} |u_{\nu'\mathbf{0}}\rangle \quad (3.7)$$

で決まる.

左から $\langle\nu\sigma|$ をかけて, 最終的に展開係数で表現した Schrödinger 方程式は

$$\sum_{\nu', \sigma'} \left\{ \left[E_{\nu'\mathbf{0}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\nu\nu'} + \Delta_{\nu\nu'} \right\} c_{n\nu'\sigma'}(\mathbf{k}) = E_{n\mathbf{k}} c_{n\nu\sigma}(\mathbf{k}) \quad (3.8)$$

$$\mathbf{P}_{\nu\nu'} = \langle\nu\sigma|\hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0c^2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla V_0(\hat{\mathbf{r}})|\nu'\sigma'\rangle = \langle\nu|\hat{\mathbf{p}}|\nu'\rangle \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\hbar}{4m_0c^2} \langle\sigma|\hat{\boldsymbol{\sigma}}|\sigma'\rangle \times \langle\nu|\nabla V_0(\hat{\mathbf{r}})|\nu'\rangle,$$

$$\Delta_{\nu\nu'} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \langle\nu\sigma|(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla V_0(\hat{\mathbf{r}})) \cdot \hat{\mathbf{p}}|\nu'\sigma'\rangle = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \langle\sigma|\hat{\boldsymbol{\sigma}}|\sigma'\rangle \cdot \langle\nu|\nabla V_0 \times \hat{\mathbf{p}}|\nu'\rangle,$$

である.

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法の要点をまとめると次の点である.

- 論理の要点

- 波数 $\mathbf{k}$ は Bloch の定理のみで定義されるため, 強束縛近似や第一原理計算と同様に第一 Brillouin ゾーンの波数である. 自由電子ガスモデルでは結晶を格子定数 $a \rightarrow 0$ の極限で定義される連続体とし, $\pi/a \rightarrow \infty$ となり波数は無限大までとる. 一方で $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法では上記で示した通り, 単に Bloch の定理のみを用い, 有効ハミルトニアンを構築する際もユニットセルの情報を対称性, 特定の波数での基底関数, バンドパラメータで取り入れるためユニットセルを塗りつぶさずにバンド計算する. さらに取り入れる基底関数を無限個取り入れれば第一 Brillouin ゾーン全体で厳密なバンドを得られる. 実際, Si や Ge [65], InAs など III-V 族半導体 [66] で 15, 30 個の基底関数を取り入れて第一 Brillouin ゾーン全体のバンドが再現できている.
- 特定の波数 $\mathbf{k}_0$ での状態は判明しているとする. 特定の波数におけるバンド構造のパラメータには第一原理計算, 実験による値を用いる.
- $\mathbf{k}_0$ から離れた $\mathbf{k}$ 点の状態を $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 項から計算する. その際, 特定の波数 $\mathbf{k}_0$ の固有ベクトルを与えるハミルトニアン以外が摂動項となる. その摂動項に $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 項も含まれており, そのために調べられる状態は $\mathbf{k}_0$ 近傍の状態に限られる.

- $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 近似の精度について

- 波数 $\mathbf{k}_0$ での状態の固有ベクトルとして無限個を取り入れれば厳密である。しかし、実際の計算では有限個に限られる。有限個に限る際は、Fermi エネルギー近傍のバンドで対象とする現象に關与するエネルギー範囲に限る。
- $\mathbf{k}_0$ 近傍として許容できる範囲は解析の詳細に依存する。例えば用いる物質パラメータの精度であったり、摂動項の次数、解析の対象とする現象に用いる他の近似などである。

- 摂動項によるパラメータについて

- ノンゼロのパラメータは用いる表現基底の位相、 $\mathbf{k}_0$ における Bloch 関数の周期部分の対称性で決まる。
- 取り入れる対称性は $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}$ の Γ 点であれば、実空間のユニットセルの対称性と同一である。もし他の高対称点で展開するのであれば、そこでの点群に従う。
- 実際に有効ハミルトニアンを導く時は Quasi-Degenerate Perturbation Theory を群論による波数依存性の特定などと組み合わせて用いる。そうすることで群論から漏れなく項を特定できる。

3.2.2 8-バンドハミルトニアン

半導体のバンドを記述するハミルトニアンは Quasi-Degenerate Perturbation Theory [1] [図 C.1] によって式 (3.8) のハミルトニアンで $\mathbf{P}_{\nu\nu'}, \Delta_{\nu\nu'}$ の項を摂動項の二次まで残して組み立てられる。ただし、計算が長大であるため詳細を付録 C に回した。そのハミルトニアンは群論によっても導かれる [1]。以下では、その結果のみ記す。

半導体の電子状態を記述するハミルトニアンは

$$H_0 = \begin{bmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_v \end{bmatrix}, \quad (3.9)$$

であり、8-バンドハミルトニアンと呼ぶ。各ブロックは伝導帯 H_c 、価電子帯 H_v 、そしてバンド間遷移 H_{cv} を記述する。物質パラメータは提案されている値 [1, 67] [付録 H] を用い、 x, y, z 軸をそれぞれ [100], [010], [001] 方向とした。実験 [49–56] で鉄添加による主だった格子歪が観測されていないことから、鉄による格子定数の変化およびバンドパラメータの変化を無視する。

伝導帯のバンド端を含むブロック H_c は

$$\begin{aligned} H_c &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m'_c} \hat{1}_\sigma, \quad k = |\mathbf{k}| \\ \frac{m_0}{m'_c} &= \frac{m_0}{m_c} - \frac{E_P}{3} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_g} \right), \\ E_P &= \frac{2m_0}{\hbar^2} P^2, \end{aligned}$$

である。 $\hat{1}_\sigma$ は 2×2 の単位行列 (スピン空間の単位演算子)、 m_c は伝導帯バンド端の有効質量である。 E_g と Δ_g はバンドギャップと split-off ギャップであり、 P は Kane の行列要素である [17]。

価電子帯のバンド端を含むブロック H_v は

$$H_v = \begin{bmatrix} h_{v11} & h_{v12} & h_{v13} & 0 & h_{v15} & h_{v16} \\ & h_{v22} & 0 & h_{v13} & h_{v25} & h_{v26} \\ & & h_{v22} & -h_{v12} & h_{v26}^* & -h_{v25} \\ & \dagger & & h_{v11} & -h_{v16}^* & h_{v15}^* \\ & & & & h_{v55} & 0 \\ & & & & & h_{v55} \end{bmatrix} \\ - \text{diag} [E_g, E_g, E_g, E_g, E_g + \Delta_g, E_g + \Delta_g] \\ + C_k \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2}k_+ & k_z & -\frac{\sqrt{3}}{2}k_- & \frac{1}{2\sqrt{2}}k_+ & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z \\ & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}k_+ & -k_z & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_+ \\ & & 0 & -\frac{1}{2}k_+ & \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_- & 0 \\ & & & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z & -\frac{1}{2\sqrt{2}}k_- \\ & \dagger & & & 0 & 0 \\ & & & & & 0 \end{bmatrix},$$

である. C_k は価電子帯ブロックにおける相対論的スピン軌道結合によるバンドパラメータの一つである.

表 3.1 行列表示のための基底関数. $|S\rangle$ は伝導帯のバンド端にある s 軌道, $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ は価電子帯 (HH, LH, SO) のバンド端にある p 軌道を表す. $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ はスピン up, down の状態を表し, 量子化軸は $[001]$ 方向に平行な z 軸とする. ハミルトニアンの形の簡単さのために s, p 軌道の位相をそれぞれ実, 純虚数とする [1]. 価電子帯のバンド端 Bloch 関数の構成は付録 A に述べた.

バンド端	基底関数
CB	$ S, \uparrow\rangle$
CB	$ S, \downarrow\rangle$
HH	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(X, \uparrow\rangle + i Y, \uparrow\rangle)$
LH	$-\frac{1}{\sqrt{6}}(X, \downarrow\rangle + i Y, \downarrow\rangle) + \sqrt{\frac{2}{3}} Z, \uparrow\rangle$
LH	$\frac{1}{\sqrt{6}}(X, \uparrow\rangle - i Y, \uparrow\rangle) + \sqrt{\frac{2}{3}} Z, \downarrow\rangle$
HH	$\frac{1}{\sqrt{2}}(X, \downarrow\rangle - i Y, \downarrow\rangle)$
SO	$-\frac{1}{\sqrt{3}}(X, \downarrow\rangle + i Y, \downarrow\rangle) - \frac{1}{\sqrt{3}} Z, \uparrow\rangle$
SO	$-\frac{1}{\sqrt{3}}(X, \uparrow\rangle - i Y, \uparrow\rangle) + \frac{1}{\sqrt{3}} Z, \downarrow\rangle$

$\text{diag}[x, y, z, \dots]$ は $x, y, z, \dots$ を対角成分に持つ対角行列である. 第一項目の行列要素の具体的な表式は

$$\begin{aligned}
h_{v11} &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 + \gamma'_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 - 2\gamma'_2)k_z^2, \\
h_{v22} &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 - \gamma'_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 + 2\gamma'_2)k_z^2, \\
h_{v55} &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_1 k^2, \\
h_{v12} &= 2\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_z k_-, \\
h_{v13} &= \sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2(k_x^2 - k_y^2) - 2i\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_x k_y, \\
h_{v15} &= -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_z k_-, \\
h_{v16} &= -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2(k_x^2 - k_y^2) + 2i\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_x k_y, \\
h_{v25} &= -\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \\
h_{v26} &= 3\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_z k_-,
\end{aligned} \tag{3.10}$$

である. Reduced バンドパラメータ γ'_i [1, 68] は着目したバンド以外 (Remote バンド) との遷移行列要素によるパラメータを表し, 表式は

$$\gamma'_1 = \gamma_1 - \frac{1}{3}\frac{E_P}{E_g}, \quad \gamma'_2 = \gamma_2 - \frac{1}{6}\frac{E_P}{E_g}, \quad \gamma'_3 = \gamma_3 - \frac{1}{6}\frac{E_P}{E_g}, \tag{3.11}$$

である. γ_i は Luttinger パラメータ [67, 69] である.

バンド間遷移を記述するブロック H_{cv} は

$$H_{cv} = \begin{bmatrix} h_{cv1} & h_{cv2} & \frac{1}{\sqrt{3}}h_{cv3} & 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}}h_{cv2} & -\sqrt{\frac{2}{3}}h_{cv3} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}h_{cv1} & h_{cv2} & h_{cv3} & \sqrt{\frac{2}{3}}h_{cv1} & \frac{1}{\sqrt{2}}h_{cv2} \end{bmatrix},$$

であり, 行列要素の表式は

$$\begin{aligned}
h_{cv1} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ + \frac{1}{\sqrt{2}}B'k_z k_-, \\
h_{cv2} &= \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z + i\sqrt{\frac{2}{3}}B'k_x k_y, \\
h_{cv3} &= \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_- + \frac{1}{\sqrt{2}}B'k_z k_+,
\end{aligned}$$

である. B' は Kane の B パラメータを変換したバンドパラメータである.

3.3 交換相互作用

3.3.1 交換相互作用の一樣成分

仮想結晶近似に相当する近似 [図 3.1] のために局在スピンとキャリアの交換相互作用 [式 (3.5)] は結晶の周期に関する周期関数である。そのため、交換相互作用の係数を Fourier 変換すると

$$J(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}_I) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} J_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}_I)},$$

である。\$V\$ は系の体積である。考えている磁気秩序は結晶内部の一樣な強磁性であるため、Fourier 係数 \$J_{\mathbf{q}}\$ のうちで空間的に一樣な成分 \$\mathbf{q} = \mathbf{0}\$ が一樣な強磁性秩序と一貫しており、\$J_{\mathbf{0}}\$ が支配的であると仮定できる [70]。その場合、Fourier 変換の式から

$$J(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}_I) \simeq \frac{J_0}{V},$$

のかたちに近似できる。ここで \$J_0\$ の次元はエネルギーと体積の積である。交換相互作用は

$$H_{\text{ex}} = - \sum_{\mathbf{R}_I} \frac{J_0}{V} \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_I,$$

である。このようにして一樣成分のみを取ることで交換相互作用の係数の位置依存性を無視できる。

さらに表 3.1 の基底関数で表示するために、キャリアのスピン演算子をバンド端 \$n\$ の状態 \$\{|n, \mathbf{0}\rangle\}\$ による表現への射影演算子 \$\hat{P}_n\$ で射影する。同時にバンド端での交換相互作用がバンド端ごとに異なると考えられるため、その \$n\$ 依存性を取り入れて交換相互作用は

$$H_{\text{ex}} = - \sum_n \sum_{\mathbf{R}_I} \frac{J_{n-d}}{V} (\hat{P}_n \hat{\mathbf{s}}) \cdot \hat{\mathbf{S}}_I, \quad (3.12)$$

である。\$\{|n, \mathbf{0}\rangle\}\$ の完全性 \$\sum_n \hat{P}_n = \hat{1}\$ (\$\hat{1}\$ は単位演算子) によってバンド端 \$n\$ に関する和を取り入れた。また、バンド端 \$n\$ ごとの \$J_0\$ を \$|n, \mathbf{0}\rangle\$ と局在スピンの \$d\$ 電子の相互作用であることから \$J_{n-d}\$ と書いた。

本論文ではギャップに最も近い伝導帯と価電子帯のみを考慮するため [図 2.2 (b)], それぞれのバンド端に関する射影演算子は

$$\hat{P}_c = |S, \uparrow\rangle \langle S, \uparrow| + |S, \downarrow\rangle \langle S, \downarrow| = \begin{bmatrix} I_c & O_{cv} \\ O_{cv}^\dagger & O_v \end{bmatrix},$$

$$\hat{P}_v = |+3/2, 3/2\rangle \langle +3/2, 3/2| + \cdots + |-1/2, 1/2\rangle \langle -1/2, 1/2| = \begin{bmatrix} O_c & O_{cv} \\ O_{cv}^\dagger & I_v \end{bmatrix},$$

であり、射影演算子の定義 \$\hat{P}_{c(v)}^2 = \hat{P}_{c(v)}\$, \$\hat{P}_c + \hat{P}_v = \hat{1}\$ (\$\hat{1}\$ は八次元の単位行列で表される単位演算子) を満たす。射影を伴ったキャリアのスピン演算子は

$$\begin{aligned} \hat{P}_c \hat{\mathbf{s}} &= \begin{bmatrix} I_c & O_{cv} \\ O_{cv}^\dagger & O_v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{s}}^{(s)} & O_{cv} \\ O_{cv}^\dagger & \hat{\mathbf{s}}^{(p)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{s}}^{(s)} & O_{cv} \\ O_{cv}^\dagger & O_v \end{bmatrix}, \\ \hat{P}_v \hat{\mathbf{s}} &= \begin{bmatrix} O_c & O_{cv} \\ O_{cv}^\dagger & I_v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{s}}^{(s)} & O_{cv} \\ O_{cv}^\dagger & \hat{\mathbf{s}}^{(p)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} O_c & O_{cv} \\ O_{cv}^\dagger & \hat{\mathbf{s}}^{(p)} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

である. O_c, O_v, O_{cv} はそれぞれ $2 \times 2, 6 \times 6, 2 \times 6$ のゼロ行列である. さらに各ブロックのスピン演算子は

$$\hat{s}_i^{(s)} = \frac{1}{2}\sigma_i, \quad \hat{s}_i^{(p)} = \frac{1}{2} \times \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2J_i & -6T_i^\dagger \\ -6T_i & -\sigma_i \end{bmatrix}, \quad i = x, y, z,$$

であり, σ_i は Pauli 行列, 行列 T_i と J_i は付録 J で述べた. $\hat{s}_i^{(p)}$ の行列表示は付録 B で導いている.

3.3.2 平均場近似

交換相互作用 [式 (3.12)] による強磁性相の取り扱いをさらに簡単化するため平均場近似を用いる [10, 60, 61, 63, 71]. s, p 軌道の電子が多くの d 軌道局在スピンと相互作用するため, 局在スピンの揺らぎは多数の局在スピンにわたって平均化されて無視でき, 平均場近似が十分に成り立つと期待できる. 以下, 実験等で典型的に用いられる量子井戸の空間スケールに, $\text{In}_{1-x}\text{Fe}_x\text{As}$ ($x = 3.7\%$) の場合でいくつかの局在スピンが一電子波長中に含まれるか示す. まず Fe スピン間の距離は 1.8 nm 程度であり [72], 電子の波長は 10^{12} cm^{-2} の電子密度で 20 nm 程度である. 井戸層の幅 20 nm 程度の量子井戸では一電子波長に 10^3 程の Fe スピンが含まれていることになる. それゆえに電子と Fe スピンの結合は電子と磁化 (もしくは局在スピンのスピン偏極) との結合に置き換えられる. さらに平均場近似の T_c の表式は鉄濃度に比例するが [付録 L], この比例関係は第一原理計算からも確認されている [73]. その傾向は実験からもうかがえる: 電子密度 $1.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 鉄濃度 $x = 5\%$ で $T_c = 34 \text{ K}$ [51], 電子密度 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ のオーダーと推定される系, 鉄濃度 $x = 6\%$ と 8% で $T_c = 42 \text{ K}$ と 65 K [55].

$\langle \dots \rangle$ は次節 3.3.3 で定義する統計平均として, スピン変数を基底状態からのゆらぎで展開して, スピンの内積は

$$\begin{aligned} (\hat{P}_n \hat{s}) \cdot \hat{S}_I &= (\langle \hat{P}_n \hat{s} \rangle + \delta \hat{P}_n \hat{s}) \cdot (\langle \hat{S}_I \rangle + \delta \hat{S}_I), \\ &= (\langle \hat{P}_n \hat{s} \rangle + \delta \hat{P}_n \hat{s}) \cdot \langle \hat{S}_I \rangle + \langle \hat{P}_n \hat{s} \rangle \cdot (\langle \hat{S}_I \rangle + \delta \hat{S}_I) + O(\delta \hat{P}_n \hat{s} \cdot \delta \hat{S}_I), \\ &= \hat{P}_n \hat{s} \cdot \langle \hat{S}_I \rangle + \langle \hat{P}_n \hat{s} \rangle \cdot \hat{S}_I - \langle \hat{P}_n \hat{s} \rangle \cdot \langle \hat{S}_I \rangle + O(\delta \hat{P}_n \hat{s} \cdot \delta \hat{S}_I), \end{aligned}$$

である. この展開式を交換相互作用 [式 (3.12)] に代入して, 交換相互作用のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_{\text{ex}} &= - \sum_n \sum_{\mathbf{R}_I} \frac{J_{n-d}}{V} [\hat{P}_n \hat{s} \cdot \langle \hat{S}_I \rangle + \langle \hat{P}_n \hat{s} \rangle \cdot \hat{S}_I - \langle \hat{P}_n \hat{s} \rangle \cdot \langle \hat{S}_I \rangle + O(\delta \hat{P}_n \hat{s} \cdot \delta \hat{S}_I)], \\ &\simeq - \sum_n \sum_{\mathbf{R}_I} \frac{J_{n-d}}{V} [\hat{P}_n \hat{s} \cdot \langle \hat{S}_I \rangle + \langle \hat{P}_n \hat{s} \rangle \cdot \hat{S}_I], \end{aligned}$$

である. 全エネルギーや自由エネルギーを計算しないため定数項を省いた. また揺らぎの二次も無視する. 一項目は

$$- \sum_n \sum_{\mathbf{R}_I} \frac{J_{n-d}}{V} \langle \hat{P}_n \hat{s} \rangle \cdot \hat{S}_I = - \sum_n \sum_{\mathbf{R}_I} J_{n-d} \langle \hat{P}_n \frac{\hat{s}}{V} \rangle \cdot \hat{S}_I,$$

というキャリアスピンの統計平均 (キャリアスピン偏極密度) $\langle \hat{P}_n \hat{s} / V \rangle$ による局在スピンへの有効的な

Zeeman 相互作用の形にまとめられる。二項目は

$$\begin{aligned}
 -\sum_n \sum_{\mathbf{R}_I} \frac{J_{n-d}}{V} \hat{P}_n \hat{\mathbf{s}} \cdot \langle \hat{\mathbf{S}}_I \rangle &= -\sum_n \frac{J_{n-d}}{V} \hat{P}_n \hat{\mathbf{s}} \cdot \sum_{\mathbf{R}_I} \langle \hat{\mathbf{S}}_I \rangle, \\
 &= -\sum_n \frac{J_{n-d}}{V} \hat{P}_n \hat{\mathbf{s}} \cdot x N_0 V \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle, \\
 &= -\sum_n x N_0 J_{n-d} \hat{P}_n \hat{\mathbf{s}} \cdot \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle, \\
 N_0 &= 1/\Omega_{\text{u.c.}},
 \end{aligned}$$

という形にまとめられ、局在スピンの統計平均（局在スピン偏極） $\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$ によるキャリアスピンへの有効的な Zeeman 相互作用である。なお、次節で示すように局在スピン偏極は特定の局在スピンによらないため I 依存性を持たない。 $\Omega_{\text{u.c.}} = a^3/4$ はユニットセルの体積（ a は格子定数）であり、 N_0 は単位体積当たりのユニットセルの個数である。そして、

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{R}_I} \langle \hat{\mathbf{S}}_I \rangle &= \sum_{\mathbf{R}_I} \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle, \\
 &= x N_0 V \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle,
 \end{aligned}$$

の関係式の意味は体積 V 中に $N_0 V$ だけ置換されるうるサイト数があり、そのうちの x が磁性不純物に置換され、系全体での局在スピン偏極が $x N_0 V \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$ であることを示す。

一項目と二項目をまとめて一様成分のみ、平均場近似のもとでの交換相互作用は

$$\begin{aligned}
 H_{\text{ex}} &= H_{\text{ex,c}} + H_{\text{ex,S}}, \\
 H_{\text{ex,c}} &= -\sum_n x N_0 J_{n-d} \hat{P}_n \hat{\mathbf{s}} \cdot \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle, \\
 H_{\text{ex,S}} &= -\sum_n \sum_{\mathbf{R}_I} J_{n-d} \langle \hat{P}_n \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle \cdot \hat{\mathbf{S}}_I,
 \end{aligned}$$

である。

8-バンドの範囲で扱う場合、伝導帯、価電子帯のバンド端での交換相互作用がそれぞれ s - d , p - d 交換相互作用であることから [図 2.2], J_{n-d} は

$$\begin{aligned}
 n = c &\rightarrow J_{c-d} \equiv J_{s-d}, \\
 n = v &\rightarrow J_{v-d} \equiv J_{p-d},
 \end{aligned}$$

である。価電子帯ではバンド端に HH, LH, SO の三種類が存在するが、それらすべてのバンド端で p - d 交

換相互作用は等しいとする [60, 61, 63, 71]. 以上から, 各交換相互作用は

$$\begin{aligned}
H_{\text{ex},c} &= - \sum_n x N_0 J_{n-d} \hat{P}_n \hat{\mathbf{s}} \cdot \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle, \\
&= - \hat{P}_c \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{h}_{\text{eff},c} - \hat{P}_v \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{h}_{\text{eff},v}, \\
\mathbf{h}_{\text{eff},c} &= x N_0 J_{s-d} \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle, \\
\mathbf{h}_{\text{eff},v} &= x N_0 J_{p-d} \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle, \\
H_{\text{ex},S} &= - \sum_{\mathbf{R}_I} (J_{s-d} \langle \hat{P}_c \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle + J_{p-d} \langle \hat{P}_v \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle) \cdot \hat{\mathbf{S}}_I, \\
&= - \sum_{\mathbf{R}_I} \mathbf{H}_{\text{eff}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_I, \\
\mathbf{H}_{\text{eff}} &= J_{s-d} \langle \hat{P}_c \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle + J_{p-d} \langle \hat{P}_v \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle,
\end{aligned}$$

である.

3.3.3 密度行列と各スピン偏極

密度行列

次に各スピン偏極のためにキャリア, 局在スピンの統計分布を決定し, 統計平均を定義する. キャリアと局在スピンのハミルトニアンは互いに可換

$$[H_0 + H_{\text{ex},c}, H_{\text{ex},S}] = 0,$$

なので, 系全体を記述する密度行列はキャリアと局在スピンそれぞれに関し独立した密度行列

$$\rho = \rho_c \rho_S,$$

に分解できる. ρ_c がキャリアに関する, ρ_S が局在スピンに関する密度行列である. 関連して平均操作のトレースも独立

$$\text{Tr} \rho = (\text{Tr}_c \rho_c)(\text{Tr}_S \rho_S),$$

である. Tr_c, Tr_S はそれぞれキャリアのスピンまで含めたバンド自由度と波数 $\mathbf{k}$ に関してのみ, 局在スピン自由度に関してのみの平均操作である.

局在スピンの密度行列には canonical 分布

$$\rho_S = e^{-\beta H_{\text{ex},S}} / Z_S, \quad Z_S = \text{Tr}_S e^{-\beta H_{\text{ex},S}},$$

を採用する. Z_S は分配関数である.

キャリアの密度行列には Grand-canonical 分布, より形を便利にして Fermi-Dirac 分布

$$\rho_c = f_{\text{FD}}(H_0 + H_{\text{ex},c}),$$

を採用する. この際, 統計平均操作を ρ_c の統計平均が全電子数 N_e に等しい

$$\text{Tr}_c \rho_c = \text{Tr}_c f_{\text{FD}}(H_0 + H_{\text{ex},c}) = \sum_{\mathbf{k}, n} f_{\text{FD}}(E_{n\mathbf{k}}) = N_e \quad (3.13)$$

として定義する.

局在スピン偏極

局在スピンの統計平均は

$$\langle \hat{\mathbf{S}}_I \rangle = \text{Tr}_S[\hat{\mathbf{S}}_I e^{-\beta H_{\text{ex},S}}] / Z_S,$$

である。ここで $H_{\text{ex},S}$ は局在スピン間の直接的な相互作用を含まないため、各スピンを独立に扱って分配関数は

$$Z_S = \text{Tr}_S[e^{-\beta H_{\text{ex},S}}] = \left(\text{Tr}_{S_I}[e^{\beta \mathbf{H}_{\text{eff}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_I}] \right)^{N_S} \equiv (z_S)^{N_S},$$

である。 I は一つの任意の局在スピンを指定し、 N_S は局在スピンの個数である。この関係を利用すると統計平均は

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{S}}_I \rangle &= \text{Tr}_S[\hat{\mathbf{S}}_I e^{-\beta H_{\text{ex},S}}] / Z_S, \\ &= \text{Tr}_{S_I}[\hat{\mathbf{S}}_I e^{\beta \mathbf{H}_{\text{eff}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_I}] \times (z_S)^{N_S-1} / (z_S)^{N_S}, \\ &= \text{Tr}_{S_I}[\hat{\mathbf{S}}_I e^{\beta \mathbf{H}_{\text{eff}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_I}] / z_S, \quad z_S = \text{Tr}_{S_I}[e^{\beta \mathbf{H}_{\text{eff}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_I}], \end{aligned}$$

である。 Tr_{S_I} は特定の局在スピン自由度 $\hat{\mathbf{S}}_I$ に関してのみの平均操作である。

さらに一つの局在スピンに関する分配関数 z_S を計算する。その前に量子化軸を特定しておく。局在スピンを有効磁場 $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ の方向と直交する方向

$$\hat{\mathbf{S}}_I = \hat{S}_{I,\parallel} \mathbf{H}_{\text{eff}} / H_{\text{eff}} + \hat{S}_{I,\perp} \mathbf{e}_\perp,$$

に分解する。局在スピンの統計平均では $\mathbf{H}_{\text{eff}} / H_{\text{eff}}$ 方向の成分のみノンゼロであるため、その方向を量子化軸にとる。また、その成分を $\hat{S}_{I,\parallel}$ と書いた。ここで $\hat{S}_{I,\parallel}$ は大きさ S のスピン角運動量演算子であり、 $\mathbf{H}_{\text{eff}} / H_{\text{eff}}$ の方向を量子化軸とし、固有値は $-S, -(S-1), \dots, S-1, S$ である。この分解のもとで分配関数 z_S と $\langle \hat{\mathbf{S}}_I \rangle$ は

$$\begin{aligned} z_S &= \text{Tr}[e^{\beta H_{\text{eff}} \hat{S}_{I,\parallel}}] = \sum_{S_{I,\parallel}=-S}^S e^{\beta H_{\text{eff}} S_{I,\parallel}} = \sum_{S_{I,\parallel}=-S}^S e^{x S_{I,\parallel} / S}, \quad x = \beta H_{\text{eff}} S, \\ \langle \hat{\mathbf{S}}_I \rangle &= \frac{1}{z_S} \text{Tr}_{S_I}[\hat{S}_{I,\parallel} \frac{\mathbf{H}_{\text{eff}}}{H_{\text{eff}}} e^{\beta H_{\text{eff}} \hat{S}_{I,\parallel}}] = \frac{\mathbf{H}_{\text{eff}}}{H_{\text{eff}}} S \frac{1}{z_S} \sum_{S_{I,\parallel}=-S}^S \frac{S_{I,\parallel}}{S} e^{x S_{I,\parallel} / S} = \frac{\mathbf{H}_{\text{eff}}}{H_{\text{eff}}} S \frac{1}{z_S} \frac{\partial z_S}{\partial x}, \end{aligned}$$

である。さらに分配関数とその微分の計算を進めていくと、分配関数は

$$\begin{aligned} z_S &= \sum_{S_{I,\parallel}=-S}^S e^{x S_{I,\parallel} / S} = e^x + e^x \cdot e^{-x/S} + e^x \cdot e^{-2x/S} + \dots + e^{-x} \cdot e^{x/S} + e^{-x}, \\ &= \frac{e^x [1 - (e^{-x/S})^{2S+1}]}{1 - e^{-x/S}} = \frac{e^x [1 - e^{-x(2S+1)/S}]}{1 - e^{-x/S}} = \frac{e^x - e^{-x} \cdot e^{-x/S}}{1 - e^{-x/S}}, \\ &= \frac{e^{\frac{2S+1}{2S}x} - e^{-\frac{2S+1}{2S}x}}{e^{x/2S} - e^{-x/2S}}, \\ &= \frac{\sinh\left(\frac{2S+1}{2S}x\right)}{\sinh\left(\frac{1}{2S}x\right)}, \end{aligned}$$

であり, また

$$\begin{aligned}\frac{\partial z_S}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\sinh\left(\frac{2S+1}{2S}x\right)}{\sinh\left(\frac{1}{2S}x\right)}, \\ &= \frac{\frac{2S+1}{2S} \cosh\left(\frac{2S+1}{2S}x\right) \sinh\left(\frac{1}{2S}x\right) - \sinh\left(\frac{2S+1}{2S}x\right) \cdot \frac{1}{2S} \cosh\left(\frac{1}{2S}x\right)}{[\sinh\left(\frac{1}{2S}x\right)]^2},\end{aligned}$$

である.

以上から分配関数とその微分を含む部分は

$$\begin{aligned}S \frac{1}{z_S} \frac{\partial z_S}{\partial x} &= S \frac{\sinh\left(\frac{1}{2S}x\right)}{\sinh\left(\frac{2S+1}{2S}x\right)} \frac{\frac{2S+1}{2S} \cosh\left(\frac{2S+1}{2S}x\right) \sinh\left(\frac{1}{2S}x\right) - \sinh\left(\frac{2S+1}{2S}x\right) \cdot \frac{1}{2S} \cosh\left(\frac{1}{2S}x\right)}{[\sinh\left(\frac{1}{2S}x\right)]^2}, \\ &= S \left[\frac{2S+1}{2S} \frac{\cosh\left(\frac{2S+1}{2S}x\right)}{\sinh\left(\frac{2S+1}{2S}x\right)} - \frac{1}{2S} \frac{\cosh\left(\frac{1}{2S}x\right)}{\sinh\left(\frac{1}{2S}x\right)} \right], \\ &= S \left[\frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{2S+1}{2S}x\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{1}{2S}x\right) \right], \\ &= SB_S\left(\frac{SH_{\text{eff}}}{k_B T}\right), \quad B_S(x) = \frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{2S+1}{2S}x\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{1}{2S}x\right),\end{aligned}$$

である.

よって局在スピンの統計平均は

$$\langle \hat{S}_I \rangle = \langle \hat{S} \rangle = \frac{H_{\text{eff}}}{H_{\text{eff}}} SB_S\left(\frac{SH_{\text{eff}}}{k_B T}\right),$$

である. この式からわかる通り, 局在スピン偏極は局在スピンの番号 I に依存しないため, I を取り除いた.

キャリアスピン偏極密度

キャリアスピンの統計平均は

$$\begin{aligned}\langle \hat{P}_n \frac{\hat{S}}{V} \rangle &= \text{Tr}_c \left(\hat{P}_n \frac{\hat{S}}{V} f_{\text{FD}}(H_0 + H_{\text{ex},c}) \right), \\ &= \frac{1}{V} \sum_{m, \mathbf{k}} \langle u_{m\mathbf{k}} | \hat{P}_n \hat{S} | u_{m\mathbf{k}} \rangle f_{\text{FD}}(E_{m\mathbf{k}}), \\ &= \frac{1}{V} \sum_m V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \langle u_{m\mathbf{k}} | \hat{P}_n \hat{S} | u_{m\mathbf{k}} \rangle f_{\text{FD}}(E_{m\mathbf{k}}), \\ &= \sum_m \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \langle u_{m\mathbf{k}} | \hat{P}_n \hat{S} | u_{m\mathbf{k}} \rangle f_{\text{FD}}(E_{m\mathbf{k}}),\end{aligned}$$

である.

3.4 化学ポテンシャル

キャリアの密度行列とトレースの定義 [式 (3.13)] より化学ポテンシャル μ を決定する方程式は

$$\sum_n \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} f_{\text{FD}}(E_{n\mathbf{k}}) = \frac{N_e}{V_d}, \quad (3.14)$$

であり, d 次元の系で f_{FD} の波数空間での積分 (範囲は第一 Brillouin ゾーン) が電子密度に等しい. V_d は d 次元での系の空間的大きさである. 一次元なら線分の長さ, 二次元なら面積, 三次元なら体積である.

方程式 (3.14) は

1. 化学ポテンシャルの初期予測として Fermi エネルギーを代入する,
2. 波数積分を含む左辺を計算する,
3. 設定した電子密度と比較して収束するまで繰り返す,

という二分法によって解くことができる. ただし, $\mathbf{k}$ 点全体に対する積分を含むため計算が比較的重くなり, 磁気相転移を調べる際の自己無撞着計算と組み合わせさってしまう.

そこで三次元バルクのバンド金属の系では, 非磁性半導体の伝導帯有効質量を持つ自由電子ガスモデルの化学ポテンシャルを決める式

$$\mu(T) = E_F \left[1 - \frac{\pi^2 T^2}{12 T_F^2} \right], \quad (3.15)$$

で近似する [74]. E_F, T_F, T はそれぞれフェルミエネルギー, Fermi 温度, 温度である. 量子井戸での化学ポテンシャルは 4.2.4 節で述べる.

3.5 ハミルトニアンのまとめと自己無撞着方程式

以上から本理論で中心となる Schrödinger 方程式は

$$(H_0 + H_{\text{ex},c})c_n(\mathbf{k}) = E_{n\mathbf{k}}c_n(\mathbf{k}), \quad (3.16)$$

である. 表現基底は表 3.1 の基底に従う. H_0 は半導体のハミルトニアンで式 (3.9) で表される. 交換相互作用 H_{ex} では一様成分のみをとり, 平均場近似によって交換相互作用を $H_{\text{ex}} = H_{\text{ex},c} + H_{\text{ex},S}$ というキャリアスピンと局在スピンの各部分系に対する有効的な Zeeman 相互作用に分解できる. $H_{\text{ex},c}, H_{\text{ex},S}$ は

$$H_{\text{ex},c} = -\hat{P}_c \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{h}_{\text{eff},c} - \hat{P}_v \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{h}_{\text{eff},v}, \quad (3.17)$$

$$H_{\text{ex},S} = -\sum_I \mathbf{H}_{\text{eff}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_I, \quad (3.18)$$

であり, 有効磁場は

$$\mathbf{h}_{\text{eff},c} = xN_0 J_{s-d} \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle,$$

$$\mathbf{h}_{\text{eff},v} = xN_0 J_{p-d} \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle,$$

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = J_{s-d} \langle \hat{P}_c \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle + J_{p-d} \langle \hat{P}_v \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle,$$

である.

$\hat{\mathbf{S}}_I$ は大きさ S の局在スピンの演算子を表し, I は局在スピンを区別するための指標である. V は結晶の体積である. $\hat{\mathbf{s}}$ と $\hat{P}_n (n = c, v)$ はキャリアスピンと射影演算子であり, その射影演算子は電子状態を伝導帯 (c), 価電子帯 (v) のバンド端の基底関数 [表 3.1] に従った表現に射影する. $\hat{P}_{c,v} \hat{\mathbf{s}}$ の表式は

$$\hat{P}_c \hat{\mathbf{s}} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{s}}^{(s)} & O_{cv} \\ O_{cv}^\dagger & O_v \end{bmatrix}, \quad \hat{P}_v \hat{\mathbf{s}} = \begin{bmatrix} O_c & O_{cv} \\ O_{cv}^\dagger & \hat{\mathbf{s}}^{(p)} \end{bmatrix},$$

であり, O_c, O_v, O_{cv} はそれぞれ $2 \times 2, 6 \times 6, 2 \times 6$ のゼロ行列である. $\hat{s}^{(s)}$ と $\hat{s}^{(p)}$ はバンド端の基底関数 [表 3.1] で表されたスピン演算子であり, その表式は

$$\hat{s}_i^{(s)} = \frac{1}{2}\sigma_i, \quad \hat{s}_i^{(p)} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 2J_i & -6T_i^\dagger \\ -6T_i & -\sigma_i \end{bmatrix}, \quad i = x, y, z, \quad (3.19)$$

である. σ_i は Pauli 行列の第 i 成分であり, 行列 J_i と T_i は付録 J に載せている.

J_{s-d} と J_{p-d} は交換相互作用の係数であり, 第一原理計算から見積もられた値を採用する [72]. N_0 は単位体積あたりでの陽イオンサイトの個数であり, ユニットセルの体積 $a^3/4$ の逆数に等しい. ここで a は母体半導体の格子定数である [67]. x は鉄濃度であり, $0 \leq x \leq 1$ である.

局在スピン偏極 $\langle \hat{S} \rangle$ は局在スピンの統計平均であり, 式 (3.18) から次の状態方程式

$$\begin{aligned} \langle \hat{S} \rangle &= \frac{H_{\text{eff}}}{H_{\text{eff}}} S B_S \left(\frac{S H_{\text{eff}}}{k_B T} \right), \\ B_S(y) &= \frac{2S+1}{2S} \coth \left(\frac{2S+1}{2S} y \right) - \frac{1}{2S} \coth \left(\frac{1}{2S} y \right), \end{aligned} \quad (3.20)$$

に従う. ここで S は局在スピンの大きさであり, Fe^{3+} イオンに対しては $S = 5/2$ である. $B_S(y)$ は Brillouin 関数であり, k_B は Boltzmann 定数, T は温度である.

キャリアスピン偏極密度 $\langle \hat{P}_n \mathbf{s} / V \rangle$ ($n = c, v$) はキャリアスピン密度の統計平均であり, 次の式

$$\langle \hat{P}_n \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle = \sum_m \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \langle u_{m\mathbf{k}} | \hat{P}_n \hat{\mathbf{s}} | u_{m\mathbf{k}} \rangle f_{\text{FD}}(E_{m\mathbf{k}}), \quad (3.21)$$

に従う. ただし, $\mathbf{k}$ は第一 Brillouin ゾーンの波数とし, 波数積分の範囲は第一 Brillouin ゾーンとする. 数値計算のために波数空間を離散化し, その離散化点を $\mathbf{K}$ と書くと平均は

$$\langle \hat{P}_n \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle \simeq \left(\frac{\Delta k}{2\pi} \right)^3 \sum_{n, \mathbf{K}} \langle u_{n\mathbf{K}} | \hat{P}_n \hat{\mathbf{s}} | u_{n\mathbf{K}} \rangle f_{\text{FD}}(E_{n\mathbf{K}}) \quad (3.22)$$

である. ただし, 各方向に等しい分割幅 Δk とした. $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{m,\mathbf{k}}$ はバンド指標 m , 波数ベクトル $\mathbf{k}$ のエネルギーバンド $E_{m\mathbf{k}}$ の Bloch 関数である. f_{FD} は Fermi-Dirac 分布関数であり, 化学ポテンシャルは三次元バルク金属の系なら母体半導体の伝導帯バンド端の有効質量を持つ Fermi ガスモデルで近似した [式 (3.15)]. 量子井戸での化学ポテンシャルは 4.2.4 節で述べた.

電子構造の中で Γ 点近傍の電子構造および物性に着目しているため, Brillouin ゾーンの境界を詳細に取ると, その取り方は計算を複雑化させるのみである. 同時に Γ 点近傍の電子状態と物性は Γ 点から離れた電子状態に依らないと考えられる. そこで波数積分の範囲は計算のしやすさから, zinc-blende 構造の Brillouin ゾーンでなく, 慣用単位胞の Brillouin ゾーンに相当する, 一片の長さ $2\pi/a$ の立方体 (各 k_i ($i = x, y, z$) 軸方向で $-\pi/a$ から π/a) にとる. a は半導体の格子定数である.

キャリアのハミルトニアン $H_0 + H_{\text{ex},c}$ を対角化することでエネルギーバンド $E_{m\mathbf{k}}$ を得られる. そのため, $\langle \hat{S} \rangle$ と $\langle \hat{P}_n \mathbf{s} / V \rangle$ ($n = c, v$) [式 (3.20, 3.21)] は $H_0 + H_{\text{ex},c}$ を介してひとまとまりの方程式系を成しており, 各温度で $\langle \hat{S} \rangle$ と $\langle \hat{P}_n \mathbf{s} / V \rangle$ を得るためにその方程式を自己無撞着に解く.

三次元バルクのバンドパラメータを付録 H にまとめた. 本研究で用いた量子井戸は図 4.2 の井戸であり, 構造のパラメータは表 4.2 にまとめた.

3.6 本理論の仮定のまとめ

参考として以下に計算に用いた仮定をまとめておく.

- 仮想結晶近似に相当する近似を採用する [図 3.1].
- 母体半導体のハミルトニアンに関して, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法を採用, エネルギーギャップに最も近い 8-バンドを対象とする [3.2 節].
- 秩序変数の取り扱いでは平均場近似を採用する [3.3 節].
- 三次元バルクの系で金属の場合, 化学ポテンシャルを母体半導体伝導帯の有効質量をもつ電子ガスモデルから決定する [式 (3.15)]. 量子井戸の系に関しては 4.2.4 節で述べる.
- 波数積分の際, Brillouin ゾーンにわたる積分を行うが, 計算の簡単さのために zinc-blende 構造の Brillouin ゾーンの形でなく一片の長さ $2\pi/a$ の立方体 (慣用単位胞の Brillouin ゾーン) をとる. 本理論では Brillouin ゾーンの境界から離れた Γ 点近傍の電子構造とその物性に着目するため, Brillouin ゾーンの境界の形状を変更しても, Hall 伝導率や Curie 温度で本質を損なわないと予想される. 実際, Curie 温度は実験値と近い値を示す [6.2, 6.3 節].
- 次の効果を無視する:
 - キャリア間 Coulomb 相互作用を無視する. もしその相互作用を取り入れると, Stoner Enhancement として知られる T_c の上昇, Fermi 液体の効果による一電子パラメータの補正が予想される.
 - $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ の Γ 点に下端を持ち, 最も価電子帯に近い伝導帯以外無視する. 他の伝導帯を考えなければならない例は, InAs なら第一 Brillouin ゾーンの L 点 に下端を持つ伝導帯を比較的高い電子密度による Fermi エネルギーが横切る場合である [67, 75].
 - 磁性イオンやドナーによる不純物ポテンシャルのうち磁性イオンによる交換相互作用以外無視する. ドーピングされた半導体で不純物ポテンシャルは一般にキャリア間 Coulomb 相互作用と合わせて金属絶縁体転移といった物性の急激な変化を波動関数の局在化によってもたらすと知られている [76–78]. そのためドーピングによる T_c の急激な立ち上がり [図 6.4] [49] においても局在化が有力候補であると考えられる.
 - 他の交換相互作用を無視する. 例えば比較的高い鉄濃度で現れる超交換相互作用 [61, 79] である.

第 4 章

n 型強磁性半導体における p - d 交換スピン軌道結合 - 電子構造

本章では三次元バルク結晶の n 型強磁性半導体と井戸層にその半導体を持つ量子井戸両方に対し、8 バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンを対角化することで、伝導帯に現れるスピン分裂とスピン配向から p - d 交換スピン軌道結合の有効磁場 $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ を評価する。その計算に加え、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンでの $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移の行列要素を摂動として取り扱い [18, 20], 伝導帯の有効ハミルトニアンを導き、 $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ の摂動論による解析式を得る。数值的、解析的に得られ有効磁場を伝導帯の s 軌道と局在スピンの間ではたらく s - d 交換有効磁場 $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(s-d)}$ と比較する。

4.1 ハミルトニアン

ハミルトニアンを 3 章で議論したものから簡単化する。量子井戸の半導体のハミルトニアンは本節で導く H_0 で井戸の成長方向の波数 k_z を包絡関数近似により演算子 $\hat{k}_z$ に置き換え、バンドパラメータに z 依存性を取り入れて導かれる [4.2.1 節]。以下、半導体のハミルトニアン H_0 [式 (3.9)] と自己無撞着方程式 [式 (3.20, 3.21)] を単純化する。

半導体のハミルトニアン H_0 は式 (3.9) のままであると、価電子帯のブロック H_v [式 (3.10)] が数学的に取り扱いづらい。そこで次の二点を考慮して H_v を簡単化する。

- H_v の中で数学的に複雑にする行列要素は非対角要素である。
- ハミルトニアンからエネルギーバンドを計算した際、価電子帯が上に凸でなければならない。

この二点を満たす近似は Reduced バンドパラメータなどの物質パラメータで

$$\gamma'_1 = 1, \gamma'_2 = 0, \gamma'_3 = 0, B' = 0, C_k = 0, \quad (4.1)$$

の取り方で実行できる。この近似は次の考えから妥当である。まず B', C_k は価電子帯での相対論的スピン軌道結合や $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 項の二次によるパラメータであり、伝導帯の形成にバンドギャップ E_g や Kane の行列要素 P など他のパラメータほど寄与しない。次に Reduced バンドパラメータの値を本論文で取り扱う InAs, InSb について式 (3.11) と E_g, E_P の実験値 [67] [付録 H] から見積もると、表 4.1 に示す値で

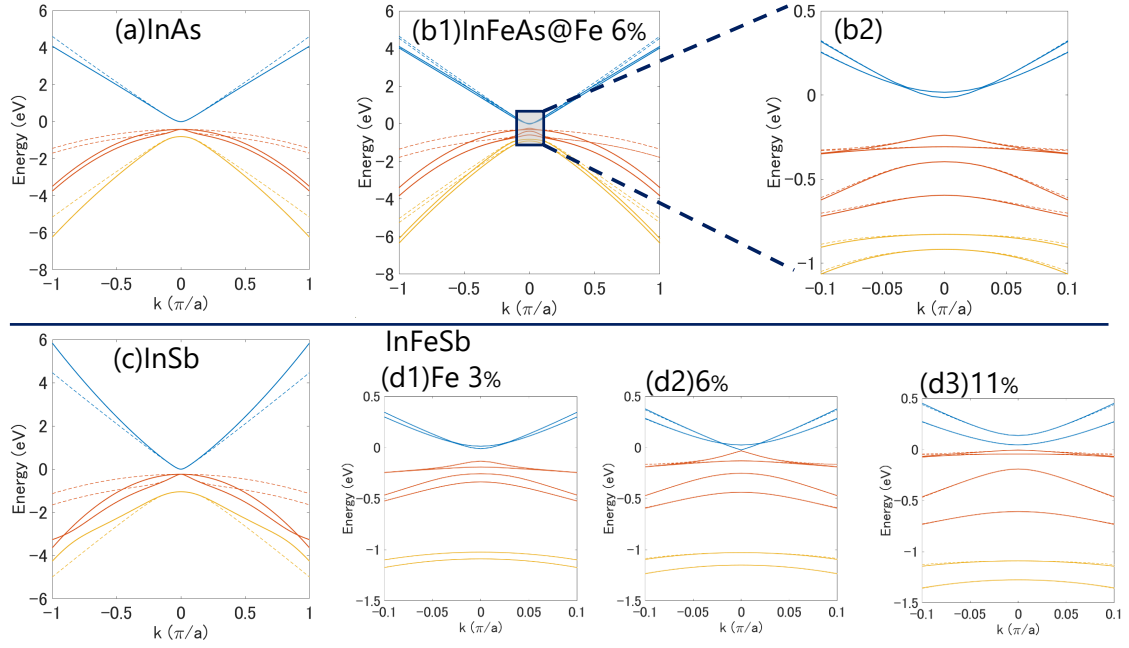


図 4.1 (a)InAs, (b1,b2)InFeAs, (c)InSb および (d1-d3)InFeSb における近似 [式 (4.1)] あり (破線), なし (実線) でのエネルギーバンドの比較. バンドパラメータは付録 H の値を用いた. ただし, 波数ベクトル $\mathbf{k}$ の向きは母体半導体の $[100]$ 方向とし, a は母体半導体の格子定数である. いずれのバンドにおいても交換相互作用の有無に関わらず実線と破線は本研究で重要な $k = 0$ 近傍でほとんど合致し, 近似の有無は $k = 0$ から離れた波数での定量的な曲率の違いのみで現れている.

ある. この表 4.1 から上記の近似はオーダーレベルで満たされている. さらにエネルギーバンドで見ると図 4.1 に示すように, 上記の近似前後でのバンドは交換相互作用を入れたとしても本研究で重要な Γ 点近傍で一致しており, 定量的に曲率が異なるのみである. 以上から, 半導体のハミルトニアン H_0 で近似 [式 (4.1)] を採用する.

続いて一般の温度であれば局在スピンとキャリアスピン偏極を自己無撞着に決定しなければならない [式 (3.20, 3.21)]. しかし, 本章と次章は電子状態と輸送特性を調べるため有限温度を考慮する必要がない. もし自己無撞着方程式を解く場合は単に計算量を増やすのみである. そこで局在スピン偏極が自己無撞着方程式 [式 (3.20)] を飽和値で満たしていると仮定する. この仮定によって電子状態を調べる際はキャリアのハミルトニアン $H_0 + H_{\text{ex}}$ [式 (3.9, 3.17)] の対角化のみで済む. 局在スピン偏極を飽和値で仮定する近似は強磁性の転移温度から十分低温の領域で妥当である.

表 4.1 Reduced バンドパラメータ [式 (3.11)] の実験値 [67] [付録 H]. AlSb は量子井戸の側壁として用いるため掲載した.

	γ'_1	γ'_2	γ'_3
InAs	2.9	-0.072	0.63
InSb	1.8	-1.0	-0.024
AlSb	2.6	-0.1	0.66

全 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンは

$$H = H_0 + H_{\text{ex}}, \quad (4.2)$$

であり, H_0 は母体半導体の $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアン [17, 20]

$$\begin{aligned} H_0 &= \begin{bmatrix} H_{0c} & H_{0cv} \\ H_{0cv}^\dagger & H_{0v} \end{bmatrix}, \\ H_{0c} &= \text{diag} [E_k^0, E_k^0], \\ H_{0v} &= -\text{diag} [E'_k, E'_k, E'_k, E'_k, \tilde{E}_k, \tilde{E}_k], \\ E_k^0 &= \hbar^2 k^2 / 2m_0, \quad E'_k = E_k^0 + E_g, \quad \tilde{E}_k = E'_k + \Delta_g, \\ H_{0cv} &= \begin{bmatrix} \sqrt{3} P \mathbf{T} \cdot \mathbf{k} & -\frac{1}{\sqrt{3}} P \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

である. H_{ex} は

$$H_{\text{ex}} = \begin{bmatrix} H_{s-d} & O_{cv} \\ O_{cv}^\dagger & H_{p-d} \end{bmatrix}, \quad (4.4)$$

$$H_{s-d} = 3A_{s-d} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(s)} \cdot \mathbf{e}, \quad H_{p-d} = 3B_{p-d} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(p)} \cdot \mathbf{e},$$

$$\hat{\sigma}_i^{(s)} = \sigma_i, \quad \hat{\sigma}_i^{(p)} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2J_i & -6T_i^\dagger \\ -6T_i & -\sigma_i \end{bmatrix}, \quad i = x, y, z,$$

$$A_{s-d} = \frac{J_{s-d} M}{6g\mu_B}, \quad B_{p-d} = \frac{J_{p-d} M}{6g\mu_B}, \quad M = |\mathbf{M}| = xN_0 \cdot g\mu_B S, \quad (4.5)$$

である. g は局在スピンの g -因子, μ_B は Bohr 磁子である.

4.2 量子井戸への応用

4.2.1 包絡関数近似とハミルトニアン

ハミルトニアン [式 (4.3, 4.4)], もしくは Schrödinger 方程式 [式 (3.16)] は三次元バルクに関するものであるため, 本節で量子井戸の場合のそれらハミルトニアンと方程式を導く. 結果, 半導体のハミルトニアン [式 (4.3)] で成長方向の波数成分 k_z を演算子 $\hat{k}_z = -i\partial/\partial z$ に置き換え, エネルギーギャップや交換相互作用などバンドパラメータに z 依存性を入れ, ドナーおよびゲート電圧など井戸の形状を記述するポテンシャルを対角成分に追加すればよい.

基本となる手法は包絡関数近似 [80] である. 母体半導体の [001] 方向 (z 軸) を井戸の成長方向とする. この近似の出発点は厳密な Schrödinger 方程式 [式 (3.2)] であり, 半導体のハミルトニアンは

$$H_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_0(\hat{\mathbf{r}}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla V_0(\hat{\mathbf{r}})) \cdot \hat{\mathbf{p}} + V(z),$$

である. $V(z)$ が電子に作用する井戸やドナー, 面直バイアスなどのポテンシャルを表す.

井戸面内方向は周期性を保っているため Bloch の定理を用い, 系全体での波動関数を

$$\langle \mathbf{r} | n \mathbf{k}_{\parallel} \rangle = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i \mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \sum_{\alpha} a_{n,\alpha}(\mathbf{k}_{\parallel}, z) u_{\alpha 0}(\mathbf{r}), \quad (4.6)$$

という形で展開をする。ただし、面内の状態は自由電子状態であるとし、面積 A の領域に関する周期境界条件を満たす平面波とした。ここでのバンド指標 n は伝導帯と価電子帯、スピン、サブバンドまで区別した指標である。また α は表 3.1 に示したようなバンド端の指標であり、現段階ではその表に指定された 8 個と限らず無限個あるとする。 $u_{\alpha 0}(\mathbf{r})$ はバンド端での Bloch 関数の周期部分である。 $a_{n,\alpha}(\mathbf{k}_{\parallel}, z)$ を包絡関数と呼び、 $u_{\alpha 0}(\mathbf{r})$ が変動するユニットセルの空間スケールに比べて十分大きなスケールで空間変動する。その空間変動の遅さのためにユニットセルスケール程度の実空間に関する積分では一定とみなせる。また包絡関数の空間変動をもたらす要因はポテンシャル $V(z)$ やギャップ、交換相互作用の係数などのバンドパラメータの、井戸層を構成する物質の変化に応じた空間変動である。そこで、それらポテンシャルやバンドパラメータもユニットセルスケールでの実空間に関する積分では一定とみなす。なお量子井戸の界面のような急峻な変化のポテンシャルに対して包絡関数が適用できるかは非自明であるが、Burt と Foreman によって包絡関数近似が量子井戸の場合にも適用できると示されている [81, 82]。

Schrödinger 方程式 [式 (3.2)] に展開した波動関数 [式 (4.6)] を代入し、量子井戸であるがゆえに三次元バルクと異なる系の対称性、 z 方向の波数が演算子 $\hat{k}_z$ であることに注意して有効ハミルトニアンを組み立てる。理論の詳細は文献 [81, 82] に任せ、有効ハミルトニアンは形式的には

$$k_z f \rightarrow -i[(\partial_z f(z)) + f(z)\partial_z], \quad (4.7)$$

$$k_z^2 g \rightarrow -\partial_z g(z)\partial_z, \quad (4.8)$$

の置き換えを三次元バルクの半導体ハミルトニアンに行えばよい [1]。そして、バンドパラメータの z 依存性と井戸のポテンシャルを追加すればよい。ここで ∂_z は z 方向の偏微分である。 $f(z)$ は z 依存性を持ち、半導体のハミルトニアンで k_z の一次で現れる任意の係数であり、例えば Kane の行列要素である。 $g(z)$ は同じく z 依存性を持ち、 k_z の二次で現れる任意の係数であり、例えば Reduced バンドパラメータである。しかし、上記の置き換え [式 (4.7, 4.8)] は実質的に本理論の半導体ハミルトニアン [式 (4.3)] で不要である。まず Kane の行列要素が異なる III-V 族半導体間でバンドギャップなどに比べて比較的近い値を取ることから [表 H.1], Kane の行列要素の z 依存性を落とすことができ、式 (4.7) の置き換えが不要となる。そして、式 (4.1) により Reduced バンドパラメータを近似して扱うため、式 (4.8) の置き換えも不要となる。なお、Reduced バンドパラメータは表 4.1 が示すように異なる半導体間で同程度の値のため、近似 [式 (4.1)] もまた Kane の行列要素のように井戸内での位置 z に依らず成り立つと仮定できる。このようにして最終的に残る三次元バルクとの違いは井戸の面直方向の波数が演算子 $\hat{k}_z$ である点、バンドパラメータの z 依存性、 z 依存の井戸のポテンシャルである。

また、交換相互作用には仮想結晶近似に相当する近似 [3.1.2 節] を適用しているとする。包絡関数近似は 3.3 節での各種近似と矛盾なく扱えるため、交換相互作用も変わらず式 (4.4) と同一である。ただし係数はユニットセルスケールでは変化しないものの、 $V(z)$ と同じく包絡関数の変化する方向と空間スケールで変動すると仮定する。

4.2.2 8 バンドの場合

前の 4.2.1 節の結果から、ハミルトニアンを構成するためには式 (4.3, 4.4) で各種バンドパラメータの z 依存性、 z 方向のポテンシャル $V(z)$ を取り入れ、波数 k_z を演算子 $\hat{k}_z$ に置き換えればよいとわかる。

以下に形式の詳細を述べる.

対象とする量子井戸は 図 4.2 に示す井戸であり, 異なる層間で現れるポテンシャルのずれ (バンドオフセット) は $\delta_6, \delta_8, \delta_7$ である. バンドオフセットに加えて, 4.2.3 節 で説明するゲート電圧によるポテンシャル $V_{\text{gate}}(z)$, ドナーの電荷によるポテンシャル $V_{\text{donor}}(z)$, Hartree ポテンシャル $V_{\text{Hartree}}(z)$ も取り入れて考慮する. そして, $A_{s-d}(z)$ と $B_{p-d}(z)$ の z 依存性も取り入れる.

これらの効果は $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアン H_0 [式 (4.3)] と H_{ex} [式 (4.4)] へ次の置き換えによって取り入れられる:

$$\begin{aligned} A_{s-d} &\rightarrow A_{s-d}(z), \\ B_{p-d} &\rightarrow B_{p-d}(z), \\ E_k^0 &\rightarrow E_k^0 + V_H(z) + h_6(z), \\ -E'_k &\rightarrow -E'_k + V_H(z) - h_8(z), \\ -\tilde{E}_k &\rightarrow -\tilde{E}_k + V_H(z) - h_7(z), \end{aligned} \quad (4.9)$$

ただし

$$V_H(z) = V_{\text{gate}}(z) + V_{\text{donor}}(z) + V_{\text{Hartree}}(z), \quad (4.10)$$

$$h_i(z) = \delta_i h_w(z), \quad i = 6, 7, 8, \quad (4.11)$$

$$\delta_8 = E_w - E_g - \delta_6,$$

$$\delta_7 = \delta_8 + \Delta_w - \Delta_g,$$

$$h_w(z) = 0 \text{ (井戸層内)}, 1 \text{ (井戸層外)},$$

である. Kane の行列要素 P はバンドギャップや split-off ギャップに比べて半導体依存性が弱いため, 井戸層の物質の値で井戸全体にわたり一定とする [1]. なお物質で決まる井戸のポテンシャルの形 h_i は上記で述べたようにバンドオフセットで記述してもよいが, 数値計算といった直接ポテンシャルを定義できる場合は井戸層内の伝導帯の端をエネルギーの原点に置き,

$$\begin{aligned} h_6(z) &= \delta_6 \text{ (井戸層外)}, 0 \text{ (井戸層内)}, \\ -h_8(z) &= -(E_w - \delta_6) \text{ (井戸層外)}, -E_g \text{ (井戸層内)}, \\ -h_7(z) &= -(E_w - \delta_6) - \Delta_w \text{ (井戸層外)}, -E_g - \Delta_g \text{ (井戸層内)}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

と定義する [図 4.3].

そして, Schrödinger 方程式は

$$H(-i\partial/\partial z, z) \mathbf{a}_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z) = E_{n\mathbf{k}_{\parallel}} \mathbf{a}_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z), \quad (4.13)$$

$$\mathbf{a}_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z) = [a_{S,\uparrow} \quad a_{S,\downarrow} \quad a_{3/2,3/2} \quad a_{3/2,1/2} \quad a_{3/2,-1/2} \quad a_{3/2,-3/2} \quad a_{1/2,1/2} \quad a_{1/2,-1/2}]_n^T,$$

である. 指標の $3/2, 3/2$ などは順に表 3.1 のバンド端に対応する指標であり, より詳細な対応は表 A.4 も参照する.

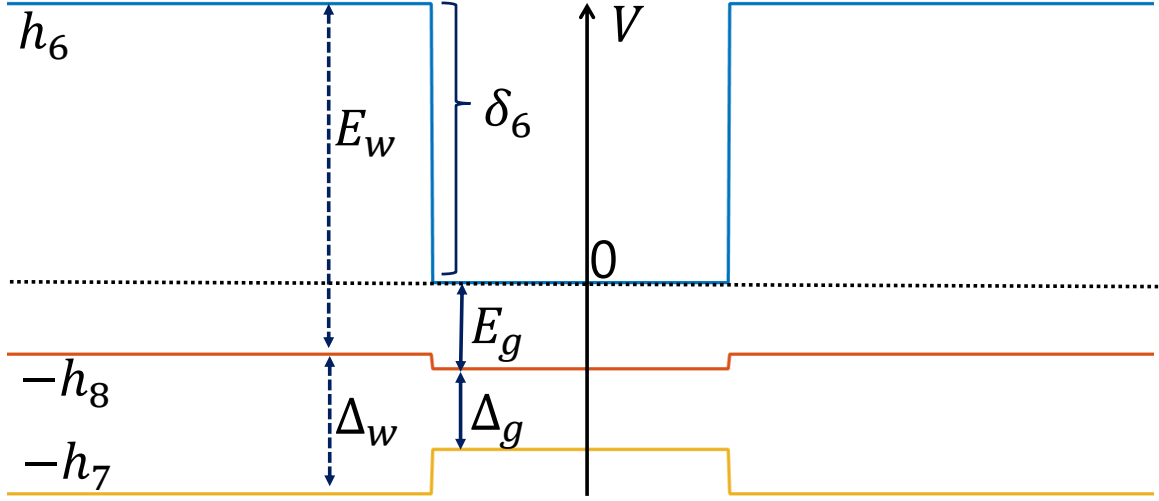


図 4.3 ポテンシャル [式 (4.12)] の定義. 一番エネルギーの高い青実線が h_6 , 中間にある赤実線が $-h_8$, 最も下にある黄実線が $-h_7$ を示す. 黒点線はエネルギーの原点であり, 井戸層の伝導帯下端に位置する. 他の記号の定義は図 4.2 と同一である.

から決まる. ただし $\rho_e(z)$ ではユニットセルスケールでの積分を行い, Bloch 関数の周期部分を平均化して扱っている. なお簡単さのために静電ポテンシャル $\phi_e(z)$ を Schrödinger 方程式のポテンシャルに現れる形 $V_{\text{Hartree}}(z) = -e\phi_e(z)$ に変換している. ϵ_0 は真空中の誘電率, ϵ_r は井戸層の半導体の比誘電率であり, 簡単のため井戸全体にわたって一定とする. k_B は Boltzmann 定数, T は温度, μ は 4.2.4 節で述べる化学ポテンシャル [式 (4.15)] である.

さらに数値計算のために簡単化する. まず面内波数 $k_{\parallel}$ を積分にして, $\rho_e(z)$ は

$$\begin{aligned} \rho_e(z) &= \frac{(-e)}{A} \sum_{\alpha=1}^8 \sum_{n, \mathbf{k}_{\parallel}} |a_{\alpha,n}(\mathbf{k}_{\parallel}, z)|^2 f_{\text{FD}}(E_{n\mathbf{k}_{\parallel}}), \\ &= \frac{(-e)}{A} \sum_{\alpha=1}^8 \sum_n \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2k |a_{\alpha,n}(\mathbf{k}_{\parallel}, z)|^2 f_{\text{FD}}(E_{n\mathbf{k}_{\parallel}}), \\ &= \frac{(-e)}{(2\pi)^2} \sum_{\alpha=1}^8 \sum_n \int_0^{+\infty} k dk \int_0^{2\pi} d\theta |a_{\alpha,n}(\mathbf{k}_{\parallel}, z)|^2 f_{\text{FD}}(E_{n\mathbf{k}_{\parallel}}), \end{aligned}$$

である. 一般に $a_{\alpha,n}(\mathbf{k}_{\parallel}, z)$ と $E_{n\mathbf{k}_{\parallel}}$ は特に価電子帯で面内波数 $\mathbf{k}_{\parallel}$ の方向に依存する. しかし, 解析する電子状態は伝導帯の電子状態であり, 面内で等方的である. そこで $a_{\alpha,n}(\mathbf{k}_{\parallel}, z)$ と $E_{n\mathbf{k}_{\parallel}}$ は $\mathbf{k}_{\parallel}$ の方向 θ に

依存しない $(a_{\alpha,n}(k, z), E_{nk})$ と仮定して θ 積分を実行する. $\rho_e(z)$ は

$$\begin{aligned}\rho_e(z) &= \frac{(-e)}{(2\pi)^2} \sum_{\alpha=1}^8 \sum_n \int_0^{+\infty} k dk \int_0^{2\pi} d\theta |a_{\alpha,n}(\mathbf{k}_{\parallel}, z)|^2 f_{\text{FD}}(E_{n\mathbf{k}_{\parallel}}), \\ &= \frac{(-e)}{2\pi} \sum_{\alpha=1}^8 \sum_n \int_0^{+\infty} k dk |a_{\alpha,n}(k, z)|^2 f_{\text{FD}}(E_{nk}), \\ &\simeq \frac{(-e)}{2\pi} \sum_{\alpha=1}^8 \sum_n \sum_k |a_{\alpha,n}(k, z)|^2 k \Delta k f_{\text{FD}}(E_{nk}), \\ &= \frac{(-e)\Delta k}{2\pi} \sum_k k \sum_n f_{\text{FD}}(E_{nk}) \sum_{\alpha=1}^8 |a_{\alpha,n}(k, z)|^2,\end{aligned}$$

の形に近似できる. なお数値計算における幅 Δk での波数の離散化も含めた.

最後に境界条件は固定端条件

$$a_{n,\alpha}(\mathbf{k}_{\parallel}, \pm L) = 0, \quad V_{\text{Hartree}}(\pm L) = 0,$$

とする.

ゲートとドナーによるポテンシャル

ゲートとドナーによるポテンシャルは Poisson 方程式と境界条件

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz^2} (V_{\text{gate}}(z) + V_{\text{donor}}(z)) &= -\frac{(-e)\rho_{\text{donor}}(z)}{\epsilon_r \epsilon_0}, \\ (V_{\text{gate}} + V_{\text{donor}})(-L) &= V_a, \quad (V_{\text{gate}} + V_{\text{donor}})(L) = V_b,\end{aligned}$$

から決まる.

ドナー密度 ρ_{donor} は

$$\rho_{\text{donor}}(z) = \begin{cases} 0; & -L \leq z \leq -L_d, \\ e\rho_a; & -L_d \leq z \leq -L_d + w, \\ 0; & -L_d + w \leq z \leq L_d - w, \\ e\rho_b; & L_d - w \leq z \leq L_d, \\ 0; & L_d \leq z \leq L, \end{cases}$$

である. $\rho_{a,b}$ の単位は体積に関する密度, 例えば cm^{-3} である.

Poisson 方程式を解いてゲートとドナーによるポテンシャルは

$$V_{\text{gate}}(z) + V_{\text{donor}}(z) = \begin{cases} c_1 z + c_2; & -L \leq z \leq -L_d, \\ \frac{A}{2} z^2 + c_3 z + c_4; & -L_d \leq z \leq -L_d + w, \\ c_5 z + c_6; & -L_d + w \leq z \leq L_d - w, \\ \frac{B}{2} z^2 + c_7 z + c_8; & L_d - w \leq z \leq L_d, \\ c_9 z + c_{10}; & L_d \leq z \leq L, \end{cases}$$

であり, 各係数は

$$\begin{aligned}
A &= \frac{e^2 \rho_a}{\epsilon_r \epsilon_0}, \quad B = \frac{e^2 \rho_b}{\epsilon_r \epsilon_0}, \quad C_{\pm} = \frac{A \pm B}{2}, \quad V_{\pm} = \frac{V_a \pm V_b}{2}, \\
c_1 &= -\frac{2L_d - w}{2L} w C_- - w C_+ - \frac{V_-}{L}, \\
c_2 &= -\frac{2L_d - w}{2} w C_- - L w C_+ + V_+, \\
c_3 &= \frac{w^2 - 2wL_d + 2LL_d}{2L} C_- + (L_d - w) C_+ - \frac{V_-}{L}, \\
c_4 &= \frac{(L_d - w)^2}{2} C_- + \frac{(L_d^2 - 2wL)}{2} C_+ + V_+, \\
c_5 &= \frac{2L - 2L_d + w}{2L} w C_- - \frac{V_-}{L}, \\
c_6 &= -\frac{2L - 2L_d + w}{2} w C_+ + V_+, \\
c_7 &= \frac{w^2 - 2wL_d + 2LL_d}{2L} C_- - (L_d - w) C_+ - \frac{V_-}{L}, \\
c_8 &= -\frac{(L_d - w)^2}{2} w C_- + \frac{(L_d^2 - 2wL)}{2} C_+ + V_+, \\
c_9 &= -\frac{2L_d - w}{2L} w C_- + w C_+ - \frac{V_-}{L}, \\
c_{10} &= -\frac{2L_d - w}{2} w C_- - L w C_+ + V_+,
\end{aligned}$$

である.

4.2.4 面電荷密度と化学ポテンシャル

面電荷密度 n_T は電荷中性の条件から

$$n_T = (\rho_a + \rho_b)w,$$

である. n_T を入力値として, 電荷密度の全空間に関する積分は

$$\int d\mathbf{r}_{\parallel} \int dz \rho_e(z) = A \int dz \rho_e(z) = (-e)n_T A,$$

である. なお z 方向の積分範囲は井戸の面直方向全体とし, 微小量 dz はユニットセルスケールよりも大きいと仮定する.

一方, 式 (4.14) と包絡関数の規格化条件

$$\int dz \sum_{\alpha=1}^8 |a_{\alpha,n}(\mathbf{k}_{\parallel}, z)|^2 = 1,$$

から n_T に関する等式

$$n_T = \frac{1}{A} \sum_{n, \mathbf{k}_{\parallel}} f_{\text{FD}}(E_{n\mathbf{k}_{\parallel}}), \quad (4.15)$$

を得られる。 n_T は電荷中性から決まっているため、この式を化学ポテンシャル μ に関する方程式として使う。数値計算では幅 Δk で $\mathbf{k}_{\parallel}$ について離散化し、 $E_{n\mathbf{k}_{\parallel}}$ の $\mathbf{k}_{\parallel}$ に関する等方性を仮定して

$$n_T = \frac{\Delta k}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}} k \sum_n f_{\text{FD}}(E_{n\mathbf{k}}),$$

の方程式を解けばよい。

4.2.5 実際の計算方法

実際に計算する際は Hartree ポテンシャルを含むため、そのポテンシャルに関して自己無撞着に解く。具体的には次の手順である：

1. 井戸の構造やドナーの配置と密度、バンドギャップや交換相互作用などを入力する。
2. 計算する面内波数 $\mathbf{k}_{\parallel}$ を決める：例えば母体半導体の [100] 方向など。
3. 各 $\mathbf{k}_{\parallel}$ ごとに Schrödinger 方程式 (4.13) を対角化して、固有エネルギー $E_{n\mathbf{k}_{\parallel}}$ と包絡線関数 $a_{n,\alpha}(\mathbf{k}_{\parallel}, z)$ を得る。
4. 化学ポテンシャル μ を決定する。
5. Hartree ポテンシャルを求め、予測として既に用いている Hartree ポテンシャルと比較する。
6. 収束していれば終了し、収束しなければ Hartree ポテンシャルを更新して 3 から繰り返す。

4.2.6 有限差分化ハミルトニアン

Schrödinger 方程式 (4.13) を対角化するため、ハミルトニアンを z について有限差分化する。

有限差分と境界条件

一般に変数 x の関数 $f(x)$ は微小な h に対して Taylor 展開で

$$f(x \pm h) = f(x) \pm f^{(1)}(x)h + \frac{1}{2!}f^{(2)}(x)h^2 \pm \frac{1}{3!}f^{(3)}(x)h^3 + O(h^4),$$

の形に展開できる。この展開式から中心差分は

$$f(x+h) - f(x-h) = 2f^{(1)}(x)h + 2\frac{1}{3!}f^{(3)}(x)h^3 + O(h^5),$$

であり、 $\hat{k}_z$ 一次で含む項の一階微分を

$$f^{(1)}(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2),$$

$O(h^2)$ の精度で近似できる。運動エネルギーに現れる二階微分は Taylor 展開より

$$f(x+h) - 2f(x) + f(x-h) = f^{(2)}(x)h^2 + O(h^4),$$

であるため、

$$f^{(2)}(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2),$$

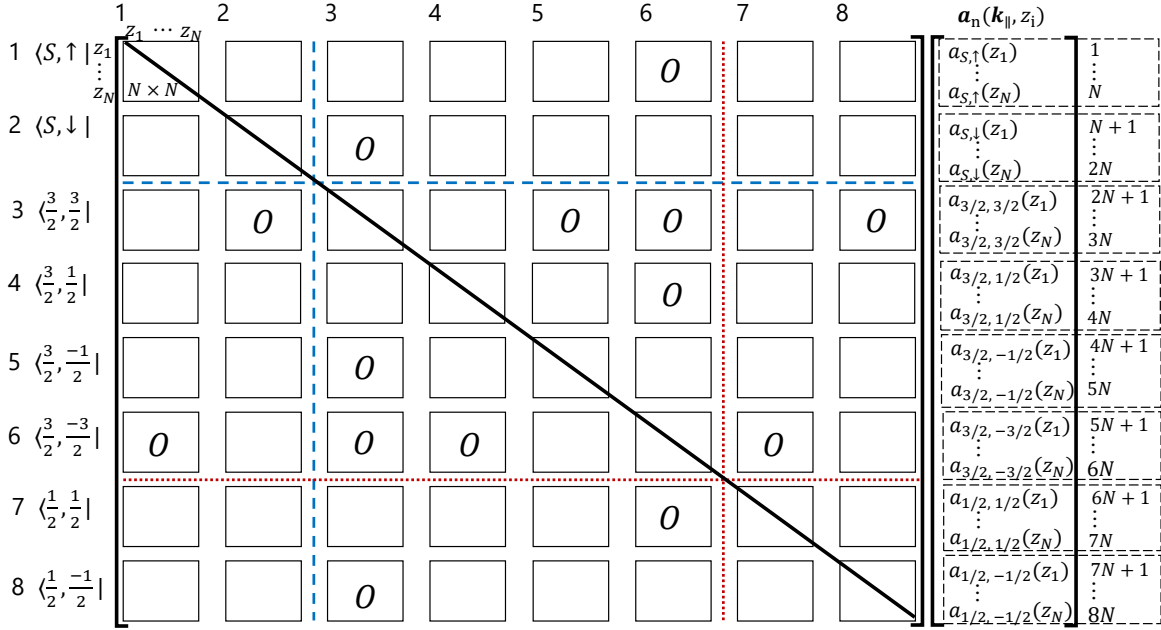


図 4.4 有限差分化ハミルトニアンと Schrödinger 方程式の左辺. 左側の 1 から 8 の番号のブロックで構成された部分がハミルトニアン, 右側の破線で構成された列ベクトルが包絡線関数を要素に持つ固有ベクトルである. O はゼロで埋め尽くされたブロックであり, 空白のブロックはノンゼロの行列要素を持つブロックである. 各ブロックは z 軸の N 分割によって $N \times N$ の行列であり, 離散化による番号の行列要素は $z_1, \dots, z_N$ による要素に対応する. 1, 2, $\dots$, 8 の番号は表 3.1 の $S, \uparrow$ などと順に対応する. 黒実線の対角線や青破線, 赤点線はハミルトニアンの構成を見やすくするための線である.

の形で近似できる.

z 軸を $z_1, z_2, \dots, z_N$ と離散化した際, 境界条件として固定端

$$a_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z_0) = 0, \quad a_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z_{N+1}) = 0,$$

を採用する. もし周期境界条件を採用する場合は

$$a_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z_0) = a_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z_N) \quad a_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z_{N+1}) = a_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z_1),$$

を採用すればよい.

ハミルトニアンと行列要素

有限差分化を行うと Schrödinger 方程式全体は

$$H a_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z) = E_{n\mathbf{k}_{\parallel}} a_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z),$$

$$a_n(\mathbf{k}_{\parallel}, z) = [a_{S,\uparrow} \quad a_{S,\downarrow} \quad a_{3/2,3/2} \quad a_{3/2,1/2} \quad a_{3/2,-1/2} \quad a_{3/2,-3/2} \quad a_{1/2,1/2} \quad a_{1/2,-1/2}]_n^T,$$

$$a_\alpha(\mathbf{k}_{\parallel}, z) = [a_\alpha(\mathbf{k}_{\parallel}, z_1) \quad a_\alpha(\mathbf{k}_{\parallel}, z_2) \quad \dots \quad a_\alpha(\mathbf{k}_{\parallel}, z_N)]^T,$$

である. Schrödinger 方程式の左辺を図で表すと, 図 4.4 である.

図 4.4 の 1 から 8 の各ブロックで演算子 $\hat{k}_z$ が現れる行列要素の離散化を明示しておく．まず運動エネルギーは

$$E_k^0 a_\alpha(z_i) = \left(\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 \hat{k}_z^2}{2m_0} \right) a_\alpha(z_i), \quad (4.16)$$

$$= \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} a_\alpha(z_i) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dz^2} a_\alpha(z_i), \quad (4.17)$$

$$= \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} a_\alpha(z_i) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{a_\alpha(z_{i+1}) - 2a_\alpha(z_i) + a_\alpha(z_{i-1}))}{\Delta z^2} + O(\Delta z^2), \quad (4.18)$$

$$E_k^0 a_\alpha(z_i) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{\Delta z^2} a_\alpha(z_{i+1}) + \left(\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0} \frac{1}{\Delta z^2} \right) a_\alpha(z_i) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{\Delta z^2} a_\alpha(z_{i-1}) + O(\Delta z^2), \quad (4.19)$$

である．Kane の行列要素を伴う項は

$$\sqrt{\frac{2}{3}} P \hat{k}_z a_\alpha(z_i) = \sqrt{\frac{2}{3}} P \cdot (-i) \frac{a_\alpha(z_{i+1}) - a_\alpha(z_{i-1}))}{2\Delta z} = -\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{-iP}{2\Delta z} a_\alpha(z_{i-1}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{-iP}{2\Delta z} a_\alpha(z_{i+1}), \quad (4.20)$$

$$\pm \frac{1}{\sqrt{3}} P \hat{k}_z a_\alpha(z_i) = \pm \frac{1}{\sqrt{3}} P \cdot (-i) \frac{a_\alpha(z_{i+1}) - a_\alpha(z_{i-1}))}{2\Delta z} = \mp \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{-iP}{2\Delta z} a_\alpha(z_{i-1}) \pm \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{-iP}{2\Delta z} a_\alpha(z_{i+1}), \quad (4.21)$$

である．それ以外の $k_{\pm}$ や Hartree ポテンシャルなど井戸構造に関わるポテンシャル [式 (4.10, 4.11)], s - d 交換, p - d 交換の項は 1 から 8 の各ブロックで対角成分のみを占める．有限差分化で得られた 1 から 8 のブロックを付録 I に示す．

4.3 伝導帯の有効ハミルトニアン

初めに n 型強磁性半導体の伝導帯を記述する有効ハミルトニアンを結晶構造の対称性から導く．この対称性の解析によって、対称性から許される項としてキャリアスピン $\hat{\sigma}$, 波数ベクトル $\mathbf{k}$, 磁化 $\mathbf{M}$ の結合項を見いだせる．そして、4.3.2 節で摂動論による有効ハミルトニアンと一貫していることを確認する．

4.3.1 対称性解析による有効ハミルトニアン

対称性から許される項を得るため群論を用いる．群論の用い方には二種類あり、物理量の変換則を直接調べてハミルトニアンの不変な項を抽出する方法と群の既約表現による系統的な方法があり、どちらでも同一の結果を導ける．本節は物理量の変換則を直接調べる方法で説明する．系統的な方法は付録 D で述べる．

物理量の変換則を直接調べる方法は次の手順である．まず磁化 $\mathbf{M}$ の存在する系での群を特定し、波数や磁化、キャリアスピンの変換則を調べる．そして、それら物理量の積でつくられる量の変換則を明らかにする．最後に $\hat{\sigma}$, $\mathbf{k}$, $\mathbf{M}$ を反転させる時間反転操作で不変な項を残す．ただし、磁化 $\mathbf{M}$, 波数 $\mathbf{k}$ を摂動として扱い、 $\mathbf{k}$ について二次、 $\mathbf{M}$ について一次までを考慮する．

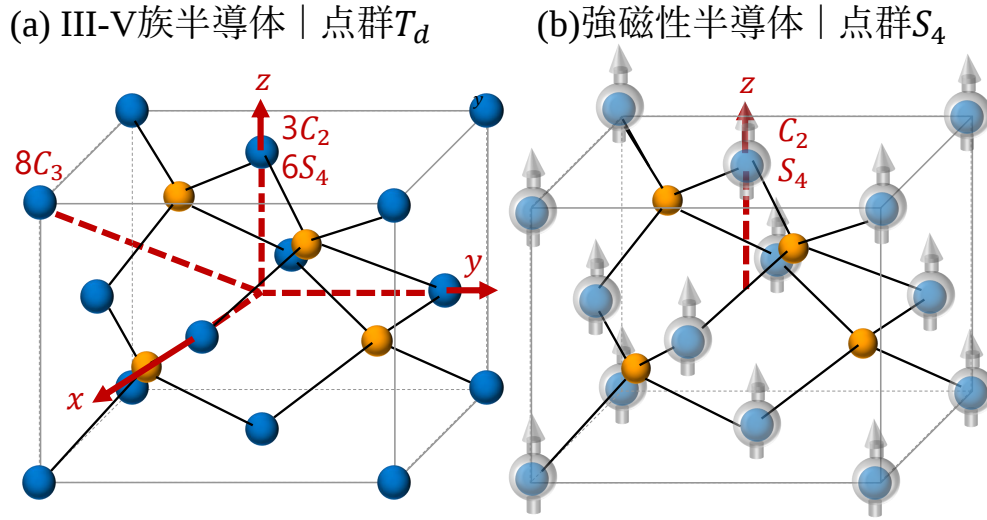


図 4.5 (a) 非磁性 III-V 族半導体の点群 T_d . (b) 磁化が z 軸方向を向いた n 型強磁性半導体の点群 S_4 . 各点群の対称操作の詳細は本文を参照する. (b) の系では系の対称性として磁化まで含めて不変にすることが要請されるため, (a) の系よりも対称性が低下する. さらに仮想結晶近似に相当する近似を取り入れた系とした [図 3.1]. より精密には, 点群 T_d の適合関係から導かれる [85].

群の特定

n 型強磁性半導体の対称性は図 3.1 から非磁性状態なら局在スピンを無視して点群 T_d で記述される [図 4.5(a)]. 点群 T_d の要素は

- E : 恒等操作
- $8C_3$: 図 4.5(a) の立方体の対角線を軸にした 8 通りの $2\pi/3$ 回転
- $3C_2$: x, y, z 軸に関して π 回転
- $6S_4$: x, y, z 軸に関して $\pm\pi/2$ 回転して, 回転軸に直交する平面で鏡映
- $6\sigma_d$: 立方体の各面の対角線を含む鏡映

である.

磁化が z 軸方向に向く場合の対称操作は磁化まで含めて不変にする対称操作に限られるため, 結晶の対称性は点群 T_d で z 方向に磁場を印加した場合の適合関係 (対称性の低下の仕方) から導かれ, 点群 S_4 で記述される [85] [図 4.5(b)]. 点群 S_4 の要素は

- E : 恒等操作
- C_2 : z 軸に関して π 回転
- S_4 : z 軸に関して $\pi/2$ 回転して, 回転軸に直交する平面で鏡映
- S_4^{-1} : z 軸に関して $-\pi/2$ 回転して, 回転軸に直交する平面で鏡映

である.

不変な項の特定

図 4.6 の表 (a-d) に点群 S_4 の対称操作による波数 $\mathbf{k}$, キャリアスピン $\hat{\sigma}$, 磁化 M_z と波数二次の変換則をまとめた. $\mathbf{k}$ で例えば k_x は C_2 で $-k_x$ に, S_4^{-1} で $-k_y$ に変換される. $\hat{\sigma}$, M_z , 波数二次についても同様である.

図 4.6 の表からハミルトニアンで不変な項を構成できる. ハミルトニアンはすべての対称操作で符号を変えてはいけないため, ハミルトニアンは表で符号を変えない項目同士の積, 同じ変換則に従う項目同士の積のみを項に持つ. さらに磁化の反転まで含めた時間反転対称性でさらに項を絞る. 以下, 具体的に不変な項の例を見ていく.

まず磁化ゼロ次で波数について二次までで拾い上げると

- $\hat{1}_\sigma$: 自明なスピンの単位演算子であり, 任意のスカラー (エネルギーの基準値) に相当する
- $(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\hat{1}_\sigma$: 運動エネルギーに相当する

である. 運動エネルギーとしてなら

- $a[(k_x^2 + k_y^2) + bk_z^2]\hat{1}_\sigma$: a, b は対称性から決まらない物質パラメータ

という項もありえる. なぜなら, 図 4.6 (c) から k_x^2 と k_y^2 は組をつくり閉じているため, k_z^2 から独立し得るためである. しかし, この項は z 成分を特別扱いしており, もともと z 方向を特別扱いしている理由は磁化を z 方向に設定しているためである. すると, 時間反転対称性から b は M_z について二次から始まる. よって, 磁化について一次までで打ち切る場合には考えなくてもよい.

磁化一次で波数について二次までで拾い上げ, 時間反転対称性も反映させると不変な項は

- $\hat{\sigma}_z$ に比例する項
 - $M_z\hat{\sigma}_z$: 波数に依存しない一様な交換相互作用に相当し, s - d 交換に対応する
 - $M_z\hat{\sigma}_z(k_x^2 + k_y^2), M_z\hat{\sigma}_zk_z^2$: $\mathbf{k}, \hat{\sigma}, \mathbf{M}$ の結合項であり, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法で定式化した機構から p - d 交換相互作用に起因する
- $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ に比例する項: $M_z(k_zk_x\hat{\sigma}_x + k_zk_y\hat{\sigma}_y)$ (k_yk_z と k_xk_z は対称操作で互いに交換されるため組をつくる)

である. あとは以上の不変な項に対称性で決まらない物質パラメータを掛け合わせ, すべての項を足し合わせれば波数二次, 磁化について一次までの伝導帯に関する有効ハミルトニアンを得られる. 参考のためにハミルトニアンに現れない不変でない項の例は図 4.6 (d) の項である.

伝導帯の有効ハミルトニアンまとめ

前節の対称性の解析から導かれる伝導帯の有効ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H_c^{\text{eff}} = & (a_{1,1} + a_{1,2}k^2)\hat{1}_\sigma \\
 & + (a_{4,1} + a_{4,2}k^2 + a_{4,3}k_z^2)M\hat{\sigma}_z \\
 & + a_{4,4}k_zM(k_x\hat{\sigma}_x + k_y\hat{\sigma}_y),
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

(a) キャリア波数 $\mathbf{k}$
(極性ベクトル)

E	C_2	S_4	S_4^{-1}
k_x	$-k_x$	k_y	$-k_y$
k_y	$-k_y$	$-k_x$	k_x
k_z	k_z	$-k_z$	$-k_z$

(b) キャリアスピン (パウリスピン) と
磁化 (z 成分のみ) (軸性ベクトル)

E	C_2	S_4	S_4^{-1}
σ_x	$-\sigma_x$	$-\sigma_y$	σ_y
σ_y	$-\sigma_y$	σ_x	$-\sigma_x$
σ_z, M_z	σ_z, M_z	σ_z, M_z	σ_z, M_z

(c) 波数 $\mathbf{k}$ 二次

E	C_2	S_4	S_4^{-1}
k_x^2	k_x^2	k_y^2	k_y^2
k_y^2	k_y^2	k_x^2	k_x^2
k_z^2	k_z^2	k_z^2	k_z^2
$k_x k_y$	$k_x k_y$	$-k_x k_y$	$-k_x k_y$
$k_y k_z$	$-k_y k_z$	$k_x k_z$	$-k_x k_z$
$k_z k_x$	$-k_z k_x$	$-k_z k_y$	$k_z k_y$

(d) 不変でない項の例

E	C_2	S_4	S_4^{-1}
$k_y k_z \sigma_x$	$k_y k_z \sigma_x$	$-k_x k_z \sigma_y$	$-k_x k_z \sigma_y$
$k_z k_x \sigma_y$	$k_z k_x \sigma_y$	$-k_z k_y \sigma_x$	$-k_z k_y \sigma_x$

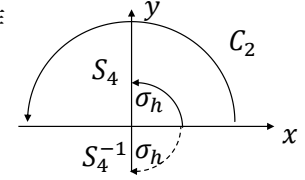
(e) 点群 S_4 の対称操作

図 4.6 点群 S_4 の対称操作に対する (a) キャリアの波数 $\mathbf{k}$, (b) キャリアスピンと磁化 (z 成分), (c) 波数二次の変換則と (d) 変換で不変でない例. 参考のために点群 S_4 の対称操作を z 軸方向から見た図で示した (e). (e) での S_4, S_4^{-1} で書かれた σ_h は $\pm\pi/2$ 回転の後に xy 平面に関する鏡映操作を表す. (a-d) で各物理量に関して符号の変える項目を赤字で強調表示した.

である. 付録 D.1 より, 群の既約表現を用いた一般の有効ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
H_c^{\text{eff}} = & (a_{1,1} + a_{1,2}k^2) \hat{1}_\sigma \\
& + (a_{4,1} + a_{4,2}k^2) \sum_{i=x,y,z} M_i \hat{\sigma}_i + a_{4,3} \sum_{i=x,y,z} k_i^2 M_i \hat{\sigma}_i \\
& + a_{4,4} [k_x(k_y M_y + k_z M_z) \hat{\sigma}_x + \text{c.p.}], \tag{4.23}
\end{aligned}$$

であり, 文献 [1, 86] の記号に従い $a_{i,j}$ は 4.3.2 節の摂動計算から決める物質パラメータであり, 対称性のみからは決まらない. c.p. は x, y, z の指標を巡回置換させた項を略記している. 物質パラメータの物理的な意味を述べると, $a_{1,1}$ は定数のエネルギーシフト, $a_{1,2}$ は運動エネルギーの係数に対応する. $a_{4,1}$ はキャリアスピン $\hat{\sigma}$ と磁化 $\mathbf{M}$ のキャリアの波数 $\mathbf{k}$ に依存しない結合の係数であり, s - d 交換相互作用である. それ以降の $a_{4,2}, a_{4,3}, a_{4,4}$ が $\hat{\sigma}, \mathbf{M}, \mathbf{k}$ の結合を表す. そのような $\mathbf{k}$ - $\hat{\sigma}$ - $\mathbf{M}$ 結合項は図 2.1 に示す $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ の機構を通して現れる. $\hat{\sigma}$ と $\mathbf{M}$ の結合は価電子帯の p - d 交換に起因し, $\mathbf{k}$ 依存性は伝導帯と価電子帯間の $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移で現れる. $\mathbf{k}$ について三次元以上の項を考慮すれば, Dresselhaus スピン軌道結合や nonparabolicity を記述する項が現れる [1, 86].

4.3.2 摂動論による有効ハミルトニアン

Folding Down 法による有効ハミルトニアン

Folding Down 法 [18, 20] を用いて, 三次元バルクと量子井戸における伝導帯の電子に関する有効ハミルトニアンを導く. 簡単さのため, 磁化の向き e を $+z$ の方向に取る [87]. Schrödinger 方程式は式 (4.13) より

$$\begin{bmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_c \\ \mathbf{a}_v \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \mathbf{a}_c \\ \mathbf{a}_v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a}_c = \begin{bmatrix} a_{S\uparrow} \\ a_{S\downarrow} \end{bmatrix},$$

である.

Schrödinger 方程式を

$$(H - E) U U^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_c \\ \mathbf{a}_v \end{bmatrix} = 0,$$

$$U = \begin{bmatrix} \hat{1}_2 & -(H_c - E)^{-1} H_{cv} \\ -(H_v - E)^{-1} H_{cv}^\dagger & \hat{1}_6 \end{bmatrix},$$

の形に変換する. $\hat{1}_2, \hat{1}_6$ はそれぞれ $2 \times 2, 6 \times 6$ の単位行列である. そして, ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} & (H - E) U, \\ &= \begin{bmatrix} H_c - E\hat{1}_2 & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_v - E\hat{1}_6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{1}_2 & -(H_c - E)^{-1} H_{cv} \\ -(H_v - E)^{-1} H_{cv}^\dagger & \hat{1}_6 \end{bmatrix}, \\ &= \begin{bmatrix} H_c - E\hat{1}_2 + H_{cv} (E - H_v)^{-1} H_{cv}^\dagger & 0 \\ 0 & H_v - E\hat{1}_6 + H_{cv}^\dagger (E - H_c)^{-1} H_{cv} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

の形に変換でき, 固有ベクトルは

$$\begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{a}}_c \\ \tilde{\mathbf{a}}_v \end{bmatrix} \equiv U^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_c \\ \mathbf{a}_v \end{bmatrix},$$

に変換する. これらの変換の結果, 伝導帯に関する Schrödinger 方程式は

$$\begin{bmatrix} H_c - E\hat{1}_2 + H_{cv} (E - H_v)^{-1} H_{cv}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{a}_{c\uparrow} \\ \tilde{a}_{c\downarrow} \end{bmatrix} = 0,$$

である.

変換された Schrödinger 方程式から 8-バンドの固有ベクトルの伝導帯成分へと価電子帯の効果を繰り込んだハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_c^{\text{eff}} &= H_c + H_{0cv} (E - H_v)^{-1} H_{0cv}^\dagger, \\ H_c &= H_{0c} + H_{s-d}, \\ H_v &= H_{0v} + H_{p-d}, \end{aligned} \tag{4.24}$$

であり, E は元の $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンの固有エネルギーである.

記号を簡略化するために、量子井戸への応用まで念頭に置き、式 (4.9) より

$$\begin{cases} E_6^\pm(z) = E_k^0 + V_H(z) + h_6(z) \pm 3A_{s-d}(z), \\ E_8^{\pm 3}(z) = -E'_k + V_H(z) - h_8(z) \pm 3B_{p-d}(z), \\ E_8^\pm(z) = -E'_k + V_H(z) - h_8(z) \pm B_{p-d}(z), \\ E_7^\pm(z) = -\tilde{E}_k + V_H(z) - h_7(z) \pm B_{p-d}(z), \end{cases}$$

の記号を導入すると、有効ハミルトニアン全体の全体は

$$\begin{aligned} H_c^{\text{eff}} &= H_c + H_{0cv} (E - H_v)^{-1} H_{0cv}^\dagger, \\ H_c &= \begin{bmatrix} E_6^+(z) & 0 \\ 0 & E_6^-(z) \end{bmatrix}, \\ H_{cv} &= \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P\hat{k}_z & \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_- & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}P\hat{k}_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_- \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P\hat{k}_z & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_- & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}P\hat{k}_z \end{bmatrix}, \\ E - H_v &= \begin{bmatrix} E - E_8^{+3}(z) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E - E_8^+(z) & 0 & 0 & 2\sqrt{2}B & 0 \\ 0 & 0 & E - E_8^-(z) & 0 & 0 & 2\sqrt{2}B \\ 0 & 0 & 0 & E - E_8^{-3}(z) & 0 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{2}B & 0 & 0 & E - E_7^-(z) & 0 \\ 0 & 0 & 2\sqrt{2}B & 0 & 0 & E - E_7^+(z) \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

である。さらに計算を進めると、有効ハミルトニアンの $H_{0cv} (E - H_v)^{-1} H_{0cv}^\dagger$ は

$$\begin{aligned} [H_{cv} (E - H_v)^{-1} H_{cv}^\dagger]_{(1,1)} &= \frac{P^2 k_\parallel^2}{3} \Gamma_1^+(z) + \frac{P^2}{3} \hat{k}_z \tilde{\Gamma}_1^+(z) \hat{k}_z, \\ [H_{cv} (E - H_v)^{-1} H_{cv}^\dagger]_{(2,2)} &= \frac{P^2 k_\parallel^2}{3} \Gamma_1^-(z) + \frac{P^2}{3} \hat{k}_z \tilde{\Gamma}_1^-(z) \hat{k}_z, \\ [H_{cv} (E - H_v)^{-1} H_{cv}^\dagger]_{\text{非対角}} &= \frac{P^2}{3} \left(\frac{d\Gamma_2(z)}{dz} + \hat{B} \right) (k_y \hat{\sigma}_x - k_x \hat{\sigma}_y) - \frac{1}{3} P^2 \hat{A} (k_x \hat{\sigma}_x + k_y \hat{\sigma}_y), \end{aligned}$$

$$\hat{A} = \frac{1}{2} \left(\tilde{\Gamma}_2(z) \hat{k}_z + \hat{k}_z \tilde{\Gamma}_2(z) \right),$$

$$\hat{B} = \frac{i}{2} \left(\tilde{\Gamma}_2(z) \hat{k}_z - \hat{k}_z \tilde{\Gamma}_2(z) \right),$$

$$\Gamma_1^+(z) = \frac{3}{2} \frac{1}{E - E_8^{+3}} + \frac{1}{2} \frac{-\epsilon_7^+ - 4B}{D^{+-}} + \frac{-2B - \epsilon_8^-}{D^{+-}}, \quad \tilde{\Gamma}_1^+(z) = \frac{2[-\epsilon_7^- - 2B]}{D^{-+}} + \frac{-4B - \epsilon_8^+}{D^{-+}},$$

$$\Gamma_1^-(z) = \frac{3}{2} \frac{1}{E - E_8^{-3}} + \frac{1}{2} \frac{-\epsilon_7^- + 4B}{D^{-+}} + \frac{2B - \epsilon_8^+}{D^{-+}}, \quad \tilde{\Gamma}_1^-(z) = \frac{2[-\epsilon_7^+ + 2B]}{D^{+-}} + \frac{4B - \epsilon_8^-}{D^{+-}},$$

$$\Gamma_2(z) = \frac{-\epsilon_7^- + 2B + \epsilon_8^+}{D^{-+}}, \quad \tilde{\Gamma}_2(z) = \frac{-\epsilon_7^+ + 2B + \epsilon_8^-}{D^{-+}} + \frac{\epsilon_7^+ + 2B - \epsilon_8^-}{D^{+-}},$$

$$\epsilon_8^{\pm 3} = E - E_8^{\pm 3}, \quad \epsilon_8^\pm = E - E_8^\pm, \quad \epsilon_7^\pm = E - E_7^\pm,$$

$$D^{-+} = (2\sqrt{2}B_{p-d})^2 - (E - E_7^-)(E - E_8^+),$$

$$D^{+-} = (2\sqrt{2}B_{p-d})^2 - (E - E_7^+)(E - E_8^-),$$

である。

続いて E を含まない有効ハミルトニアンにするため [18, 20]

$$\begin{aligned}\chi_8^{\pm 3} &= \frac{E - \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} (k_{\parallel}^2 + \hat{k}_z^2) + V_H(z) - h_8(z) \right]}{E_g \pm 3B_{p-d}(z)}, \\ \chi_8^{\pm} &= \frac{E - \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} (k_{\parallel}^2 + \hat{k}_z^2) + V_H(z) - h_8(z) \right]}{E_g \pm B_{p-d}(z)}, \\ \chi_7^{\pm} &= \frac{E - \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} (k_{\parallel}^2 + \hat{k}_z^2) + V_H(z) - h_7(z) \right]}{E_g + \Delta_g \pm B_{p-d}(z)},\end{aligned}$$

の因子でべき展開して、有効ハミルトニアンを考察しやすい形へと近似する。三次元バルクの結果は量子井戸で得られた結果で物質パラメータの z 依存性を落とし、 z 依存性のあるポテンシャルをゼロとすれば得られる。三次元バルクの有効ハミルトニアンの方が量子井戸よりも単純であるため、三次元バルクの結果から議論する。

上記の議論からわかる通り、考慮する状態を伝導帯のみに射影するため、規格化定数を定義しなおさなければならない [1]。しかし、本節で導く有効ハミルトニアンが後で議論するように対称性による有効ハミルトニアンと波数依存性、キャリアスピンの依存性といった定性的な依存性で合致することから、再規格化による新たな項は出現したとしても、波数のべき依存性など定性的な振る舞いに関して無視できる。

三次元バルクでの有効ハミルトニアン

H_c^{eff} を展開する際、三次元バルクでの近似因子 $\chi_8^{\pm 3}$, $\chi_8^{\pm}$, $\chi_7^{\pm}$ は

$$\begin{aligned}\chi_8^{\pm 3} &= \frac{E + E_k^0}{E_g \pm 3B_{p-d}}, \quad \chi_8^{\pm} = \frac{E + E_k^0}{E_g \pm B_{p-d}}, \\ \chi_7^{\pm} &= \frac{E + E_k^0}{E_g + \Delta_g \pm B_{p-d}},\end{aligned}$$

であり、次の仮定

$$\chi_8^{\pm 3}, \chi_8^{\pm}, \chi_7^{\pm} \ll 1, \quad (4.25)$$

に基づいて $\chi_8^{\pm 3}$, $\chi_8^{\pm}$, $\chi_7^{\pm}$ の最低次をとる。条件 [式 (4.25)] は $E_g - 3|B_{p-d}| \gg |E + E_k^0|$ の時に成り立つ。 $x = 3.7\%$ の InFeAs では $E_g = 0.418$ eV, $3|B_{p-d}| = 0.11$ eV [付録 H] であるため、その条件が成り立つ。しかし、 $x = 14\%$ 近傍では $E_g - 3|B_{p-d}|$ がゼロに近づき、条件 [式 (4.25)] の少なくとも一つがもはや成り立たなくなる。

H_c^{eff} の第二項は

$$\begin{aligned}\left[H_{0cv} (E - H_v)^{-1} H_{0cv}^{\dagger} \right]_{(1,1)} &= \frac{P^2}{3} \Gamma_1^+ k_{\parallel}^2 + \frac{P^2}{3} \tilde{\Gamma}_1^+ k_z^2, \\ \left[H_{0cv} (E - H_v)^{-1} H_{0cv}^{\dagger} \right]_{(1,2)} &= -\frac{P^2}{3} \tilde{\Gamma}_2 k_z (k_x \hat{\sigma}_x + k_y \hat{\sigma}_y)_{(1,2)},\end{aligned}$$

の形に展開でき, $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$ である. 係数は

$$\begin{aligned}\Gamma_1^+ &= \frac{3}{2} \frac{1}{E_g - 3B_{p-d}} \left[1 - \chi_8^{-3} + (\chi_8^{-3})^2 - \dots \right] \\ &+ \frac{1}{2} \frac{1}{(E_g + B_{p-d}) d^+} \left[-\frac{E_g + \Delta_g + 3B_{p-d}}{E_g + \Delta_g - B_{p-d}} - \chi_7^- \right] \\ &+ \frac{1}{(E_g + \Delta_g - B_{p-d}) d^+} \left[-\frac{E_g + 3B_{p-d}}{E_g + B_{p-d}} - \chi_8^+ \right],\end{aligned}\quad (4.26)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_1^+ &= \frac{2}{(E_g - B_{p-d}) d^-} \left[-\frac{E_g + \Delta_g + 3B_{p-d}}{E_g + \Delta_g + B_{p-d}} - \chi_7^+ \right] \\ &+ \frac{1}{(E_g + \Delta_g + B_{p-d}) d^-} \left[-\frac{E_g + 3B_{p-d}}{E_g - B_{p-d}} - \chi_8^- \right],\end{aligned}\quad (4.27)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_2 &= \frac{-\Delta_g - (E_g + \Delta_g + B_{p-d}) \chi_7^+ + (E_g - B_{p-d}) \chi_8^-}{(E_g - B_{p-d}) (E_g + \Delta_g + B_{p-d}) d^-} \\ &+ \frac{\Delta_g - (E_g + \Delta_g - B_{p-d}) \chi_7^- + (E_g + B_{p-d}) \chi_8^+}{(E_g + B_{p-d}) (E_g + \Delta_g - B_{p-d}) d^+},\end{aligned}\quad (4.28)$$

$$d^{\pm} = \frac{(2\sqrt{2}B_{p-d})^2}{(E_g \pm B_{p-d}) (E_g + \Delta_g \mp B_{p-d})} - (1 + \chi_8^{\pm} + \chi_7^{\mp} + \chi_8^{\pm} \chi_7^{\mp}),$$

である. $\left[H_{0cv} (E - H_v)^{-1} H_{0cv}^{\dagger} \right]_{(2,2)}$ 成分は $\left[H_{0cv} (E - H_v)^{-1} H_{0cv}^{\dagger} \right]_{(1,1)}$ 成分で B_{p-d} の前の符号を反転させることで得られる.

条件 [式 (4.25)] を仮定し, 最低次として $\chi_8^{\pm 3}, \chi_8^{\pm}, \chi_7^{\pm}$ のゼロ次までとし, 有効ハミルトニアンは

$$H_c^{\text{eff}} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} + \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}}{2} \hat{1}_{\sigma} + 3A_{s-d} \hat{\sigma}_z + \mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (4.29)$$

である. $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ は p - d 交換スピン軌道結合を記述する有効磁場であり, 次式

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)} \right)_{\mu} &= -\frac{1}{3} P^2 \tilde{\Gamma}_2 k_z k_{\mu}, \quad \left(\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)} \right)_z = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}}{2}, \\ \mu &= x, y,\end{aligned}\quad (4.30)$$

で与えられる. そして, $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) はスピン依存の運動エネルギーであり, 表式は

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel\sigma}^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{z\sigma}^*},$$

である. 有効ハミルトニアンの固有エネルギー $E_{\pm}$ は

$$\begin{aligned}E_{\pm} &= \frac{E_{\mathbf{k}\uparrow} + E_{\mathbf{k}\downarrow}}{2} \pm \Delta E, \\ E_{\mathbf{k}\sigma} &= \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} + 3A_{s-d}\sigma, \\ \Delta E &= \sqrt{\left(\frac{E_{\mathbf{k}\uparrow} - E_{\mathbf{k}\downarrow}}{2} \right)^2 + \left(\frac{P^2}{3} \tilde{\Gamma}_2 \right)^2 k_{\parallel}^2 k_z^2},\end{aligned}\quad (4.31)$$

である. スピン依存の有効質量と係数 $\tilde{\Gamma}_2$ は

$$\begin{aligned}\frac{m_0}{m_{\parallel\uparrow}^*} &= 1 + \frac{r_-}{2} + \frac{R_+ + E_P g_+}{6}, & \frac{m_0}{m_{z\uparrow}^*} &= 1 + \frac{R_- + 2E_P g_-}{3}, \\ \frac{m_0}{m_{\parallel\downarrow}^*} &= 1 + \frac{r_+}{2} + \frac{R_- + E_P g_-}{6}, & \frac{m_0}{m_{z\downarrow}^*} &= 1 + \frac{R_+ + 2E_P g_+}{3}, \\ \tilde{\Gamma}_2 &= g_- - g_+, \end{aligned} \quad (4.32)$$

であり, 各因子は

$$\begin{aligned}E_P &= \frac{2m_0 P^2}{\hbar^2}, \\ r_{\pm} &= \frac{E_P}{E_g \pm 3B_{p-d}}, \\ R_{\pm} &= E_P(3E_g \pm 9B_{p-d})/\delta_{\pm}, \\ g_{\pm} &= \Delta_g/\delta_{\pm}, \\ \delta_{\pm} &= (E_g \pm B_{p-d})(E_g + \Delta_g \mp B_{p-d}) - 8B_{p-d}^2, \end{aligned} \quad (4.33)$$

である. これらの表式から $\tilde{\Gamma}_2$ と $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ は有効磁場 $B_{p-d} \propto M$ [式 (4.5)] を通して磁化 M に非線形である. ゆえに $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ は M の非線形関数である.

対称性による有効ハミルトニアン [式 (4.22)] から許される項と摂動計算による項 [式 (4.29)] の対応関係は

$$\begin{aligned}a_{1,1} &= 0, \\ a_{1,2}k^2 &= \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} + \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}}{2}, \\ a_{4,1}M &= 3A_{s-d}, \\ a_{4,2}M &= \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{1}{m_{\parallel\uparrow}^*} - \frac{1}{m_{\parallel\downarrow}^*} \right), \\ a_{4,3}M &= \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{1}{m_{z\uparrow}^*} - \frac{1}{m_{z\downarrow}^*} \right) - a_{4,2}M, \\ a_{4,4}M &= -\frac{1}{3}P^2\tilde{\Gamma}_2, \end{aligned}$$

である. 各式の右辺で M は一次までとしており, それは式 (4.22) を導く際の対称性による解析で M の一次までとしているためである.

有効磁場 $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ [式 (4.30)] は波数ベクトル $\mathbf{k}$ について二次である. 有効磁場の x と y 成分はそれぞれ $k_z k_x$ と $k_z k_y$ に比例し, z 成分はスピン up と down の状態間の運動エネルギー差で表される. $\mathbf{k}$ について二次の $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ は $\mathbf{k}$ について一次, 三次である Rashba スピン軌道相互結合 と Dresselhaus スピン軌道相互結合による有効磁場と好対照を成している. 非磁性半導体でのスピン軌道相互結合は時間反転対称性のために $\mathbf{k}$ について奇数次でなければならない. 一方で $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ は磁化の反転とともに符号を変えるため, $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ は $\mathbf{k}$ の偶数次でなければならない.

$\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ の z 成分は有効質量 $m_{\parallel\sigma}^*$ と $m_{z\sigma}^*$ のスピン依存性を B_{p-d} により示し, z 方向を向く磁化によって発生している. $\tilde{\Gamma}_2$ に比例する x, y 成分は価電子帯の B_{p-d} に加えて相対論的スピン軌道結合 Δ_g

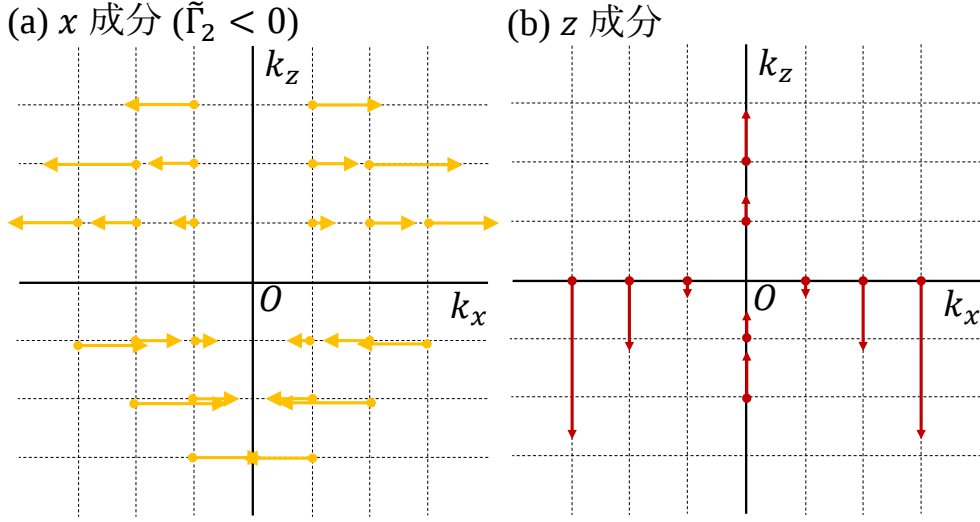


図 4.7 p - d 交換相互作用による有効磁場 $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ [式 (4.30)] の概念図. 各図は $k_x k_z$ 平面上における (a) x と (b) z 成分であり, O は $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ を表す. $B_{p-d} < 0$ [表 4.2] であり, $\tilde{\Gamma}_2 < 0$ と $1/m_{\uparrow}^* - 1/m_{\downarrow}^* \simeq -2(1/m_{z\uparrow}^* - 1/m_{z\downarrow}^*) < 0$ が成り立つ. 後者の不等式によって $k_x k_y$ 平面で $\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} < \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}$, k_z 軸に沿って $\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} > \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}$ が成り立つ. 図は文献 [47] より引用 (©2022 American Physical Society).

にも起因する. 磁化に直交する xy 平面内成分は $(k_x, k_y, 0)$ に並行であり, $(k_x, k_y, 0)$ に直交する Rashba の有効磁場と対照的である. 図 4.7 (a) と (b) は $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ の x と z 成分を $k_x k_z$ 平面で定性的に示した図である. ただし, 議論を固定するために $\tilde{\Gamma}_2 < 0$, $1/m_{\uparrow}^* - 1/m_{\downarrow}^* \simeq -2(1/m_{z\uparrow}^* - 1/m_{z\downarrow}^*) < 0$ とした. これらの条件は $B_{p-d} < 0$ の場合に成り立つ. $k_y = 0$ であるため, 有効磁場の y 成分はゼロである.

量子井戸での有効ハミルトニアン

量子井戸での有効ハミルトニアン第二項は

$$\begin{aligned} \left[H_{0cv} (E - H_v)^{-1} H_{0cv}^\dagger \right]_{(1,1)} &= \frac{P^2}{3} \Gamma_1^+(z) k_{\parallel}^2 + \frac{P^2}{3} \hat{k}_z \tilde{\Gamma}_1^+(z) \hat{k}_z, \\ \left[H_{0cv} (E - H_v)^{-1} H_{0cv}^\dagger \right]_{(1,2)} &= \frac{P^2}{3} \frac{d\Gamma_2(z)}{dz} (k_y \hat{\sigma}_x - k_x \hat{\sigma}_y)_{(1,2)} \\ &\quad - \frac{P^2}{3} \tilde{\Gamma}_2(z) \hat{k}_z (k_x \hat{\sigma}_x + k_y \hat{\sigma}_y)_{(1,2)}, \\ \Gamma_2(z) &= \frac{-\Delta_g - (E_g + \Delta_g + B_{p-d}) \chi_7^+ + (E_g - B_{p-d}) \chi_8^-}{(E_g - B_{p-d})(E_g + \Delta_g + B_{p-d}) d^-}, \end{aligned}$$

である. ここで Γ_1^+ [式 (4.26)], $\tilde{\Gamma}_1^+$ [式 (4.27)], Γ_2 , $\tilde{\Gamma}_2$ [式 (4.28)] で B_{p-d} の量子井戸における z 依存性を考慮した.

そして, $\chi_8^{\pm 3}, \chi_8^{\pm}, \chi_7^{\pm}$ の最低次で有効磁場の演算子 $\hat{\mathbf{B}}_{\text{eff}}^{\text{QW}}$ を

$$\left(\hat{\mathbf{B}}_{\text{eff}}^{\text{QW}}\right)_x = -\frac{P^2}{3} \left[\hat{A}k_x - \left(\hat{B} + C(z)\right)k_y \right], \quad (4.34)$$

$$\left(\hat{\mathbf{B}}_{\text{eff}}^{\text{QW}}\right)_y = -\frac{P^2}{3} \left[\hat{A}k_y + \left(\hat{B} + C(z)\right)k_x \right], \quad (4.35)$$

$$\hat{A} = \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\Gamma}_2(z), \hat{k}_z \right\}, \quad \hat{B} = \frac{i}{2} \left[\tilde{\Gamma}_2(z), \hat{k}_z \right],$$

$$\left(\hat{\mathbf{B}}_{\text{eff}}^{\text{QW}}\right)_z = \frac{\hat{\varepsilon}_{\uparrow} - \hat{\varepsilon}_{\downarrow}}{2}, \quad (4.36)$$

$$\hat{\varepsilon}_{\sigma} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel\sigma}^*(z)} + \frac{\hbar^2}{2} \hat{k}_z \frac{1}{m_{z\sigma}^*(z)} \hat{k}_z,$$

の形で得られる. ここで $\{\hat{X}_1, \hat{X}_2\} = \hat{X}_1\hat{X}_2 + \hat{X}_2\hat{X}_1$ であり $[\hat{X}_1, \hat{X}_2] = \hat{X}_1\hat{X}_2 - \hat{X}_2\hat{X}_1$ である. $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{\varepsilon}_{\sigma}$ の項は $\chi_8^{\pm 3}, \chi_8^{\pm}, \chi_7^{\pm}$ のゼロ次で得られる一方, $C(z)$ の項は $\chi_7^{\pm}, \chi_8^{\pm}$ の一次で得られる [20]. $\hat{A}$ の項は $\hat{\mathbf{B}}_{\text{eff}}^{\text{QW}}$ の $(k_x, k_y, 0)$ に比例した成分をもたらし, その成分は三次元バルクでの有効磁場 $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ [式 (4.30)] でも存在する. 一方で, $\hat{B}$ と $C(z)$ の項は $\hat{\mathbf{B}}_{\text{eff}}^{\text{QW}}$ の成分のうち $(-k_y, k_x, 0)$ に平行な成分をもたらし, ポテンシャルによる dV_H/dz , dh_w/dz [付録 K] の Rashba 型の有効磁場と p - d 交換相互作用による dB_{p-d}/dz の項を含む. $\hat{\mathbf{B}}_{\text{eff}}^{\text{QW}}$ の z 成分はバルクでの $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ [式 (4.30)] のように有効質量のスピニ依存性に起因する.

4.4 バンド構造, スピン分裂, スピン配向の解析

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアン各固有状態でのスピンの期待値 (スピン配向) を計算するため, 表 3.1 に示す基底関数を用いてスピンの行列 $\hat{\Sigma}_i$

$$\hat{\Sigma}_i = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_i^{(s)} & O_{cv} \\ O_{cv}^{\dagger} & \hat{\sigma}_i^{(p)} \end{bmatrix}, \quad i = x, y, z, \quad (4.37)$$

の期待値を計算する. 以降で, その期待値を $\langle \hat{\Sigma}_i \rangle$ と記し, 有効ハミルトニアン [式 (4.29)] の固有状態に関する期待値を $\langle \hat{\sigma}_i \rangle_{\text{eff}}$ と書くことで区別する. 母体半導体の InAs のバンドパラメータは付録 H の値を用いる. 鉄濃度は 3.7% とする.

特に断らない限り, 本章では A_{s-d} を無視し, B_{p-d} によるスピン分裂とスピン配向を強調して調べていく. 後の図 4.11 で A_{s-d} による違いを議論する.

4.4.1 三次元バルク結晶での解析

図 4.8(a) では $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアン [式 (4.2)] から計算した, $[101]$ 方向, ゾーン中心近傍での伝導帯と価電子帯をプロットした. スピン分裂した伝導帯のみを抜き出した図が図 4.8(b) であり, 波数 k の関数であるスピン分裂を図 4.8(c) に示す. また図 4.8(b) と (c) では破線で有効ハミルトニアン [式 (4.29)] から計算された伝導帯とスピン分裂も示した.

$A_{s-d} = 0$ のため p - d 交換誘起であるスピン分裂 [図 4.8(c)] は $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンによる計算結果 (実線) で $k = 0$ 近傍において放物線状に増加しており, この増加は破線でプロットされた有効ハミルトニ

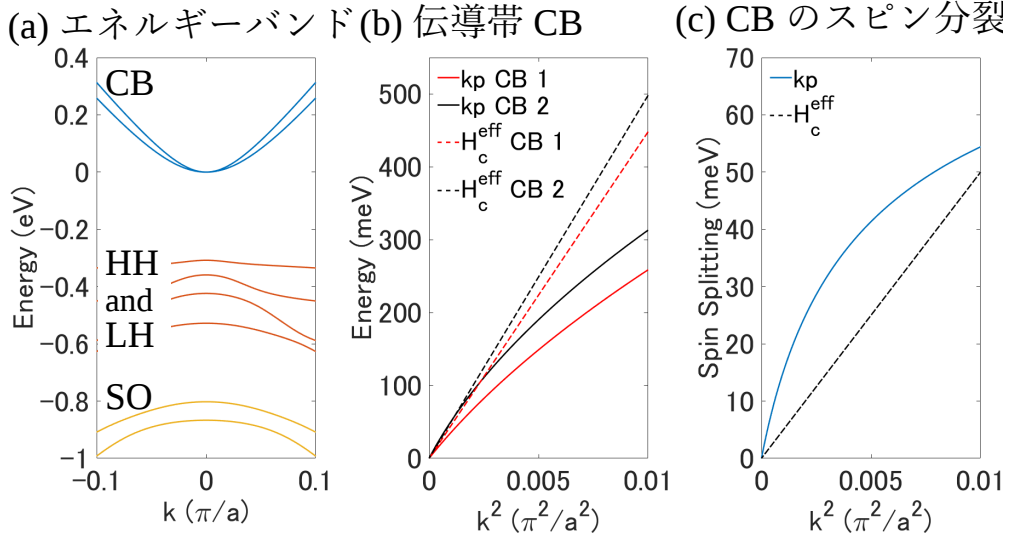


図 4.8 $x = 3.7\%$ の InFeAs における (a) エネルギーバンド, (b) スピン分裂した伝導帯, (c) 伝導帯のスピン分裂で実線は $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアン [式 (4.2)] から計算された結果である. 波数 $\mathbf{k}$ の方向は InAs の $[101]$ 方向であり, a は同じく InAs の格子定数である. パラメータの値は付録 H に与えてある. s - d 交換相互作用は $A_{s-d} = 0$ で考慮されていない. (b) と (c) の破線は有効ハミルトニアン H_c^{eff} [式 (4.29)] から計算された値を示す. 図は文献 [47] より引用 (©2022 American Physical Society).

アンの解析的な k に関する二次の増加 [式 (4.31)] と合致している. 一方で $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 計算では, より大きい k において増加率が落ち着く. InAs の格子定数 a を用いた際の $k/(\pi/a) = 0.1$ におけるスピン分裂は数 10meV に到達している. Fermi 波数 $k_F/(\pi/a) = 0.1$ は電子密度に換算すると 10^{19} cm^{-3} であり, 実験で典型的な値である.

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 計算による伝導帯とスピン分裂 (実線) は有効ハミルトニアンから計算されたそれら (破線) からずれている. この乖離は有効ハミルトニアンで $\chi_8^{\pm 3}, \chi_8^{\pm}, \chi_7^{\pm}$ のゼロ次までしか取らなかったためである. 高次項と再規格化による付加項を取ることで定量的な一致は改善されるだろうが, 高次項は未定の値である固有エネルギー E を有効ハミルトニアンに導入してしまう. 再規格化による項は計算を煩雑にするのみである. そして, 今回の最低次の有効ハミルトニアンは $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 計算結果の定性的な側面を理解するのに十分役立ったため, 本研究ではゼロ次までとする.

図 4.9 (a) と (b) は, 図 4.8(b) のスピン分裂した伝導帯の各固有状態に関する, 8×8 のスピン行列 $\hat{\Sigma}_i, i = x, y, z$ [式 (4.37)] の期待値 $\langle \hat{\Sigma}_i \rangle$ をプロットしスピン配向を示す. 比較のため図 4.9 (a') と (b') は有効ハミルトニアン [式 (4.29)] の固有状態による Pauli 行列 $\hat{\sigma}_i$ の期待値をプロットしている. また, その計算で示されたスピン配向を概念的に図 4.10 に示した.

各スピン分裂したサブバンドで $\langle \hat{\Sigma}_i \rangle$ と $\langle \hat{\sigma}_i \rangle$ は各成分で同じ符号を持ち, 磁化とほとんど平行か反平行である. この挙動は式 (4.30) の有効磁場の解析式から理解できる. $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ で磁化と平行な成分は z 成分であり B_{p-d} のみで現れる. 一方で直交する成分は B_{p-d} に加えて Δ_g を必要とするため, 平行な成分が直交する成分よりも大きい. 実際, 直交する成分 $\langle \hat{\Sigma}_x \rangle$ は $\Delta_g = 0$ で消える. また, $k_y = 0$ で $\langle \hat{\Sigma}_y \rangle$ が消えることは式 (4.30) の k_y に比例する $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ の y 成分の表現と一貫している. $\langle \hat{\Sigma} \rangle$ の長さはわずかに 1

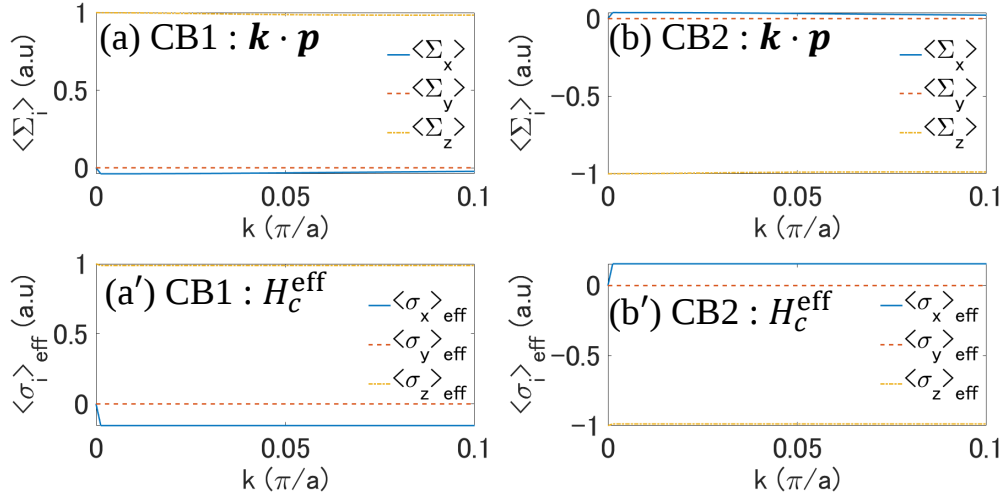


図 4.9 (a,b) スピンの各成分の期待値 $\langle \hat{\Sigma}_x \rangle$, $\langle \hat{\Sigma}_y \rangle$, $\langle \hat{\Sigma}_z \rangle$ で指し示したスピン配向. (a) CB1 と (b) CB2 に関して $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンによるスピン分裂した伝導帯でのスピン配向を示した. (a',b') 有効ハミルトニアン [式 (4.29)] から得た期待値の各成分 $\langle \hat{\sigma}_x \rangle_{\text{eff}}$, $\langle \hat{\sigma}_y \rangle_{\text{eff}}$, $\langle \hat{\sigma}_z \rangle_{\text{eff}}$ を (a') CB1 と (b') CB2 に関して示す. $\mathbf{k}$ などの他の説明は図 4.8 の説明を参照. 図は文献 [47] より引用 (©2022 American Physical Society).

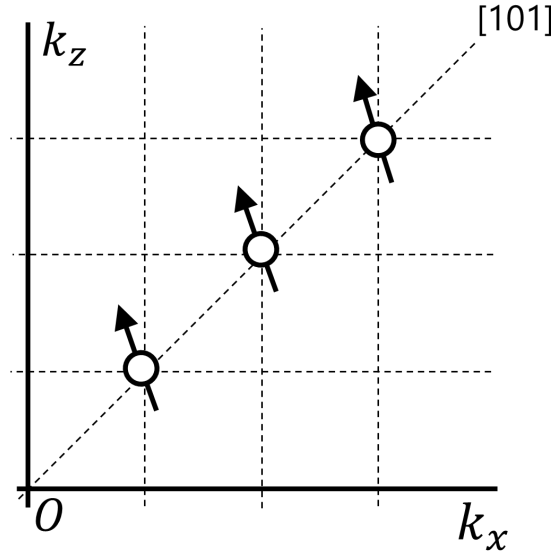


図 4.10 図 4.9 で計算した, CB1 における $k_x k_z$ 平面内スピン配向.

から小さく, この減少は価電子帯の相対論的スピン軌道結合 (Δ_g) が電子スピンを反転させて期待値を低減させるためである [6].

最後に s - d 交換相互作用 A_{s-d} が存在する場合のスピン分裂とスピン配向を提示し, 本質的な点は $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ 近傍を除いて A_{s-d} が無い場合と変わらない. 図 4.11(a) は伝導帯のスピン分裂を, 図 4.11 (b) と (c) は $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンによる $6A_{s-d} = 0.02\text{eV}$ でのスピン配向である. A_{s-d} が存在する場合,

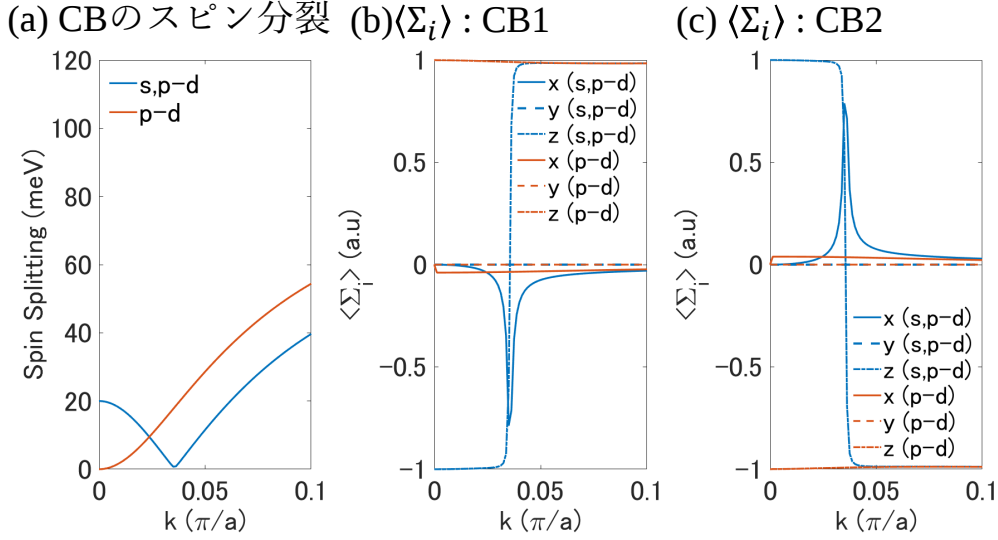


図 4.11 (a) 伝導帯のスピン分裂, (b) 下側のサブバンド CB1 と (c) 上側のサブバンド CB 2 のスピン配向. $6A_{s-d} = 0.02\text{eV}$ を含む s , p - d の青の実線と p - d 交換のみの $A_{s-d} = 0$ を p - d , 赤の実線で示した. 他のパラメータの値や $\mathbf{k}$ の方向は図 4.8 と同一である. 図は文献 [47] より引用 (©2022 American Physical Society).

$k/(\pi/a) \simeq 0.03$ 近傍でスピン分裂が消失し, スピンの期待値 $\langle \hat{\Sigma}_z \rangle$ の z 成分は符号を変える. この挙動は全有効磁場の z 成分の符号反転で説明でき, 負の B_{p-d} [表 4.2] に起因し, k に対して放物線状に増大する $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ の大きさと A_{s-d} が競合するためである. $\langle \hat{\Sigma}_z \rangle$ が符号を変えるとき, 全有効磁場は x 方向を向き, $|\langle \hat{\Sigma}_x \rangle|$ は 1 に近づく. $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ 近傍での s - d 交換による劇的な変化にも関わらず, $k/(\pi/a) = 0.1$ でのスピン分裂とスピン配向は p - d 交換によってほぼ決まっている.

4.4.2 量子井戸での解析

図 4.12(a) は $A_{s-d} = 0$ とし, $B_{p-d} = 0$ と $B_{p-d} \neq 0$ の両方に対して k_x 軸方向でスピン分裂した伝導帯の基底サブバンドを示している. $B_{p-d} = 0$ のバンドには Rashba スピン軌道結合によるスピン分裂が存在するが, $B_{p-d} \neq 0$ の場合に現れる B_{p-d} によるスピン分裂に比べて見えないほど小さい. B_{p-d} によるスピン分裂を図 4.12(b) に示す. そのスピン分裂の増加は k について三次元バルクの図 4.8(c) ように放物線状に増加する.

バルクでのスピン分裂に比べて, 量子井戸でのスピン分裂は面内波数の原点 $k_x = k_y = 0$ でノンゼロである. そのようなゾーン中心に現れるスピン分裂は, 量子力学的な閉じ込め効果によるノンゼロの $\langle \hat{k}_z^2 \rangle$ と p - d 交換相互作用によるスピン依存の有効質量の複合効果が $k_x = k_y = 0$ におけるスピン依存の運動エネルギーとして現れた結果である.

図 4.12(c) では $\langle \hat{\Sigma}_y \rangle$ と $\langle \hat{\Sigma}_z \rangle$ をプロットすることでスピン配向を示す. スピンはバルクでの場合 [図 4.9] のようにほとんど磁化 (z 軸) の方向に向いている. このスピン向きは式 (4.34, 4.35, 4.36) における量子井戸の有効磁場 $\hat{\mathbf{B}}_{\text{eff}}^{\text{QW}}$ から理解できる. $\hat{\mathbf{B}}_{\text{eff}}^{\text{QW}}$ の成分で磁化に平行な成分は B_{p-d} のみによって発生する一方で, 磁化に直交する成分は $\hat{A}$ と $\hat{B}$ を伴い, B_{p-d} に加えて Δ_g を必要とする. そして, $C(z)$ は

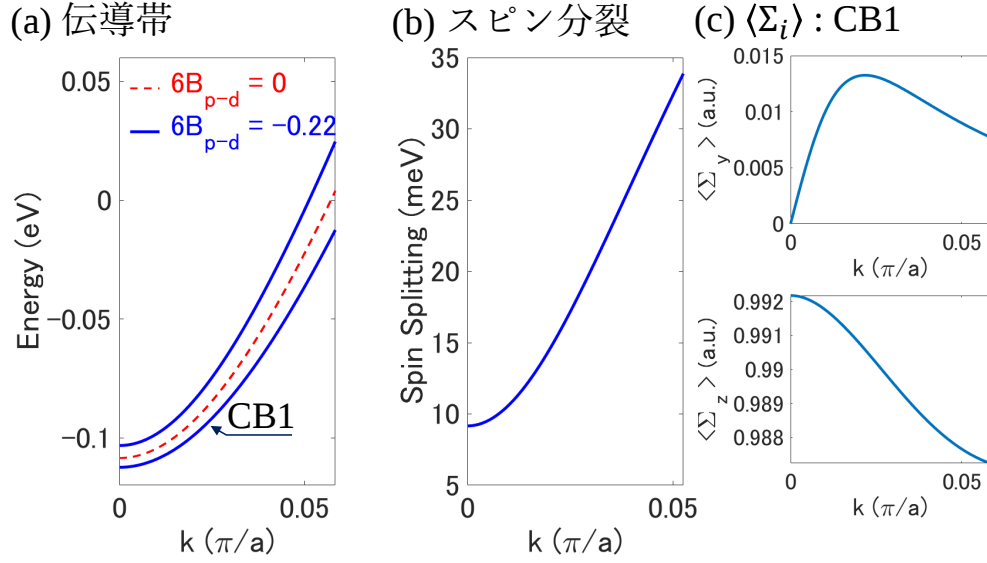


図 4.12 (a) 量子井戸 [図 4.2] でのスピン分裂した伝導帯のサブバンドのうち基底サブバンド. 青実線は $6B_{p-d} = -0.22\text{eV}$, $A_{s-d} = 0$ の場合を示し, スピン分裂を (b) に, 低エネルギー側の CB 1 の固有状態に関するスピンの期待値 $\langle \hat{\Sigma}_y \rangle$, $\langle \hat{\Sigma}_z \rangle$ を (c) に示した ($\langle \hat{\Sigma}_x \rangle$ は 10^{-11} のオーダーの大きさであり, 図では省いた). 波数は $k_x = k_y = 0$ 近傍とし, k_x 方向とした. パラメータの値には表 4.2 の値を用いた. (a) では赤破線で $B_{p-d} = 0, A_{s-d} = 0$ の時の基底サブバンドも示したが, そのスピン分裂は見えないほど小さい. 図は文献 [47] より引用 (©2022 American Physical Society).

Δ_g と空間反転対称性の破れを伴うときにのみ現れうる.

第 5 章

p - d 交換スピン軌道結合の輸送特性 - 異常 Hall 効果

バルクの p - d 有効磁場 $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ [式 (4.30)] を反映した輸送特性例として、本章では内因性異常 Hall 伝導率を提示する。内因性異常 Hall 効果で $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ はその効果に必要な不可欠な二つの役割を果たす [88]。一つ目の役割は伝導電子のスピンを磁化と結合させて時間反転対称性を破る役割、二つ目の役割は伝導電子のスピンと運動量を結びつける役割である。もし n 型強磁性半導体で $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ が存在しない場合、内因性異常 Hall 効果を引き起こすためにはバルクであるための Dresselhaus スピン軌道結合 [5] に加えてよく知られた s - d 交換相互作用が必要である。そこで本章では、 $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ 起源の異常 Hall 伝導率の特性を明示するため、 s - d 交換相互作用と Dresselhaus スピン軌道結合による異常 Hall 伝導率も提示する。また、 p - d 交換による異常 Hall 伝導率の挙動を示したいため、外因性による異常 Hall 伝導率への寄与を考慮しない。なお、付録 F で正確なハミルトニアン [式 (3.9)] と単純化したハミルトニアン [式 (4.3)] による異常 Hall 伝導率を比較し、本質的な変化がないことを確かめている。

5.1 内因性異常 Hall 効果

5.1.1 計算方法と方針

本章で用いる内因性起源の Hall 伝導率は y 方向に DC 電場を印加した際の x 方向に関する伝導率

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar} \sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f_{\text{FD}}(E_{n\mathbf{k}}) B_{n\mathbf{k}}^z, \quad (5.1)$$

$$B_{n\mathbf{k}}^z = i \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle n, \mathbf{k} | \frac{\partial H}{\partial k_x} | m, \mathbf{k} \rangle \langle m, \mathbf{k} | \frac{\partial H}{\partial k_y} | n, \mathbf{k} \rangle}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}})^2} + \text{c.c.},$$

である [導出の詳細は付録 E を参照] [88]。 $B_{n\mathbf{k}}^z$ はハミルトニアン H 、運動量 $\hbar\mathbf{k}$ でエネルギー $E_{n\mathbf{k}}$ を持つ固有状態 $|n, \mathbf{k}\rangle$ の Berry 曲率の z 成分である。 $\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$ による σ_{xy} を計算する際、式 (5.1) の H に $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアン [式 (4.2)] を用いる。理由は、有効ハミルトニアン H_c^{eff} [式 (4.29)] の条件 [式 (4.25)] が満たされない高い鉄濃度の領域近くを調べるためである。

本章では半導体ハミルトニアンを簡単化した式 (4.3) を用いる。付録 F で Hall 伝導率に関して Reduced バンドパラメータなどの効果を取り入れたハミルトニアン [式 (3.9)] と簡単化したハミルトニアン [式 (4.3)] を比較し、本質的な変化がないことを確かめている。

式 (5.1) を用いて s - d と p - d 両方を有する場合、 p - d のみの場合、Dresselhaus スピン軌道結合と s - d 交換を持つ系に対して計算する。両方の交換相互作用を持つ場合と p - d のみを持つ場合で比較すれば、 p - d の伝導率への寄与を抽出できる。さらに従来、異常 Hall 効果は相対論的スピン軌道結合と交換相互作用に起因すると理解されているため [88]、三次元バルクの III-V 族半導体で現れる Dresselhaus スピン軌道結合と交換相互作用 (s - d 交換) の系で Hall 伝導率を計算する。Dresselhaus スピン軌道結合の場合と p - d 交換のみの場合を比較することで交換スピン軌道結合の効果を相対論的スピン軌道結合の効果と比較できる。特に p - d 交換スピン軌道結合は異常 Hall 効果に必須の時間反転対称性の破れとスピン自由度-軌道自由度の結合を同時に与えるため、交換スピン軌道結合は異常 Hall 効果で重要な起源になりうると期待できる。

5.2 Dresselhaus スピン軌道結合による Hall 伝導率

5.2.1 二準位系の Berry 曲率

ハミルトニアンと固有状態

Dresselhaus スピン軌道結合を持つ系で Hall 伝導率を計算するために二準位系の Berry 曲率を導く。対象とする系は

$$H = \varepsilon_k \hat{\sigma}_0 + \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{bmatrix} \varepsilon_k + n_z & n_- \\ n_+ & \varepsilon_k - n_z \end{bmatrix}, \quad n_{\pm} = n_x \pm i n_y, \quad (5.2)$$

の二準位系である。スピンの量子化軸は z 軸である。エネルギー固有値は固有値方程式

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_k + n_z - \lambda & n_- \\ n_+ & \varepsilon_k - n_z - \lambda \end{vmatrix} = [\lambda^2 - 2\varepsilon_k \lambda + (\varepsilon_k^2 - n_z^2)] - n_- n_+ = \lambda^2 - 2\varepsilon_k \lambda + \varepsilon_k^2 - n^2 = 0,$$

より

$$E_{\pm} = \varepsilon_k \pm n, \quad n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2},$$

である。固有ベクトルは

$$|+\rangle = \sqrt{\frac{n + n_z}{2n}} |\uparrow\rangle + \frac{n_+}{\sqrt{2n(n + n_z)}} |\downarrow\rangle \equiv a |\uparrow\rangle + b_+ |\downarrow\rangle, \quad (5.3)$$

$$|-\rangle = -b_- |\uparrow\rangle + a |\downarrow\rangle. \quad (5.4)$$

$$a = \sqrt{\frac{n + n_z}{2n}}, \quad b_{\pm} = \frac{n_{\pm}}{\sqrt{2n(n + n_z)}}, \quad (5.5)$$

である. これらのベクトルは実際にハミルトニアン [式 (5.2)] の固有値方程式

$$\begin{aligned} H|+\rangle &= \begin{bmatrix} \varepsilon_k + n_z & n_- \\ n_+ & \varepsilon_k - n_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{n_+ + n_-}{2n}} \\ \frac{n_+}{\sqrt{2n(n+n_z)}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\varepsilon_k + n_z)\sqrt{\frac{n_+ + n_-}{2n}} + \frac{n_+ n_-}{\sqrt{2n(n+n_z)}} \\ n_+ \sqrt{\frac{n_+ + n_-}{2n}} + (\varepsilon_k - n_z)\frac{n_+}{\sqrt{2n(n+n_z)}} \end{bmatrix}, \\ &= \begin{bmatrix} \left[(\varepsilon_k + n_z) + \frac{n_+ n_-}{n+n_z} \right] \sqrt{\frac{n_+ + n_-}{2n}} \\ \left[n + n_z + (\varepsilon_k - n_z) \right] \frac{n_+}{\sqrt{2n(n+n_z)}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left[\frac{n\varepsilon_k + (\varepsilon_k + n)n_z + n_z^2}{n+n_z} + (n^2 - n_z^2) \right] \sqrt{\frac{n_+ + n_-}{2n}} \\ (\varepsilon_k + n)\frac{n_+}{\sqrt{2n(n+n_z)}} \end{bmatrix}, \\ &= (\varepsilon_k + n)|+\rangle, \end{aligned}$$

と

$$\begin{aligned} H|-\rangle &= \begin{bmatrix} \varepsilon_k + n_z & n_- \\ n_+ & \varepsilon_k - n_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{n_-}{\sqrt{2n(n+n_z)}} \\ \sqrt{\frac{n_+ + n_-}{2n}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(\varepsilon_k + n_z)\frac{n_-}{\sqrt{2n(n+n_z)}} + n_- \sqrt{\frac{n_+ + n_-}{2n}} \\ -\frac{n_+ n_-}{\sqrt{2n(n+n_z)}} + (\varepsilon_k - n_z)\sqrt{\frac{n_+ + n_-}{2n}} \end{bmatrix}, \\ &= \begin{bmatrix} \left[(\varepsilon_k + n_z) - (n + n_z) \right] \frac{-n_-}{\sqrt{2n(n+n_z)}} \\ \left[-\frac{n_+ n_-}{n+n_z} + (\varepsilon_k - n_z) \right] \sqrt{\frac{n_+ + n_-}{2n}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\varepsilon_k - n)\frac{-n_-}{\sqrt{2n(n+n_z)}} \\ \left[\frac{-(n^2 - n_z^2) + [n\varepsilon_k + (\varepsilon_k - n)n_z - n_z^2]}{n+n_z} \right] \sqrt{\frac{n_+ + n_-}{2n}} \end{bmatrix}, \\ &= (\varepsilon_k - n)|-\rangle. \end{aligned}$$

を満たす. さらに規格直交性

$$\begin{aligned} \langle \pm | \pm \rangle &= a^2 + b_+ b_- = \frac{n_+ + n_-}{2n} + \frac{n_+ n_-}{2n(n+n_z)} = \frac{(n+n_z)^2 + (n^2 - n_z^2)}{2n(n+n_z)} = \frac{(n^2 + 2nn_z + n_z^2) + (n^2 - n_z^2)}{2n(n+n_z)} = 1, \\ \langle + | - \rangle &= (a \langle \uparrow | + b_- \langle \downarrow |)(-b_- |\uparrow\rangle + a |\downarrow\rangle) = -ab_- + ab_- = 0. \end{aligned}$$

も満たす.

二準位系の Berry 曲率

Bloch 波数 $\mathbf{k}$ をハミルトニアンのパラメータとして Berry 曲率

$$\mathbf{B}_n = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n, \quad \mathbf{A}_n = i \langle \Psi_n | \nabla_{\mathbf{k}} | \Psi_n \rangle.$$

を変形していく. n はエネルギー固有値の指標など任意の量子数 (の組) であり, $|\Psi_n\rangle$ はその固有ケットである. $\mathbf{A}_n$ を Berry 接続という.

$\langle \Psi_n | \partial_{k_i} \partial_{k_j} \Psi_n \rangle = \langle \Psi_n | \partial_{k_j} \partial_{k_i} \Psi_n \rangle$ を用いて Berry 曲率を

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_n &= (\partial_{k_x} \mathbf{e}_x + \partial_{k_y} \mathbf{e}_y + \partial_{k_z} \mathbf{e}_z) \times i \langle \Psi_n | (\partial_{k_x} \mathbf{e}_x + \partial_{k_y} \mathbf{e}_y + \partial_{k_z} \mathbf{e}_z) | \Psi_n \rangle, \\ &= i (\langle \partial_{k_y} \Psi_n | \partial_{k_z} \Psi_n \rangle - \langle \partial_{k_z} \Psi_n | \partial_{k_y} \Psi_n \rangle) \mathbf{e}_x \\ &\quad + i (\langle \partial_{k_z} \Psi_n | \partial_{k_x} \Psi_n \rangle - \langle \partial_{k_x} \Psi_n | \partial_{k_z} \Psi_n \rangle) \mathbf{e}_y \\ &\quad + i (\langle \partial_{k_x} \Psi_n | \partial_{k_y} \Psi_n \rangle - \langle \partial_{k_y} \Psi_n | \partial_{k_x} \Psi_n \rangle) \mathbf{e}_z, \end{aligned} \tag{5.6}$$

の形に変形できる. $\mathbf{e}_i (i = x, y, z)$ は i 方向の単位ベクトルである. さらに $|\Psi_n\rangle$ に関する完全性を用いて

$$\begin{aligned} & \langle \partial_{k_i} \Psi_n | \partial_{k_j} \Psi_n \rangle - \langle \partial_{k_j} \Psi_n | \partial_{k_i} \Psi_n \rangle, \\ &= \sum_m \langle \partial_{k_i} \Psi_n | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_j} \Psi_n \rangle - \text{c.c}, \\ &= \left[\sum_{m \neq n} \langle \partial_{k_i} \Psi_n | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_j} \Psi_n \rangle - \text{c.c} \right] + [\langle \partial_{k_i} \Psi_n | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \partial_{k_j} \Psi_n \rangle - \text{c.c}], \end{aligned}$$

である. 次に $\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = 1$ であるために

$$\langle \partial_{k_i} \Psi_n | \Psi_n \rangle + \langle \Psi_n | \partial_{k_i} \Psi_n \rangle = 0,$$

なので $\langle \Psi_n | \partial_{k_i} \Psi_n \rangle = ia_i^{(n)}$ が成り立つ. $a_i^{(n)}$ は実数である. この結果を代入して, 先の行列要素の差は

$$\begin{aligned} & \langle \partial_{k_i} \Psi_n | \partial_{k_j} \Psi_n \rangle - \langle \partial_{k_j} \Psi_n | \partial_{k_i} \Psi_n \rangle, \\ &= \left[\sum_{m \neq n} \langle \partial_{k_i} \Psi_n | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_j} \Psi_n \rangle - \text{c.c} \right] + \left[(ia_i^{(n)})^* \cdot ia_j^{(n)} - (ia_j^{(n)})^* \cdot ia_i^{(n)} \right], \\ &= \sum_{m \neq n} (\langle \partial_{k_i} \Psi_n | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_j} \Psi_n \rangle - \langle \partial_{k_j} \Psi_n | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_i} \Psi_n \rangle), \end{aligned} \quad (5.7)$$

である.

最後に $\langle \partial_{k_i} \Psi_n | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_j} \Psi_n \rangle$ を変形する. まず Schrödinger 方程式 $H |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle$ を k_i で微分して, その結果は

$$(\partial_{k_i} H) |\Psi_n\rangle + H |\partial_{k_i} \Psi_n\rangle = (\partial_{k_i} E_n) |\Psi_n\rangle + E_n |\partial_{k_i} \Psi_n\rangle,$$

である. 左から $\langle \Psi_m |$ を $n \neq m, E_m \neq E_n$ のもとでかけて

$$\begin{aligned} \langle \Psi_m | \partial_{k_i} H | \Psi_n \rangle + E_m \langle \Psi_m | \partial_{k_i} \Psi_n \rangle &= E_n \langle \Psi_m | \partial_{k_i} \Psi_n \rangle, \\ \langle \Psi_m | \partial_{k_i} \Psi_n \rangle &= \frac{\langle \Psi_m | \partial_{k_i} H | \Psi_n \rangle}{E_n - E_m}, \end{aligned}$$

を得られる. この表式を式 (5.7) に代入して

$$\begin{aligned} & \sum_{m \neq n} (\langle \partial_{k_i} \Psi_n | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_j} \Psi_n \rangle - \langle \partial_{k_j} \Psi_n | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_i} \Psi_n \rangle), \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Psi_n | \partial_{k_i} H | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_j} H | \Psi_n \rangle - \langle \Psi_n | \partial_{k_j} H | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_i} H | \Psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2}, \end{aligned}$$

最後にこの表現を式 (5.6) へ代入して, $E_n \neq E_m$ のもとでの Berry 曲率の一般的な表現

$$\begin{aligned} B_n &= i \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Psi_n | \partial_{k_y} H | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_z} H | \Psi_n \rangle - \langle \Psi_n | \partial_{k_z} H | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_y} H | \Psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \mathbf{e}_x \\ &+ i \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Psi_n | \partial_{k_z} H | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_x} H | \Psi_n \rangle - \langle \Psi_n | \partial_{k_x} H | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_z} H | \Psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \mathbf{e}_y \\ &+ i \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Psi_n | \partial_{k_x} H | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_y} H | \Psi_n \rangle - \langle \Psi_n | \partial_{k_y} H | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \partial_{k_x} H | \Psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \mathbf{e}_z. \end{aligned}$$

を得られる.

一般的な表現を二準位系 [式 (5.2)] に用いると, Berry 曲率は

$$\begin{aligned}
 B_+ &= i \frac{\langle +|\partial_{k_y} H|-\rangle \langle -|\partial_{k_z} H|+\rangle - \langle +|\partial_{k_z} H|-\rangle \langle -|\partial_{k_y} H|+\rangle}{(E_+ - E_-)^2} e_x \\
 &\quad + i \frac{\langle +|\partial_{k_z} H|-\rangle \langle -|\partial_{k_x} H|+\rangle - \langle +|\partial_{k_x} H|-\rangle \langle -|\partial_{k_z} H|+\rangle}{(E_+ - E_-)^2} e_y \\
 &\quad + i \frac{\langle +|\partial_{k_x} H|-\rangle \langle -|\partial_{k_y} H|+\rangle - \langle +|\partial_{k_y} H|-\rangle \langle -|\partial_{k_x} H|+\rangle}{(E_+ - E_-)^2} e_z, \\
 B_- &= -B_+,
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

である.

Berry 曲率の使いやすい形への変形

この節ではハミルトニアン¹⁾の波数微分

$$\partial_{k_i} H = \partial_{k_i} \varepsilon_k \hat{\sigma}_0 + (\partial_{k_i} \mathbf{n}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad E_+ - E_- = 2n, \quad n'_{ij} \equiv \partial_{k_i} n_j, \tag{5.9}$$

を用いて Berry 曲率を使いやすい形へ変形していく.

Berry 曲率 [式 (5.8)] に現れる各ブラケットを計算するために固有ベクトル [式 (5.3-5.5)] を用いて, ブラケットは

$$\begin{aligned}
 &\langle +|\partial_{k_i} H|-\rangle, \\
 &= (a \langle \uparrow| + b_- \langle \downarrow|) \left(\partial_{k_i} \varepsilon_k \hat{\sigma}_0 + (\partial_{k_i} \mathbf{n}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right) (-b_- |\uparrow\rangle + a |\downarrow\rangle), \\
 &= (a \langle \uparrow| + b_- \langle \downarrow|) (n'_{ix} \hat{\sigma}_x + n'_{iy} \hat{\sigma}_y + n'_{iz} \hat{\sigma}_z) (-b_- |\uparrow\rangle + a |\downarrow\rangle), \\
 &= (a^2 - b_-^2) n'_{ix} - i(a^2 + b_-^2) n'_{iy} - 2ab_- n'_{iz}, \\
 &= \left(\frac{n + n_z}{2n} - \frac{n_x^2 - n_y^2 - 2in_x n_y}{2n(n + n_z)} \right) n'_{ix} - i \left(\frac{n + n_z}{2n} + \frac{n_x^2 - n_y^2 - 2in_x n_y}{2n(n + n_z)} \right) n'_{iy} - \frac{n_-}{n} n'_{iz}, \\
 &\equiv (p_- + iq) n'_{ix} - i(p_+ - iq) n'_{iy} - r_- n'_{iz}, \quad (p_{\pm}, q, r_{\pm}) = \left(\frac{n + n_z}{2n} \pm \frac{n_x^2 - n_y^2}{2n(n + n_z)}, \frac{n_x n_y}{n(n + n_z)}, \frac{n_{\pm}}{n} \right),
 \end{aligned}$$

である. ただし, $r_{\pm}^* = r_{\mp}$, $p_{\pm}^* = p_{\pm}$ である. この結果, ブラケットの積は

$$\begin{aligned}
 &\langle +|\partial_{k_i} H|-\rangle \langle -|\partial_{k_j} H|+\rangle, \\
 &= [(p_- + iq) n'_{ix} - i(p_+ - iq) n'_{iy} - r_- n'_{iz}] [(p_- - iq) n'_{jx} + i(p_+ + iq) n'_{jy} - r_+ n'_{jz}], \\
 &= (p_-^2 + q^2) n'_{ix} n'_{jx} + i(p_- + iq)(p_+ + iq) n'_{ix} n'_{jy} - (p_- + iq) r_+ n'_{ix} n'_{jz} \\
 &\quad - i(p_+ - iq)(p_- - iq) n'_{iy} n'_{jx} + (p_+^2 + q^2) n'_{iy} n'_{jy} + i(p_+ - iq) r_+ n'_{iy} n'_{jz} \\
 &\quad - r_- (p_- - iq) n'_{iz} n'_{jx} - i r_- (p_+ + iq) n'_{iz} n'_{jy} + r_+ r_- n'_{iz} n'_{jz},
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

である. ここで Berry 曲率で $\langle +|\partial_{k_i} H|-\rangle \langle -|\partial_{k_j} H|+\rangle$ が $-c.c$ とともに現れていることから, $\langle +|\partial_{k_i} H|-\rangle \langle -|\partial_{k_j} H|+\rangle$ の虚部さえ計算すればよい. $(p_-^2 + q^2) n'_{ix} n'_{jx}$ といった実数の項は Berry 曲率に現れない.

虚部を与える項の係数を順に計算すると、計算して実数になる項を (Real part) と略記して

$$\begin{aligned}
i(p_- + iq)(p_+ + iq) &= i(p_- p_+ - q^2) - (p_+ + p_-)q, \\
&= i \left[\left(\frac{n + n_z}{2n} \right)^2 - \left(\frac{n_x^2 - n_y^2}{2n(n + n_z)} \right)^2 - \left(\frac{n_x n_y}{n(n + n_z)} \right)^2 \right] + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{(n + n_z)^4 - (n_x^2 - n_y^2)^2 - 4n_x^2 n_y^2}{[2n(n + n_z)]^2} + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{(n + n_z)^4 - (n_x^2 + n_y^2)^2}{[2n(n + n_z)]^2} + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{[(n + n_z)^2 + (n^2 - n_z^2)] [(n + n_z)^2 - (n^2 - n_z^2)]}{[2n(n + n_z)]^2} + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{2n(n + n_z) \cdot 2n_z(n + n_z)}{[2n(n + n_z)]^2} + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{n_z}{n} + (\text{Real part}). \tag{5.11}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(p_- + iq)r_+ &= (p_- + iq) \frac{n_x + in_y}{n}, \\
&= \frac{i(p_- n_y + q n_x)}{n} + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{(n + n_z)^2 - (n_x^2 - n_y^2) + 2n_x^2}{2n^2(n + n_z)} n_y + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{n^2 + 2nn_z + n_z^2 - n_x^2 + n_y^2 + 2n_x^2}{2n^2(n + n_z)} n_y + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{2n(n + n_z)}{2n^2(n + n_z)} n_y + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{n_y}{n} + (\text{Real part}), \tag{5.12}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(p_+ - iq)r_+ &= i(p_+ - iq) \frac{n_x + in_y}{n}, \\
&= i \frac{i(p_+ n_y - q n_x) + p_+ n_x + q n_y}{n}, \\
&= i \frac{p_+ n_x + q n_y}{n} + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{(n + n_z)^2 + (n_x^2 - n_y^2) + 2n_y^2}{2n^2(n + n_z)} n_x + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{n^2 + 2nn_z + n_z^2 + n_x^2 - n_y^2 + 2n_y^2}{2n^2(n + n_z)} n_x + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{2n(n + n_z)}{2n^2(n + n_z)} n_x + (\text{Real part}), \\
&= i \frac{n_x}{n} + (\text{Real part}), \tag{5.13}
\end{aligned}$$

$$-i(p_+ - iq)(p_- - iq) = [i(p_+ + iq)(p_- + iq)]^* = -i\frac{n_z}{n} + (\text{Real part}), \quad (5.14)$$

$$r_-(p_- - iq) = [r_+(p_- + iq)]^* = -i\frac{n_y}{n} + (\text{Real part}), \quad (5.15)$$

$$-ir_-(p_+ + iq) = [ir_+(p_+ - iq)]^* = -i\frac{n_x}{n} + (\text{Real part}), \quad (5.16)$$

である.

式 (5.11-5.16) をブラケット [式 (5.10)] に代入して

$$\begin{aligned} & \langle +|\partial_{k_i} H| - \rangle \langle -|\partial_{k_j} H| + \rangle, \\ &= i\frac{n_z}{n}(n'_{ix}n'_{jy} - n'_{iy}n'_{jx}) + i\frac{n_y}{n}(n'_{iz}n'_{jx} - n'_{ix}n'_{jz}) + i\frac{n_x}{n}(n'_{iy}n'_{jz} - n'_{iz}n'_{jy}) + (\text{Real part}), \\ &= i\frac{\mathbf{n}}{n} \cdot [(\partial_{k_i} \mathbf{n}) \times (\partial_{k_j} \mathbf{n})] + (\text{Real part}), \end{aligned} \quad (5.17)$$

を得られる. 式 (5.17) を式 (5.8) に代入して Berry 曲率は $n \neq 0$ のもとで

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_+ &= \frac{i}{4n^2} \left[2i\frac{\mathbf{n}}{n} \cdot [(\partial_{k_y} \mathbf{n}) \times (\partial_{k_z} \mathbf{n})] \mathbf{e}_x + 2i\frac{\mathbf{n}}{n} \cdot [(\partial_{k_z} \mathbf{n}) \times (\partial_{k_x} \mathbf{n})] \mathbf{e}_y + 2i\frac{\mathbf{n}}{n} \cdot [(\partial_{k_x} \mathbf{n}) \times (\partial_{k_y} \mathbf{n})] \mathbf{e}_z \right], \\ &= \frac{-1}{2n^2} \left[\frac{\mathbf{n}}{n} \cdot [(\partial_{k_y} \mathbf{n}) \times (\partial_{k_z} \mathbf{n})] \mathbf{e}_x + \frac{\mathbf{n}}{n} \cdot [(\partial_{k_z} \mathbf{n}) \times (\partial_{k_x} \mathbf{n})] \mathbf{e}_y + \frac{\mathbf{n}}{n} \cdot [(\partial_{k_x} \mathbf{n}) \times (\partial_{k_y} \mathbf{n})] \mathbf{e}_z \right], \end{aligned}$$

である. 成分をあからさまに書くと

$$(\mathbf{B}_+)_x = \frac{-1}{2n^2} \left[\frac{n_x}{n} (n'_{yy}n'_{zz} - n'_{yz}n'_{zy}) + \frac{n_y}{n} (n'_{yz}n'_{zx} - n'_{yx}n'_{zz}) + \frac{n_z}{n} (n'_{yx}n'_{zy} - n'_{yy}n'_{zx}) \right], \quad (5.18)$$

$$(\mathbf{B}_+)_y = \frac{-1}{2n^2} \left[\frac{n_x}{n} (n'_{zy}n'_{xz} - n'_{zz}n'_{xy}) + \frac{n_y}{n} (n'_{zz}n'_{xx} - n'_{zx}n'_{xz}) + \frac{n_z}{n} (n'_{zx}n'_{xy} - n'_{zy}n'_{xx}) \right], \quad (5.19)$$

$$(\mathbf{B}_+)_z = \frac{-1}{2n^2} \left[\frac{n_x}{n} (n'_{xy}n'_{yz} - n'_{xz}n'_{yy}) + \frac{n_y}{n} (n'_{xz}n'_{yx} - n'_{xx}n'_{yz}) + \frac{n_z}{n} (n'_{xx}n'_{yy} - n'_{xy}n'_{yx}) \right], \quad (5.20)$$

である.

5.2.2 Dresselhaus スピン軌道結合系への適用

n 型強磁性半導体で現れうる内因性異常 Hall 効果として Dresselhaus スピン軌道結合と s - d 交換相互作用による効果が考えられる. そこで, その Hall 伝導率 $\sigma_{xy}^{(D)}$ を計算する. この系のハミルトニアンとエネルギー固有値は

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \mathbf{B}^{(D)} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + 3A_{s-d}\hat{\sigma}_z, \\ B_i^{(D)} &= \gamma_D k_i (k_j^2 - k_k^2), \\ (i, j, k) &= (x, y, z), (y, z, x), (z, x, y), \end{aligned} \quad (5.21)$$

$$\begin{aligned} E_{\pm} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \Delta E_D, \\ \Delta E_D &= \sqrt{\left(B_x^{(D)}\right)^2 + \left(B_y^{(D)}\right)^2 + \left[B_z^{(D)} + 3A_{s-d}\right]^2}, \end{aligned} \quad (5.22)$$

である. m^* は $m_{\parallel\sigma}^*$ と $m_{z\sigma}^*$ [式 (4.32)] で $B_{p-d} = 0$ として得られる伝導帯の有効質量である. γ_D は Dresselhaus スピン軌道結合の係数であり, $\gamma_D = 0.0271 \text{ eV}\cdot\text{nm}^3$ の値を用いる [1].

Dresselhaus 系のハミルトニアンと一般の二準位系の対応は

$$\mathbf{n} = \mathbf{B}^{(D)} + \mathbf{H}, \quad n = \Delta E_D, \quad E_{\pm} = \varepsilon_k \pm n, \quad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}.$$

である. なお見やすさのために s - d 交換の有効的な磁場を一時的に $\mathbf{H}$ と書いた. 以下, 簡単のために $\mathbf{H}$ は z 方向を向いているとし

$$n = \sqrt{\gamma_D^2 k_x^2 (k_y^2 - k_z^2)^2 + \gamma_D^2 k_y^2 (k_z^2 - k_x^2)^2 + [\gamma_D k_z (k_x^2 - k_y^2) + H_z]^2},$$

とする.

Berry 曲率の各成分を計算していく. $B_{+,x}$ に関して式 (5.18) より

$$\begin{aligned} \frac{n_x}{n} (n'_{yy} n'_{zz} - n'_{yz} n'_{zy}) &\propto k_x (k_y^2 - k_z^2) [(k_z^2 - k_x^2)(k_x^2 - k_y^2) - (2k_y k_z)(2k_y k_z)] \propto k_x, \\ \frac{n_y}{n} (n'_{yz} n'_{zx} - n'_{yx} n'_{zz}) &\propto k_y (k_z^2 - k_x^2) [(-2k_y k_z) \cdot (-2k_x k_z) - 2k_x k_y \cdot (k_x^2 - k_y^2)] \propto k_x, \\ \frac{n_z}{n} (n'_{yx} n'_{zy} - n'_{yy} n'_{zx}) &\propto k_z (k_x^2 - k_y^2) [(2k_y k_x) \cdot (2k_y k_z) - (k_z^2 - k_x^2) \cdot (-2k_x k_z)] \propto k_x, \end{aligned}$$

である. $B_{+,y}$ に関して式 (5.19) より

$$\begin{aligned} \frac{n_x}{n} (n'_{zy} n'_{xz} - n'_{zz} n'_{xy}) &\propto k_x (k_y^2 - k_z^2) [(2k_y k_z)(2k_x k_z) - (k_x^2 - k_y^2)(-2k_y k_x)] \propto k_y, \\ \frac{n_y}{n} (n'_{zz} n'_{xx} - n'_{zx} n'_{xz}) &\propto k_y (k_z^2 - k_x^2) [(k_x^2 - k_y^2)(k_y^2 - k_z^2) - (-2k_x k_z) \cdot (2k_x k_z)] \propto k_y, \\ \frac{n_z}{n} (n'_{zx} n'_{xy} - n'_{zy} n'_{xx}) &\propto k_z (k_x^2 - k_y^2) [(-2k_x k_z) \cdot (-2k_x k_y) - (2k_y k_z)(k_y^2 - k_z^2)] \propto k_y, \end{aligned}$$

である. なお $\propto k_x$ などは $\propto k_x \times (k_x$ の偶数次, k_y, k_z による関数) を略記している. 以下においても同様である. $B_{+,x}, B_{+,y}$ はそれぞれ k_x, k_y の奇関数であり, エネルギー固有値は偶関数 ($E_{\pm}(-k_i) = E_{\pm}(k_i)$, $i = x, y$) であるため, 伝導率テンソルで $\sigma_{yz} = \sigma_{zx} = 0$ がいえる. 最後に $B_{+,z}$ に関して式 (5.20) より

$$\begin{aligned} \frac{n_x}{n} (n'_{xy} n'_{yz} - n'_{xz} n'_{yy}) &= \frac{\gamma_D^3}{n} k_x (k_y^2 - k_z^2) [(-2k_x k_y)(-2k_y k_z) - (2k_x k_z)(k_z^2 - k_x^2)], \\ &= \frac{2\gamma_D^3}{n} k_z k_x^2 (k_y^2 - k_z^2) [2k_y^2 - (k_z^2 - k_x^2)], \\ \frac{n_y}{n} (n'_{xz} n'_{yx} - n'_{xx} n'_{yz}) &= \frac{\gamma_D^3}{n} k_y (k_z^2 - k_x^2) [(2k_x k_z)(2k_x k_y) - (k_y^2 - k_z^2)(-2k_y k_z)], \\ &= \frac{2\gamma_D^3}{n} k_z k_y^2 (k_z^2 - k_x^2) [2k_x^2 + (k_y^2 - k_z^2)], \\ \frac{n_z}{n} (n'_{xx} n'_{yy} - n'_{xy} n'_{yx}) &= \frac{\gamma_D k_z (k_x^2 - k_y^2) + H_z}{n} \cdot \gamma_D^2 [(k_y^2 - k_z^2)(k_z^2 - k_x^2) - (-2k_x k_y)(2k_x k_y)], \\ &= \frac{\gamma_D k_z (k_x^2 - k_y^2) + H_z}{n} \cdot \gamma_D^2 [(k_y^2 - k_z^2)(k_z^2 - k_x^2) + 4k_x^2 k_y^2], \end{aligned}$$

である.

$n = \Delta E_D$ であるから, 最終的に Hall 伝導率 [式 (5.1)] は

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{(D)} = & -\frac{e^2}{\hbar} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} (f(E_+) - f(E_-)) \\ & \times \frac{-\gamma_D^2}{2(\Delta E_D)^3} \left\{ 2\gamma_D k_z k_x^2 (k_y^2 - k_z^2) (k_x^2 + 2k_y^2 - k_z^2) \right. \\ & + 2\gamma_D k_z k_y^2 (k_z^2 - k_x^2) (2k_x^2 + k_y^2 - k_z^2) \\ & + [\gamma_D k_z (k_x^2 - k_y^2) + 3A_{s-d}] \\ & \left. \times [(k_y^2 - k_z^2)(k_z^2 - k_x^2) + 4k_x^2 k_y^2] \right\}, \end{aligned} \quad (5.23)$$

である.

5.3 p - d 交換スピン軌道結合による伝導率

Hall 伝導率の一般式 (5.1) をもとの $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンから計算するために波数微分を計算していく. その際, 交換相互作用は波数に依存しないことから半導体のハミルトニアン [式 (4.3)] の波数微分を計算すればよい. それら波数微分は Berry 曲率の z 成分に現れる微分に関して

$$\partial_{k_x} H = \partial_{k_x} H_0, \quad (5.24)$$

$$\partial_{k_x} H_0 = \begin{bmatrix} \partial_{k_x} H_{0c} & \partial_{k_x} H_{0cv} \\ \partial_{k_x} H_{0cv}^\dagger & \partial_{k_x} H_{0v} \end{bmatrix}, \quad (5.25)$$

$$\partial_{k_x} H_{0c} = \begin{bmatrix} \partial_{k_x} E_k^0 & 0 \\ 0 & \partial_{k_x} E_k^0 \end{bmatrix}, \quad \partial_{k_x} E_k^0 = \hbar^2 k_x / m_0 \quad (5.26)$$

$$\partial_{k_x} H_{0v} = \begin{bmatrix} -\partial_{k_x} E_k^0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\partial_{k_x} E_k^0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\partial_{k_x} E_k^0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\partial_{k_x} E_k^0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\partial_{k_x} E_k^0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\partial_{k_x} E_k^0 \end{bmatrix}, \quad (5.27)$$

$$\partial_{k_x} H_{0cv} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}P & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}}P & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}P \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}P & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}P & -\frac{1}{\sqrt{3}}P & 0 \end{bmatrix}, \quad (5.28)$$

と

$$\partial_{k_y} H = \partial_{k_y} H_0, \quad (5.29)$$

$$\partial_{k_y} H_0 = \begin{bmatrix} \partial_{k_y} H_{0c} & \partial_{k_y} H_{0cv} \\ \partial_{k_y} H_{0cv}^\dagger & \partial_{k_y} H_{0v} \end{bmatrix}, \quad (5.30)$$

$$\partial_{k_y} H_{0c} = \begin{bmatrix} \partial_{k_y} E_k^0 & 0 \\ 0 & \partial_{k_y} E_k^0 \end{bmatrix}, \quad \partial_{k_y} E_k^0 = \hbar^2 k_y / m_0 \quad (5.31)$$

$$\partial_{k_y} H_{0v} = \begin{bmatrix} -\partial_{k_y} E_k^0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\partial_{k_y} E_k^0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\partial_{k_y} E_k^0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\partial_{k_y} E_k^0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\partial_{k_y} E_k^0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\partial_{k_y} E_k^0 \end{bmatrix}, \quad (5.32)$$

$$\partial_{k_y} H_{0cv} = \begin{bmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}}P & 0 & \frac{-i}{\sqrt{6}}P & 0 & 0 & \frac{i}{\sqrt{3}}P \\ 0 & -\frac{i}{\sqrt{6}}P & 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}}P & -\frac{i}{\sqrt{3}}P & 0 \end{bmatrix}, \quad (5.33)$$

である.

これら波数微分を用いて Hall 伝導率を計算する方法は

1. $\mathbf{k}$ 点を設定する
2. $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンを対角化して固有エネルギー E_n と固有ケット $|n\rangle$ を得る
3. Berry 曲率の z 成分 $B_{n,z}$ を計算する
4. $B_{n,z}$ の統計平均を計算する

である. バンドパラメータは付録 H の値を用いた.

5.4 計算結果と議論

Γ 点近傍の電子状態による異常 Hall 伝導率に着目するため, 波数空間での積分範囲は 3.5 節で述べたように, $k_i (i = x, y, z)$ 軸方向に $-\pi/a$ から π/a の立方体とする.

図 5.1(a) はゼロ温度, 電子密度 10^{19} cm^{-3} (非磁性の場合に 0.7 eV の Fermi エネルギー ε_F に相当) における Hall 伝導率 σ_{xy} を次の三つの場合で示している. 一つ目の伝導率は n 型強磁性半導体で B_{p-d} と A_{s-d} 両方をともなう $\sigma_{xy}^{(p+s)}$ (青実線), 二つ目の伝導率は B_{p-d} のみの $\sigma_{xy}^{(p)}$ (黒破線), 三つ目の伝導率は Dresselhaus スピン軌道結合と A_{s-d} による $\sigma_{xy}^{(D)}$ (赤実線) である. 図 5.1(a) に示していないが, これら三つの伝導率は小さい x の領域 ($x < 0.5\%$) で増加し, これは伝導電子のスピンと磁化の結合が x とともに増大するためである. しかし, より大きい x の領域で図 5.1(a) ($x > 1\%$) が示すように $\sigma_{xy}^{(D)}$ は x の増加に対して減少し, $\sigma_{xy}^{(p)}$ と $\sigma_{xy}^{(p+s)}$ は増大し続けている.

$\sigma_{xy}^{(D)}$ の減少は伝導帯のスピン分裂 ΔE_D が A_{s-d} [式 (5.22)] の x に対する線形的な増加するためである. 実際, $f(E_+) - f(E_-) \approx 1$ である $\mathbf{k}$ 空間の領域が A_{s-d} とともに増加することを考慮しても, 式 (5.23) が示すように $|\mathbf{B}^{(D)}| \ll 3A_{s-d} \ll \varepsilon_F$ の時に $\sigma_{xy}^{(D)}$ は $(A_{s-d})^{-1}$ 依存性に漸近する.

一方で $\sigma_{xy}^{(p)}$ と $\sigma_{xy}^{(p+s)}$ の一方的な増加は伝導帯と価電子帯のエネルギー差の減少から説明できる. 図 5.1(b) は $x = 10\%$ で, $\mathbf{k} = 0$ 近傍におけるバンド構造を示しており, そのような比較的高い鉄濃度の

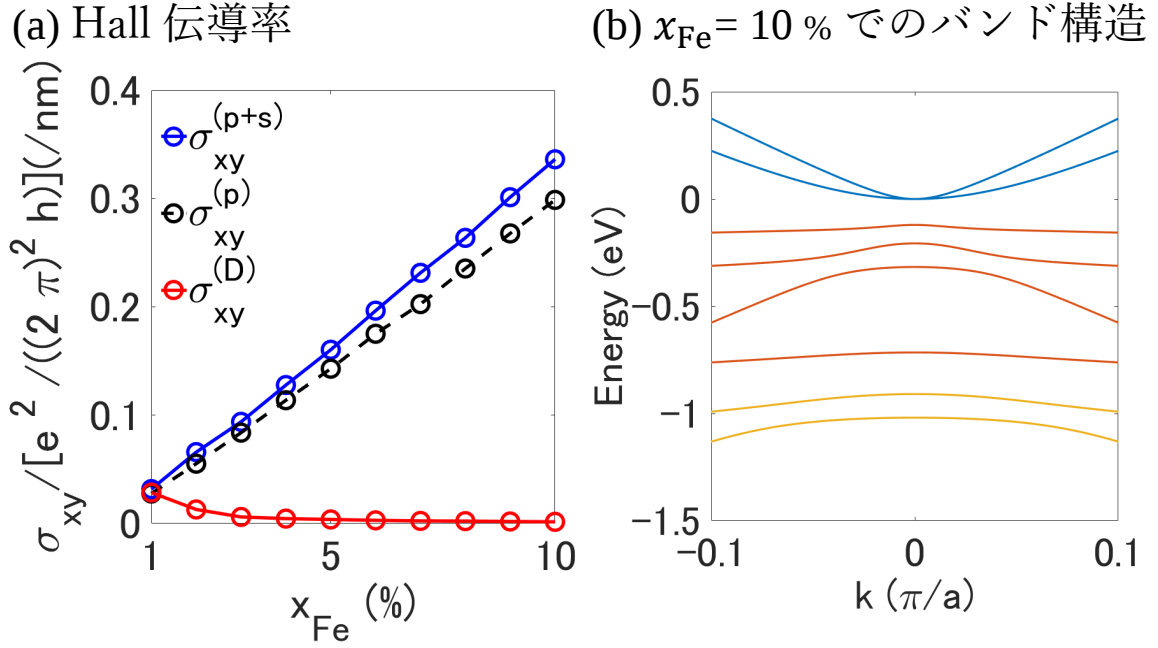


図 5.1 (a) n 型強磁性半導体で p - d と s - d 両方を伴った内因性異常 Hall 伝導率 $\sigma_{xy}^{(p+s)}$ (青実線), p - d 交換相互作用のみによる Hall 伝導率 $\sigma_{xy}^{(p)}$ (黒破線), そして s - d 交換と Dresselhaus スピン軌道結合による Hall 伝導率 $\sigma_{xy}^{(D)}$ (赤実線) である. (b) InFeAs, $x = 10\%$, $[101]$ 方向で p - d 交換を伴ったエネルギーバンド. 図は文献 [47] より引用 (©2022 American Physical Society).

B_{p-d} によるスピン分裂でバンドギャップが狭まっている様子が見て取れる. σ_{xy} の表式 (5.1) に従うと, そのようなエネルギーギャップの減少が σ_{xy} のエネルギー分母で効き, 図 5.1(a) に示される大きい x での $\sigma_{xy}^{(p)}$ と $\sigma_{xy}^{(p+s)}$ の増加に帰結する.

この増加は p - d 交換スピン軌道結合の有効磁場 [式 (4.30)] から理解できる. 有効磁場が Hall 伝導率に重要な寄与をなし, その磁場はバンドギャップ [図 2.1] をまたいで現れるためにギャップの減少とともに大きくなる. 結果, ギャップを縮める鉄濃度の増加は Hall 伝導率を大きくする.

第 6 章

p - d 交換スピン軌道結合の熱力学的特性 - Curie 温度

本章では n 型強磁性半導体の熱力学的性質, 特に p - d 交換とバンド間遷移による複合過程 (p - d 交換スピン軌道結合) による磁気的な相転移, Curie 温度 T_c に着目して議論する. T_c の解析方法を議論したのちに代表的な物質例として InFeAs と InFeSb を取り上げる. 本理論は Bloch 電子の介在する交換相互作用のみ考慮するため, T_c の更なる一致を目指すなら 3.6 節で述べた無視した効果 (キャリア間 Coulomb 相互作用, 局在スピンとの交換相互作用以外の不純物ポテンシャル, 考慮した伝導帯以外の伝導帯, 超交換相互作用など他の機構の交換相互作用など) を取り入れる必要があると考えられる.

6.1 Curie 温度の解析方法とハミルトニアン

6.1.1 解析方法

Curie 温度 T_c の解析方法は 3.5 節に記した自己無撞着な局在スピン偏極 $\langle \hat{S} \rangle$ の決定方法に従う. その手順は

1. 物質パラメータ [付録 H], 局在スピン偏極 $\langle \hat{S} \rangle$ の向きを決める
2. 局在スピン偏極の大きさ $|\langle \hat{S} \rangle|$ の予測値を設定する
3. Schrödinger 方程式 [式 (3.16)] を解いてキャリアのバンド構造と固有ベクトルを得る
4. キャリアスピン偏極密度を計算する [式 (3.21) もしくは (3.22)]
5. 局在スピン偏極の状態方程式 [式 (3.20)] にキャリアスピン偏極密度を代入して, 新たに $|\langle \hat{S} \rangle|$ を得る
6. 予測値として用いた 2 の $|\langle \hat{S} \rangle|$ と 5 で得た $|\langle \hat{S} \rangle|$ を比較する.
7. 収束していれば, 次の温度に移り, 新たに得た $|\langle \hat{S} \rangle|$ をその次の温度での初期予測値とする. 収束していなければ, $|\langle \hat{S} \rangle|$ を更新して 2 から収束まで繰り返す

である. なお化学ポテンシャルが伝導帯を横切る金属の場合は 3.4 節で議論したように, 化学ポテンシャルを母体半導体の伝導帯における有効質量を持つ電子ガスモデルで近似する [式 (3.15)]. そして, 各温度

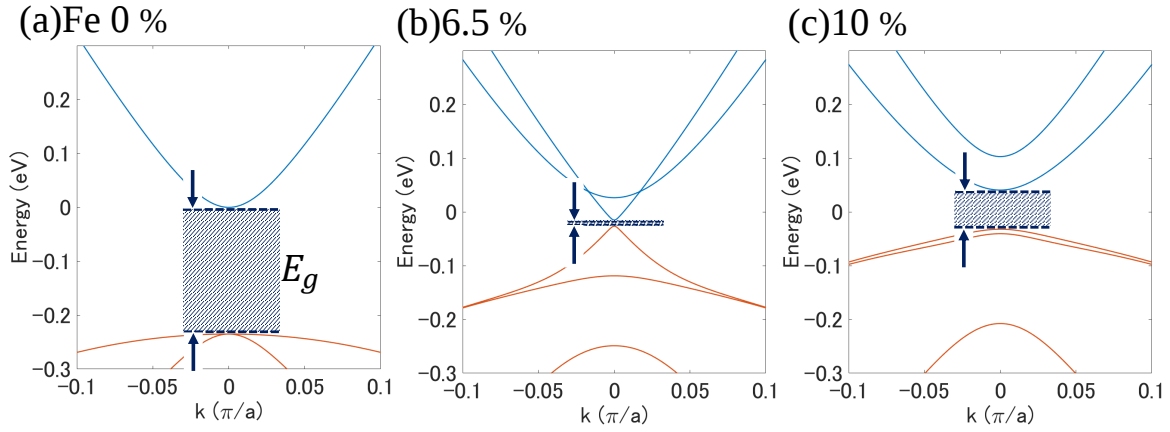


図 6.1 鉄濃度 (a) 0, (b) 6.5, (c) 10% での InFeSb のエネルギーバンド. $\mathbf{k}$ は母体半導体の $[100]$ 方向に平行であり, a は母体半導体の格子定数である. またエネルギーギャップ E_g と s, p - d 交換による変化の様子を網掛けの領域で強調した. (a) 母体半導体はゾーン中心に E_g のギャップを持つ. (b) 鉄濃度 6.5% で s, p - d 交換によりギャップが閉じる. (c) 閉じたギャップはバンド反転で再び開く. 図では簡単さのため, スピン縮退もしくはスピン分裂した CB, HH, LH のみをプロットした.

で局在スピン偏極 $\langle \hat{S} \rangle$ を決定し, $|\langle \hat{S} \rangle|$ が十分小さくなった温度を T_c の近似値とする. このようにして各鉄濃度や電子密度で T_c を求め, p - d 交換スピン軌道結合の熱力学的性質を解析する.

以下, 簡単さのために $\langle \hat{S} \rangle$ の向きを母体半導体の $[001]$ 方向に固定した. その向きを変えても大きさ $|\langle \hat{S} \rangle|$ に変化がない事を確かめた.

6.1.2 ハミルトニアン

本章のハミルトニアンは有効ハミルトニアン [式 (4.29)] でなく $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアン [式 (3.16)] であり, 母体半導体のハミルトニアンは Remote バンドパラメータなどを含めた精密なハミルトニアンである [式 (3.9)].

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンを用いる理由は, たとえ Γ 点のエネルギーギャップ E_g [図 6.1 (a)] が s, p - d 交換相互作用によって潰れ, 有効ハミルトニアンが適用可能でなくなったとしても, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアン [式 (3.1)] は適用可能であるためである. 図 6.1 (a), (b), (c) それぞれに鉄濃度 0, 6.5, 10 % における InFeSb のエネルギーバンドを示す. Γ 点におけるエネルギーギャップは鉄濃度とともに s, p - d 交換相互作用によって小さくなり, 6.5 % で閉じる [図 6.1 (b)]. こういった領域で有効ハミルトニアンは明らかに適用可能でない. そして, 鉄濃度をさらに高くするとバンド反転によって再びギャップが開く [図 6.1 (c)].

Remote バンドパラメータを取り入れる理由は, それらのパラメータを取り入れないと 6.2.1 節で議論するように T_c が現実的な値でなくなるためである.

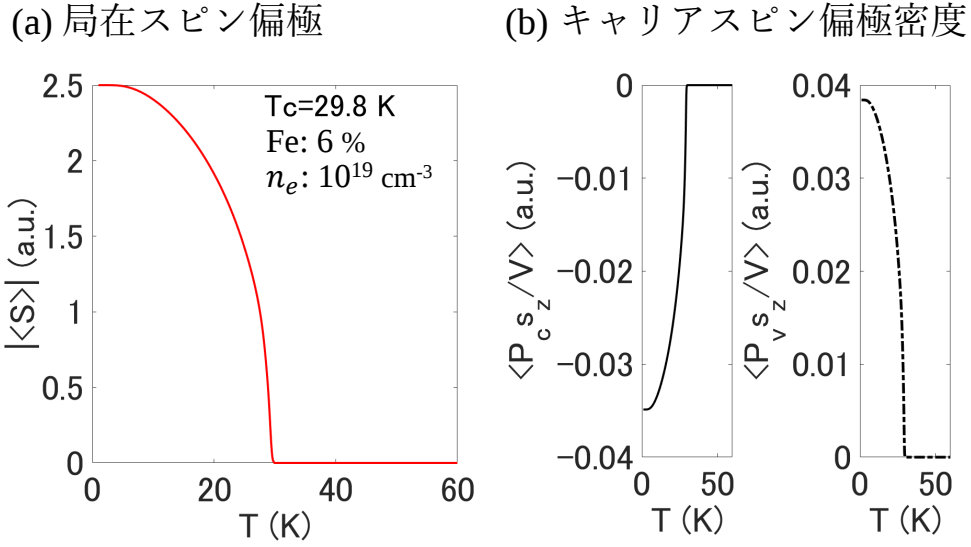


図 6.2 (a) InFeAs の鉄濃度 6%, 実験で典型的な電子密度 $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ における局在スピン偏極の大きさ $|\langle \hat{S} \rangle|$ の温度依存性. スピン偏極の向きは母体半導体の [001] 方向とした. 縦軸が $|\langle \hat{S} \rangle|$ を, 横軸が温度を表す. $|\langle \hat{S} \rangle|$ が十分小さくなった温度で Curie 温度 $T_c = 29.8$ K を求められる. (b) 伝導帯 (左パネル), 価電子帯 (右パネル) のバンド端表現によるキャリアスピン偏極密度の z 成分 [式 (3.21)] を表す. $\langle \hat{S} \rangle$ を z 方向に設定しているため, キャリアスピン偏極密度の x, y 成分はゼロであり, 図では省いた.

6.2 InFeAs

代表的な物質として InFeAs を取り上げる. まず実際の T_c の抽出方法を示し, その後に T_c の鉄濃度, 電子密度依存性を議論する.

6.2.1 局在スピンとキャリアスピンのスピン偏極, Curie 温度の鉄濃度依存性

図 6.2 (a) は, 実験的に典型的な鉄濃度 6%, 電子密度 $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ [49, 55] における局在スピン偏極の大きさ $|\langle \hat{S} \rangle|$ を示したものである. 方向は母体半導体の [001] 方向とした. 低温 (1 ケルビン) で飽和値から, $|\langle \hat{S} \rangle|$ は温度とともに減少し, ある点で十分小さいと見なせる. $|\langle \hat{S} \rangle|$ が十分小さくなる温度を Curie 温度 T_c の近似値とする.

図 6.2 (b) は伝導帯のバンド端表現 (左パネル) と価電子帯のバンド端表現 (右パネル) の両方でのスピン偏極密度 [式 (3.21)] の z 成分を示している. z 成分は Curie 温度以下でノンゼロであり, [100], [010] 方向に平行な x, y 成分は, $\langle \hat{S} \rangle$ を z 方向に設定したためにゼロである. $\langle \hat{S} \rangle$ を他の方向に設定した際, キャリアスピン偏極密度がその方向に追従し, T_c と $|\langle \hat{S} \rangle|$ で変化は見られなかった.

図 6.3 は T_c の鉄濃度 x_{Fe} 依存性を示している. 電子密度は実験で典型的な 10^{19} cm^{-3} とした. 黒いマーカーは同じ電子密度と推定された系での実験値である [55]. 赤い円が本研究での計算結果であり, 見やすさのために赤実線で結んだ. T_c の計算値は x_{Fe} に線形に依存しており, この比例関係は平均場理論

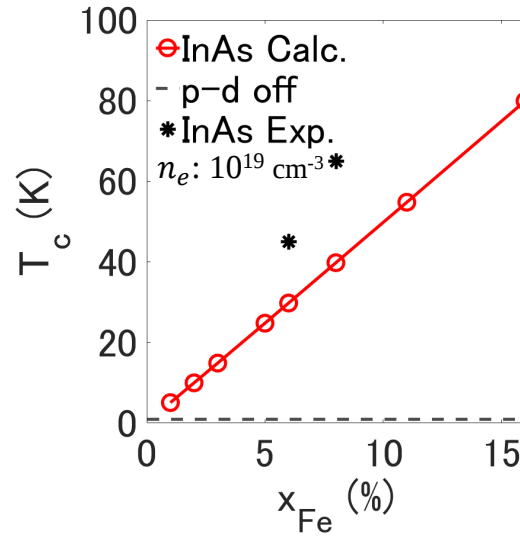


図 6.3 実験で典型的な電子密度 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ の InFeAs における Curie 温度 T_c の鉄濃度 x_{Fe} 依存性. 黒いマーカーは実験値 [55] である. 赤い円は本理論による T_c の理論値であり, 見やすさのために赤い実線で結んだ. 1 ケルビンに引かれた黒破線は p - d 交換のない T_c である. なお注意として実験 [55] で電子密度は測定されていないが, 典型的にドナー密度と同程度のオーダーであることから, その文献は電子密度を $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ と推定している.

[60, 61, 63] の特徴の一つである [式 (L.2)]. さらに赤の T_c の理論値は実験と同一のオーダーであり, 十分合致しているとみなせる. なお注意として実験 [55] で電子密度の正確な値は測定されていない. しかし, 典型的にドナー密度と同程度の電子密度であることから文献 [55] においても 10^{19} cm^{-3} の電子密度と推定されており, さらに強磁性の発生する電子密度 [図 6.4] のオーダーとも一貫している.

図 6.3 の黒破線は p - d 交換のない場合であり, T_c が 1 ケルビン以下であることを確認している. この劇的な T_c の減少はトンネル分光 [55] で測定された s - d 交換のみと平均場理論による見積りの結果と一貫している. 以上から, p - d 交換相互作用は n 型強磁性半導体の T_c に必須要素の一つである.

さらに, もし Remote バンドの効果を無視した場合 ($\gamma'_1 = -1, \gamma'_2 = \gamma'_3 = 0, B' = 0$), T_c の本理論による値は鉄 1% で 127 ケルビンにも到達してしまう. この T_c の値は現実的ではない. 実際, 鉄 6% での T_c の測定値は 42 ケルビンであるからである. それゆえに, Remote バンドの効果も T_c を説明するために必要である.

6.2.2 Curie 温度の電子密度依存性

T_c の電子密度 n_e 依存性は実験で InFeAs の鉄濃度 5% に対して調べられており, $n_e = 0.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ で T_c の急激な立ち上がりが観測されている [49]. この挙動はドーピングされた半導体で典型的に起こる金属絶縁体転移であると考えられる [78]. 一定のドーピング濃度以下では不純物ポテンシャルによる乱れと電子相関によって, 電子状態がバンドを形成する Bloch 状態から局在状態へ転移する. 一方で本理論では局在スピンとの交換相互作用以外の不純物ポテンシャルを無視して Bloch 状態を仮定し, 電子間相互作用は平均場的にバンドパラメータに繰り込まれて取り扱われていると見なせる. そのため, 局在状

態を取り扱ことはできず、実験と比較可能な n_e 依存性の範囲に金属絶縁体転移による下限が存在する。例えば、鉄 5% の InFeAs なら電子密度 $0.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ あたりが下限である。

さらに適用範囲には考慮していない他の伝導帯による上限も存在する。本理論は Γ 点にバンド端を持つバンドのみを考慮している。しかし、比較的高い電子密度で他の伝導帯も Fermi エネルギーが横切る。InAs であれば、二番目に低い伝導帯は L 点にバンド端を持つ伝導帯であり、 L 点の伝導帯の端は Γ 点の伝導帯の端から 0.71 eV 高いエネルギー位置にある [67, 75]。 Γ 点の伝導帯の有効質量を持った Fermi ガスモデルから Fermi エネルギーを見積もると [式 (3.15)], 電子密度 $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ あたりで Fermi エネルギーは L 点の伝導帯を横切り始める。

上記の議論から、本理論の電子密度依存性で実験と比較可能な範囲が明らかとなり、その範囲は鉄濃度 5% の InFeAs で $0.7 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ から $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ である。

図 6.4 は本理論で計算された T_c の電子密度依存性である。 T_c は電子密度に対してほとんど変わらず、本理論での T_c は小さい電子密度依存性を持つとわかる。この小さい電子密度依存性は Fermi 面の位置に敏感であるキャリア媒介型の強磁性と対照的である。実際、本モデルでの強磁性は p - d 交換スピン軌道結合 (p - d 交換相互作用とバンド間遷移) に起源を持つため、Fermi 面が伝導帯に交差している必要はない。 T_c の解析式 [式 (L.2)] で述べると、バンド間励起の項がバンド内励起の項よりも支配的であるために Fermi 面での状態密度が重要でなくなり、考慮した範囲の電子密度に対して T_c は一定といえる。

図 6.4 の水平方向の両矢印は適用範囲を示し、垂直な破線はその下限を示す。その適用範囲の T_c の理論値は実験値と同じオーダーである。金属絶縁体転移の電子密度 $0.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ より低い領域で T_c の実験値と理論値は乖離する。この乖離は本理論で考慮していない不純物ポテンシャルと電子相関による局在状態の形成が原因と考えられる。局在状態を解析するためには交換相互作用以外の不純物ポテンシャルと電子相関を取り入れて Anderson 局在 [76] や Mott 転移 [77] を調べる必要があると予想される。

最後に本節では、式 (3.21) の化学ポテンシャル μ を調節し、 T_c に対する $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ モデルの挙動を理解する。 n 型強磁性半導体と鉄濃度は電子密度依存性の系と同一の鉄濃度 5% の InFeAs である。図 6.5 に μ 全域 [図 6.5 (a)] と μ がバルクギャップ中から伝導帯にかけての特定の領域における T_c を示す [図 6.5 (b)]。

図 6.5 (a) で μ 依存性を見る範囲を (a1-a3) の領域に分けた。 (a1) と (a3) の外側では、それぞれの領域で考慮したバンド全てが非占有か占有されている。そのため、 T_c は (a1) と (a3) の外側でゼロである。 (a1) で μ が価電子帯 (HH, LH, SO [図 2.2 (b)]) と交差し、 $\mu = -5 \text{ eV}$ で HH, LH と交差した結果、比較的大きい状態密度のために T_c の解析式 [式 (L.2)] のバンド内励起項が支配的となり 100 ケルビン以上の T_c を得られる。この大きい T_c は (III, Mn) As [61] のような p 型のマンガンドープの強磁性半導体の T_c と同程度である。結果、対象としているモデルは仮想的に p 型の強磁性半導体である。 (a2) と (a3) で μ がそれぞれバンドギャップ中にある状況、伝導帯と交差している状況である。

図 6.5 (b) は図 6.5 (a) の (a2-a3) 領域の拡大図である。 T_c は (a2) 領域で 25 ケルビンほどある。 μ がバンドギャップ中にあるため、この強磁性発生は、その起源が p - d 交換とバンド間遷移にあることと一貫している。同様のバンド絶縁強磁性は量子異常 Hall 系で現れており、スピン帯磁率がバンド絶縁体の時にノンゼロとなるために現れる [89]。 (a3) で μ は伝導帯と交差し、 T_c は伝導帯の完全な占有状態に向かうにつれて減少する。

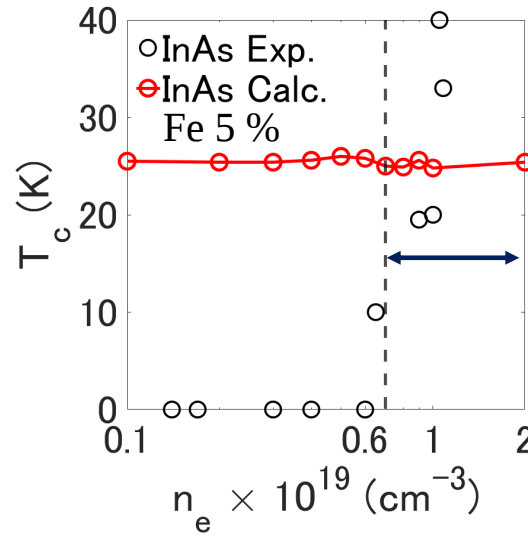


図 6.4 鉄濃度 5% の InFeAs の Curie 温度 T_c における電子密度 n_e 依存性. 黒い円は T_c の実験値 [49] を, 赤い円は本理論による計算値である. 水平方向の両矢印と垂直な破線は本理論の適用範囲および下限を指し示している. 適用範囲の下限は本理論で取り扱えない局在化した電子状態の出現に, 上限は本理論で考慮していない他の伝導帯の出現に対応している.

6.3 InFeSb の Curie 温度と母体半導体依存性

さらに InFeSb の Curie 温度 T_c も解析し, 母体半導体依存性を考察する. 実際, 実験は InFeAs より高い T_c を InFeSb で観測している [57, 59]. 図 6.6 (a) は T_c の計算値であり, InFeSb に対して青の円と実線で鉄濃度の線形的な依存性が見て取れる. これらの理論値は図 6.6 (a) で 10% 程度までの低い鉄濃度領域の黒マーカーで記された実験値と同じオーダーである. それより高い鉄濃度領域における不一致は超交換相互作用など本理論で考慮していない機構による乖離と考えられる. ゆえに, InFeSb においても平均場理論は強磁性を低鉄濃度領域で説明できている. InFeAs と同様に価電子帯の p - d 交換相互作用を落とすと T_c は 1 ケルビンを下回り, InFeSb の T_c においても p - d 交換が本質的な要素の一つである.

引用した実験 [57, 59] で電子密度は $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ のオーダーと推測されており, 本計算で設定した $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ と異なる. しかし, 本理論の T_c は図 6.4 で議論した通り Fermi エネルギーを伝導帯と交差させる範囲でほとんど変化しない. そのため, 本計算では $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ に固定した.

図 6.6 (a) では図 6.3 の InFeAs における T_c の計算値も載せており, T_c の母体半導体依存性を明瞭に示している. InFeSb の T_c の計算値は InFeAs の T_c に対して高く, この母体半導体依存性は実験 [49, 55, 57, 59] と一貫している.

InFeSb と InFeAs の T_c の違いは交換相互作用の大きさの違いではなく, 主に母体半導体のバンド構造の違いによる. InFeSb の s - d , p - d 交換相互作用は InFeAs のそれらに比べてわずかにしか異ならず, 平均場理論による T_c は p - d 交換の二乗に比例することから [60, 61, 63] [式 (L.2)], 本計算で見られた T_c の違いを生み出さない.

p - d 交換スピン軌道結合の発生機構にバンド間遷移が含まれているため, バンド構造の重要な因子は Γ

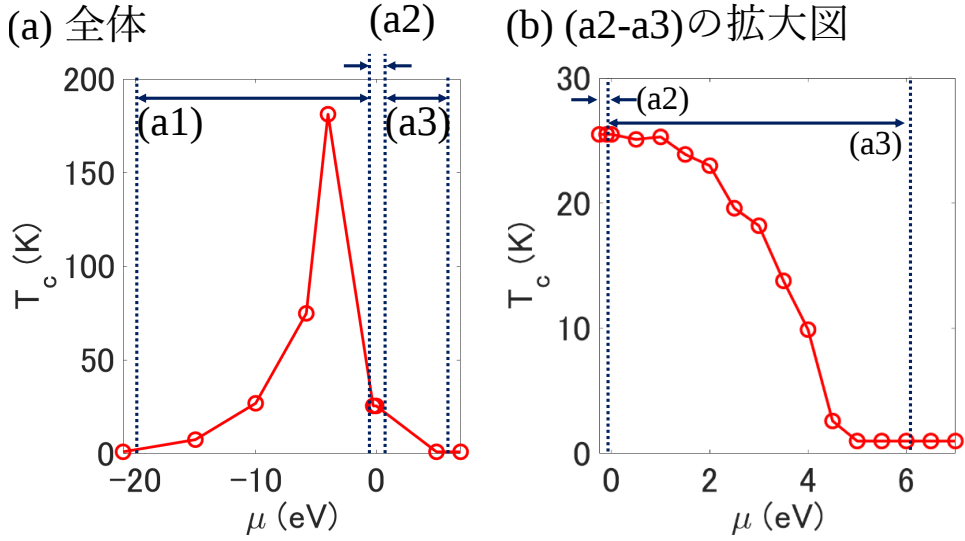


図 6.5 化学ポテンシャル μ に対する T_c の依存性. 対象とする系は電子密度依存性の系と同一である. (a) は T_c の μ 依存性全体の図であり, (a1-a3) の領域に分けている. μ は (a1) で価電子帯, (a3) で伝導帯と交差し, (a2) でバンドギャップ中に存在する. (b) は (a2-a3) 領域の拡大図である.

点における母体半導体のエネルギーギャップ E_g である. 正確に述べると, p - d 交換スピン軌道結合の有効磁場はバンドパラメータとして E_g と Kane の行列要素 P を含み [式 (4.30)], P は E_g ほど半導体間で変動しないため一定と見なせ [1, 80], E_g が重要なバンドパラメータであるとわかる.

T_c の増大する様を T_c の解析式 [式 (L.2)] と p - d 交換スピン軌道結合の解析式 [式 (4.29)] の両方から考察できる. T_c の解析式 [式 (L.2)] によると, T_c は帯磁率に比例し, その帯磁率はバンド内励起の項とバンド間遷移の項からなる. バンド間遷移の項はエネルギー分母に E_g をもつため, E_g の減少とともに増大する. その帯磁率の増加が母体半導体依存性で見られた T_c の増加として現れる. このようにして T_c の解析式から母体半導体依存性が理解できる. p - d 交換スピン軌道結合の解析式 [式 (4.29)] による理解は次のようにして得られる. p - d 交換スピン軌道結合の有効ハミルトニアンは E_g を最も大きいエネルギースケールと仮定した際, バンド間遷移によって E_g^{-1} を最低次に持つ. それゆえに InSb のような比較的狭いギャップの母体半導体で InAs と比べ, p - d 交換が価電子帯のみならず伝導帯にも強く現れ, 伝導帯と価電子帯全体で強いスピン偏極をもたらし, T_c が増加する.

先の母体半導体依存性の議論から T_c においてバンドギャップ E_g が重要なパラメータの一つであると判明した. この振る舞いを定量的に調べるため, 仮想的に E_g の変化した InFeAs (Fe 5%) での T_c を図 6.6 (b) に示した. 化学ポテンシャル μ は伝導帯と交差する必要がないため, 計算の際に電子数の固定しやすい InFeAs のバンドギャップ中に μ を固定した. 図 6.6 (b) が示す通り, E_g を減少させると T_c は増加しており, この挙動から p - d 交換とバンド間遷移の機構から成る T_c では E_g が本質的な要素であると確認できる.

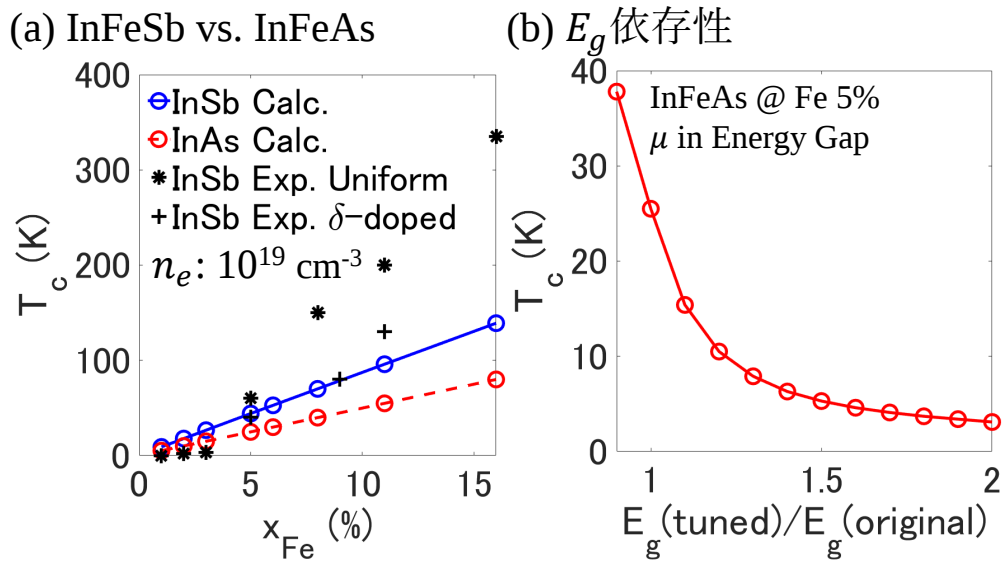


図 6.6 (a) 電子密度 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ の InFeSb における Curie 温度 T_c の鉄濃度 x_{Fe} 依存性. 二種類の黒いマーカーはそれぞれ鉄の一般的なドーピングを施した系 [57], δ -ドーピングの系 [59] での T_c の実験値である. 青い円は本理論による T_c の理論値であり, 見やすさのために実線で結んだ. また, 母体半導体依存性を見やすくするために図 6.3 の InFeAs に関する T_c を再掲した. (b) InFeAs (Fe 5%) の母体半導体のエネルギーギャップ E_g に対する T_c の依存性. 電子数を理論的に容易に固定できるため μ は InFeAs のバルクのギャップ中に固定している. 横軸は調整後の E_g [$E_g(\text{tuned})$] と元の E_g [$E_g(\text{original})$] の比である. (a) は定性的, (b) は定量的に, E_g が T_c の母体半導体依存性において重要なバンドパラメータであることを示している.

第 7 章

まとめと展望

本論文は $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法に基づいて相対論的起源と交換相互作用起源の両方を同時に扱える統一的なスピン軌道結合を提案し [2 章], 交換スピン軌道結合が研究されてきた従来の反強磁性体と異なる磁気秩序である n 型強磁性半導体にその機構を適用することにより, 新規の交換スピン軌道結合を見出し, その基礎物性を明らかにした. 平均場近似等を反映させた多バンド $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンの特定期間から始め [3 章], 価電子帯の p - d 交換相互作用に誘起される p - d 交換スピン軌道結合を電子構造 (バンド構造, スピン分裂, スピン構造) から示し [4 章], そのスピン軌道結合に特徴的な基礎物性として内因性異常 Hall 効果 [5 章], 強磁性相の安定化 [6 章] を提示した.

まず 2 章では $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法に特徴的な $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移, 着目したバンド以外でのスピン依存相互作用による複合効果としてスピン軌道結合を統一的に定式化した [図 2.1 または図 2.2 (b1-b3)]. さらに, この機構を価電子帯に p - d 交換相互作用のある n 型強磁性半導体に適用した [図 2.2]. n 型強磁性半導体を選択した理由は二点あり, 一点目は交換スピン軌道結合の普遍性を示すために従来研究されてきた反強磁性体と異なる磁性体であるためである. 二点目は p - d 交換スピン軌道結合が Fermi エネルギーの横切る伝導帯と異なる価電子帯の, 空間的に一様な交換相互作用に起源を持ち, 非自明であるためである [2.2.2 節].

次に 2 章で提案した機構を解析するために, n 型強磁性半導体の電子構造と基礎物性解明に用いるハミルトニアンを平均場近似等 [3.6 節] で構築した [3 章]. ハミルトニアンで半導体のハミルトニアンと局在スピンとの交換相互作用から始め [3.1 節], 多バンドの半導体のハミルトニアン [3.2 節], 交換相互作用を導き [3.3 節], 化学ポテンシャルの設定 [3.4 節] と合わせて強磁性秩序の自己無撞着方程式を決定した [3.5 節].

続いて 3 章で導いたハミルトニアンを解析のしやすさのために簡単化し, p - d 交換スピン軌道結合による電子構造を解析した [4 章]. 対称性解析と摂動論それぞれによる有効ハミルトニアンの導出 [4.3 節] と元の多バンドハミルトニアンの数値的な対角化を行い, p - d 交換スピン軌道結合を定性的, 定量的に n 型強磁性半導体の三次元バルクと量子井戸の両方で調べた [4.4 節]. p - d 交換スピン軌道結合の有効磁場は母体半導体のエネルギーギャップ E_g に関して最低次 E_g^{-1} であり, ギャップが狭いほど強くなると判明した. さらに波数依存性は Rashba スピン軌道結合や Dresselhaus スピン軌道結合と異なり, 最低次として二次から始まり, スピン分裂は放物線状に増加し, その大きさは典型的な電子密度での Fermi 波数に等しい波数で数十 meV にも到達する. [三次元バルク: 図 4.8, 量子井戸: 図 4.12 (a,b)]. この大きさは III-V 族半導体での相対論的スピン軌道結合の 10 倍以上の大きさである. 同時に有効ハミルトニアンから

予想されたスピン配向は多バンドハミルトニアンでの数値計算で確かめられ, p - d 交換スピン軌道結合の電子構造が明らかとなった [三次元バルク: 図 4.9 と図 4.11 (b,c), 量子井戸: 図 4.12 (c)].

次に明らかにした電子構造を用いて 5 章で輸送特性, 特に内因性異常 Hall 効果を調べた. 従来の内因性異常 Hall 効果の理解に基づくと, 必須要素は二点あり, スピンと軌道自由度の結合および磁気秩序との交換相互作用である. その必須要素から, 従来の理解に基づくと n 型強磁性半導体での内因性異常 Hall 効果は三次元バルクなら Dresselhaus スピン軌道結合と伝導帯の s - d 交換に起因すると予想される. 一方で, p - d 交換スピン軌道結合は単体で必須要素二点を同時に満たせる. そこで Dresselhaus スピン軌道結合と s - d 交換の系, p - d 交換スピン軌道結合のみを持つ系, p - d 交換スピン軌道結合に加えて s - d 交換相互作用を持つ系で Hall 伝導率を計算し比較した [5.4 節]. その結果, n 型強磁性半導体の内因性異常 Hall 伝導率で p - d 交換スピン軌道結合による伝導率が支配的であり, さらに伝導率は鉄濃度が 1% 以上の領域において鉄濃度とともに増加し, Dresselhaus スピン軌道結合の系と逆の鉄濃度依存性を示した. この挙動はいずれも p - d 交換相互作用を持つ系の電子構造で, 鉄濃度によるバンドギャップの減少から理解できた.

6 章は 3 章のハミルトニアンに立ち返って p - d 交換相互作用による n 型強磁性半導体の磁気相転移, 特に Curie 温度を鉄濃度, 電子密度, 母体半導体依存性から解析した. 代表的な物質として InFeAs [6.2 節] と InFeSb [6.3 節] で Curie 温度を調べた. その結果, Curie 温度の実験値を説明する上で p - d 交換相互作用が必須要素の一つであると判明し, Curie 温度の計算値のオーダーが実験値と合致した. さらに p - d 交換相互作用を落とすと T_c は劇的に低下し, s - d 交換相互作用のみを考慮した先行研究 [55] と同一貫している. さらに p - d 交換相互作用とバンド間遷移が重要であるために, 想定されてきたキャリア媒介型に見られない電子密度依存性を明らかにした. 最後に InFeAs と InFeSb の Curie 温度の計算値から実験と同一の傾向である母体半導体依存性を導き出し, 本モデルの T_c で p - d 交換スピン軌道結合が支配的であるために母体半導体依存性で重要な因子は母体半導体のエネルギーギャップであることも明らかにした.

これらの解析から $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法に基づく交換スピン軌道結合で交換相互作用のみならずバンドギャップが重要であると判明した. バンドギャップが狭まることで p - d 交換スピン軌道結合が強まり, それが内因性異常 Hall 伝導率の鉄濃度に対する単調増加, Curie 温度への支配的な寄与および特徴的な電子密度依存性, 母体半導体依存性へと結実した. このようにして交換スピン軌道結合制御にあたりバンドギャップ制御が重要な理論的指針の一つである.

以上のようにして本研究では普遍性のある $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法に基づき交換スピン軌道結合を, 相対論的スピン軌道結合も射程に捉えた機構から提案し, n 型強磁性半導体を例にその電子構造から基礎物性まで提示した. 本研究手法は金属反強磁性体 RuO₂ [36–39], 有機反強磁性体 [35] で用いられた複雑な多軌道 Hubbard モデルや第一原理計算などの理論手法と比較して, 交換スピン軌道結合を解明するのに役立つと期待できる. 他に本理論を応用するにあたり有望である系は n 型強磁性半導体の量子井戸 InFeAs/GaFeSb である. Fe でなく Mn を用いた量子井戸 InMnAs/GaMnSb で理論計算から量子異常 Hall 効果 [90] が発生すると予想されている [89]. しかし, Mn がアクセプターとして機能するため, 実験で実現することは困難である [91]. Fe であれば磁性イオンとしてのみ機能し, GaFeSb は既に合成されている [92, 93]. そこで, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法に基づく本理論を用いれば, Mn 系よりも高い実現可能性を伴い, 特に交換スピン軌道結合の役割も明らかにしながら量子異常 Hall 効果を探索できる.

他に二次元物質と強磁性体のヘテロ接合系も新規交換スピン軌道結合探索の物質群候補として有望で

ある。例えば遷移金属カルコゲナイド (TMDC) と強磁性体のヘテロ接合系である。交換スピン軌道結合は $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移と交換相互作用を必要とする。TMDC はその電子構造に $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移を持つ [94]。さらに TMDC と強磁性体との接合も実験で実現している [95]。そして、TMDC でないが、二次元物質 (グラフェン) と強磁性体とのヘテロ接合でそのエネルギーバンドに交換相互作用が誘起されると第一原理計算 [96] および異常 Hall 効果 [97]、コンダクタンスの揺らぎ [98] の測定から提案されている。このことから TMDC と強磁性体のヘテロ接合系は交換スピン軌道結合探索の舞台として有望である。

このようにして本理論は n 型強磁性半導体以外の物質でも交換スピン軌道結合を発見できると予想される。本理論は強磁性秩序を取り扱ったが、超伝導など他の秩序もあり、これら他の秩序によるスピン軌道結合が存在するかといった課題も興味深い。

謝辞

指導教員の明楽浩史教授には学部生のころからの長きにわたる研究指導に感謝いたします。研究活動という構造的な活動を学部、博士前期と後期課程で段階的に丁寧に指導していただき、自身の研究に対する姿勢、発想はそれら一貫した指導に多大な影響を受けました。また本論文で結実した博士後期課程での研究においてテーマおよび方針の提案から、学会発表や論文出版までコメントをいただきつつも自由にやらせてくださり、今後の基礎となる研究能力を築くことができ感謝いたします。

同研究室の鈴浦准教授と江上助教には折に触れて研究でのコメントや他愛のない話などに付き合ってください感謝いたします。鈴浦准教授とは研究分野が異なるからこそその研究一般にあたっての心構えや考えなどをご教授いただき、江上助教には数値計算で相談した際に的確なコメントを返していただき研究での大きな助けとなりました。

また自分の分野に閉じこもらず、実験や他分野への関心を持つにあたり様々な経験をさせてくださった、Dr. Xinwei Li, 河野淳一郎教授、馬場基彰特定准教授など留学で関わってくださった方々、森道康主任研究員をはじめとするインターンで関わった日本原子力研究開発機構スピン-エネルギー科学研究グループの皆様、橋坂昌幸特別研究員および熊田倫雄特別研究員/グループリーダーをはじめとするインターンで関わった NTT 物性基礎科学研究所の皆様感謝いたします。

そして、学部から研究室活動を事務の面から支えてくださった富樫杏子様、博士後期課程にいたるまで関わってきた研究室の学生の皆様に感謝いたします。

最後に博士まで見守ってくださった家族、特に地元から離れた大学まで送り出し、博士への挑戦を見送り支援し続けてくれた両親へ感謝の念に絶えません。

付録 A

III-V 族半導体の価電子帯バンド端の基底関数

A.1 方針

この章で価電子帯のバンド端 Bloch 関数を角運動量の合成から構成する。価電子帯のバンド端は p 軌道の対称性と同一であるため、軌道角運動量 $L = 1$ 、スピン角運動量 $S = 1/2$ の合成である。以下、 p 軌道の状態を表すケット $|X\rangle$ やスピンの状態ベクトル $|\uparrow\rangle$ の記号は本論の表 3.1 と同一である。

角運動量の合成を計算するため、 p 軌道について $|X\rangle$ などではなく磁気量子数による状態ベクトル

$$\begin{cases} |m_l = 1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|X\rangle + i|Y\rangle), \\ |m_l = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|X\rangle - i|Y\rangle), \\ |m_l = 0\rangle = |Z\rangle, \end{cases} \quad \begin{matrix} (A.1) \\ (A.2) \\ (A.3) \end{matrix}$$

でバンド端の Bloch 関数を構成する。

全角運動量の大きさを j と書くと、 j の範囲は

$$|L - S| = \frac{1}{2} < j < L + S = \frac{3}{2},$$

である。 $j = 3/2$ のバンド端が Heavy Hole (HH) と Light Hole (LH) のバンド端であり、HH で z 成分が $j_z = \pm 3/2$ 、LH で z 成分が $j_z = \pm 1/2$ である [図 2.2]。 $j = 1/2$ のバンド端が split-off (SO) のバンド端である [図 2.2]。角運動量の合成は z 成分の最も大きい固有状態

$$|3/2, +3/2\rangle = |m_l = 1, \uparrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|X, \uparrow\rangle + i|Y, \uparrow\rangle),$$

から始め、昇降演算子のうちで降ろす演算子

$$\hat{j}_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle,$$

で順に他の固有状態を導く。導いたのちに式 (A.1, A.2, A.3) を用いて磁気量子数の固有ケットから $|X\rangle$ などの表示に変換することで表 3.1 の HH, LH, SO のバンド端 Bloch 関数を得られる。

A.2 HH, LH の固有状態の構成

A.2.1 $|3/2, +1/2\rangle$ の構成

まず

$$\begin{aligned}\hat{j}_- |3/2, +3/2\rangle &= (\hat{l}_- + \hat{s}_-) |m_l = 1, \uparrow\rangle, \\ &= \sqrt{2} |m_l = 0, \uparrow\rangle + |m_l = 1, \downarrow\rangle,\end{aligned}$$

である一方,

$$\hat{j}_- |3/2, +3/2\rangle = \sqrt{3} |3/2, +1/2\rangle,$$

であるため, $|3/2, +1/2\rangle$ は

$$|3/2, +1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 1, \downarrow\rangle,$$

である.

A.2.2 $|3/2, -1/2\rangle$ の構成

次に

$$\begin{aligned}\hat{j}_- |3/2, +1/2\rangle &= (\hat{l}_- + \hat{s}_-) \left[\sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 1, \downarrow\rangle \right], \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}} (\sqrt{2} |m_l = -1, \uparrow\rangle + |m_l = 0, \downarrow\rangle) + \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{2} |m_l = 0, \downarrow\rangle, \\ &= \frac{2}{\sqrt{3}} |m_l = -1, \uparrow\rangle + 2\sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, \downarrow\rangle,\end{aligned}$$

であり, 同時に

$$\hat{j}_- |3/2, +1/2\rangle = 2 |3/2, -1/2\rangle,$$

であるため, $|3/2, -1/2\rangle$ は

$$|3/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = -1, \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, \downarrow\rangle,$$

である.

A.2.3 $|3/2, -3/2\rangle$ の構成

最後に

$$\begin{aligned}
 \hat{j}_- |3/2, -1/2\rangle &= (\hat{l}_- + \hat{s}_-) \left[\frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = -1, \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, \downarrow\rangle \right], \\
 &= \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = -1, \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \sqrt{2} |m_l = -1, \downarrow\rangle, \\
 &= \frac{3}{\sqrt{3}} |m_l = -1, \downarrow\rangle, \\
 &= \sqrt{3} |m_l = -1, \downarrow\rangle,
 \end{aligned}$$

であるが,

$$\hat{j}_- |3/2, -1/2\rangle = \sqrt{3} |3/2, -3/2\rangle,$$

でもあるため, $|3/2, -3/2\rangle$ は

$$|3/2, -3/2\rangle = |m_l = -1, \downarrow\rangle,$$

である.

A.3 SO の固有状態の構成

次に $j = 1/2$ の SO バンド端 Bloch 関数を構成する. $|1/2, +1/2\rangle$ を

$$|1/2, +1/2\rangle = C_A |m_l = 0, \uparrow\rangle + C_B |m_l = 1, \downarrow\rangle, \quad |C_A|^2 + |C_B|^2 = 1,$$

の形で展開する. この状態ベクトルは $j = 3/2$ の $|3/2, +1/2\rangle$ と直交しなければならないため

$$\begin{aligned}
 \langle 3/2, +1/2 | 1/2, +1/2 \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} C_A + \frac{1}{\sqrt{3}} C_B = 0, \\
 C_A &= -\frac{1}{\sqrt{2}} C_B,
 \end{aligned}$$

の関係式を得る. そして, 規格化条件から

$$\begin{aligned}
 \frac{3}{2} |C_B|^2 &= 1, \\
 C_B &\equiv \sqrt{\frac{2}{3}},
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

である. ただし, 正の実数となる位相を取った. 以上から $|1/2, +1/2\rangle$ は

$$|1/2, +1/2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 0, \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 1, \downarrow\rangle,$$

である.

$|1/2, -1/2\rangle$ を得るために $|1/2, +1/2\rangle$ へ下降の演算子を作用させると

$$\begin{aligned}\hat{j}_- |1/2, +1/2\rangle &= (\hat{l}_- + \hat{s}_-) \left[-\frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 0, \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 1, \downarrow\rangle \right], \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\sqrt{2} |m_l = -1, \uparrow\rangle + |m_l = 0, \downarrow\rangle \right) + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \sqrt{2} |m_l = 0, \downarrow\rangle, \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 0, \downarrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = -1, \uparrow\rangle,\end{aligned}$$

である. 同時に

$$\hat{j}_- |1/2, +1/2\rangle = |1/2, -1/2\rangle,$$

である. よって, $|1/2, -1/2\rangle$ は

$$|1/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 0, \downarrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = -1, \uparrow\rangle,$$

である.

A.4 構成まとめ

以上の結果をまとめると表 3.1 に対応させて表 A.4 である.

バンド端	$ j, m_j\rangle$	基底関数
HH	$ 3/2, +3/2\rangle$	$ m_l = 1, \uparrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(X, \uparrow\rangle + i Y, \uparrow\rangle)$
LH	$ 3/2, +1/2\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}} m_l = 1, \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} m_l = 0, \uparrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}}(X, \downarrow\rangle + i Y, \downarrow\rangle) + \sqrt{\frac{2}{3}} Z, \uparrow\rangle$
LH	$ 3/2, -1/2\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}} m_l = -1, \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} m_l = 0, \downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(X, \uparrow\rangle - i Y, \uparrow\rangle) + \sqrt{\frac{2}{3}} Z, \downarrow\rangle$
HH	$ 3/2, -3/2\rangle$	$ m_l = -1, \downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(X, \downarrow\rangle - i Y, \downarrow\rangle)$
SO	$ 1/2, +1/2\rangle$	$\sqrt{\frac{2}{3}} m_l = 1, \downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} m_l = 0, \uparrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}(X, \downarrow\rangle + i Y, \downarrow\rangle) - \frac{1}{\sqrt{3}} Z, \uparrow\rangle$
SO	$ 1/2, -1/2\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} m_l = -1, \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} m_l = 0, \downarrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}(X, \uparrow\rangle - i Y, \uparrow\rangle) + \frac{1}{\sqrt{3}} Z, \downarrow\rangle$

付録 B

価電子帯バンド端の基底関数によるスピン演算子の行列表現

B.1 行列要素の計算方針

スピン演算子 $\hat{s} = \sigma/2$ の価電子帯バンド端の Bloch 関数 [表 3.1 もしくは表 A.4] による行列表現を導く [式 (3.19) の $\hat{s}_i^{(p)}$].

なお x, y 成分の計算にあたって $\hat{s}_\pm$ との関係式

$$\hat{s}_x = \frac{\hat{s}_+ + \hat{s}_-}{2}, \hat{s}_y = \frac{\hat{s}_+ - \hat{s}_-}{2i} = i \frac{\hat{s}_- - \hat{s}_+}{2},$$

を用いて導く. さらに $\hat{s}_- = (\hat{s}_+)^{\dagger}$ であるため, スピンの成分の中で計算すべきは $\hat{s}_+$ と $\hat{s}_z$ である.

B.2 $\hat{s}_z$ の行列要素

B.2.1 $|3/2, \pm 3/2\rangle$ の列

$$\hat{s}_z |3/2, \pm 3/2\rangle = \pm \frac{1}{2} |3/2, \pm 3/2\rangle.$$

B.2.2 $|3/2, \pm 1/2\rangle$ の列

$$\begin{cases} \hat{s}_z |3/2, +1/2\rangle = \frac{1}{2} \left[-\frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 1, \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, \uparrow\rangle \right], \\ \hat{s}_z |3/2, -1/2\rangle = \frac{1}{2} \left[+\frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = -1, \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, \downarrow\rangle \right]. \end{cases}$$

$|3/2, +1/2\rangle$ の列 $\langle 3/2, +1/2|$ の行

$$\begin{aligned}
\langle 3/2, +1/2| \hat{s}_z |3/2, +1/2\rangle &= \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \langle m_l = 1, \downarrow| + \sqrt{\frac{2}{3}} \langle m_l = 0, \uparrow| \right] \frac{1}{2} \left[-\frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 1, \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, \uparrow\rangle \right], \\
&= \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{3} + \frac{2}{3} \right), \\
&= \frac{1}{6}.
\end{aligned}$$

 $\langle 1/2, +1/2|$ の行

$$\begin{aligned}
\langle 1/2, +1/2| \hat{s}_z |3/2, +1/2\rangle &= \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \langle m_l = 1, \downarrow| - \frac{1}{\sqrt{3}} \langle m_l = 0, \uparrow| \right] \frac{1}{2} \left[-\frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 1, \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, \uparrow\rangle \right], \\
&= \frac{1}{2} \left(-\frac{\sqrt{2}}{3} - \frac{\sqrt{2}}{3} \right), \\
&= -\frac{\sqrt{2}}{3}.
\end{aligned}$$

 $|3/2, -1/2\rangle$ の列 $\langle 3/2, -1/2|$ の行

$$\begin{aligned}
\langle 3/2, -1/2| \hat{s}_z |3/2, -1/2\rangle &= \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \langle m_l = -1, \uparrow| + \sqrt{\frac{2}{3}} \langle m_l = 0, \downarrow| \right] \frac{1}{2} \left[+\frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = -1, \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, \downarrow\rangle \right], \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{3} \right), \\
&= -\frac{1}{6}.
\end{aligned}$$

 $\langle 1/2, -1/2|$ の行

$$\begin{aligned}
\langle 1/2, -1/2| \hat{s}_z |3/2, -1/2\rangle &= \left[-\sqrt{\frac{2}{3}} \langle m_l = -1, \uparrow| + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle m_l = 0, \downarrow| \right] \frac{1}{2} \left[+\frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = -1, \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, \downarrow\rangle \right], \\
&= \frac{1}{2} \left(-\frac{\sqrt{2}}{3} - \frac{\sqrt{2}}{3} \right), \\
&= -\frac{\sqrt{2}}{3}.
\end{aligned}$$

B.2.3 $|1/2, \pm 1/2\rangle$ の列

$$\begin{cases} \hat{s}_z |1/2, +1/2\rangle = \frac{1}{2} \left[-\sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 1, \downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 0, \uparrow\rangle \right], \\ \hat{s}_z |1/2, -1/2\rangle = \frac{1}{2} \left[-\sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = -1, \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 0, \downarrow\rangle \right]. \end{cases}$$

 $|1/2, +1/2\rangle$ の列 $\langle 3/2, +1/2|$ の行

$$\begin{aligned} \langle 3/2, +1/2| \hat{s}_z |1/2, +1/2\rangle &= \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \langle m_l = 1, \downarrow| + \sqrt{\frac{2}{3}} \langle m_l = 0, \uparrow| \right] \frac{1}{2} \left[-\sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 1, \downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 0, \uparrow\rangle \right], \\ &= \frac{1}{2} \left(-\frac{\sqrt{2}}{3} - \frac{\sqrt{2}}{3} \right), \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{3}. \end{aligned}$$

 $|1/2, +1/2\rangle$ の行

$$\begin{aligned} \langle 1/2, +1/2| \hat{s}_z |1/2, +1/2\rangle &= \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \langle m_l = 1, \downarrow| - \frac{1}{\sqrt{3}} \langle m_l = 0, \uparrow| \right] \frac{1}{2} \left[-\sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 1, \downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 0, \uparrow\rangle \right], \\ &= \frac{1}{2} \left(-\frac{2}{3} + \frac{1}{3} \right), \\ &= -\frac{1}{6}. \end{aligned}$$

 $|1/2, -1/2\rangle$ の列 $\langle 3/2, -1/2|$ の行

$$\begin{aligned} \langle 3/2, -1/2| \hat{s}_z |1/2, -1/2\rangle &= \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \langle m_l = -1, \uparrow| + \sqrt{\frac{2}{3}} \langle m_l = 0, \downarrow| \right] \frac{1}{2} \left[-\sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = -1, \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 0, \downarrow\rangle \right], \\ &= \frac{1}{2} \left(-\frac{\sqrt{2}}{3} - \frac{\sqrt{2}}{3} \right), \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{3}. \end{aligned}$$

$\langle 1/2, -1/2 |$ の行

$$\begin{aligned}\langle 1/2, -1/2 | \hat{s}_z | 1/2, -1/2 \rangle &= \left[-\sqrt{\frac{2}{3}} \langle m_l = -1, \uparrow | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle m_l = 0, \downarrow | \right] \frac{1}{2} \left[-\sqrt{\frac{2}{3}} | m_l = -1, \uparrow \rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} | m_l = 0, \downarrow \rangle \right], \\ &= \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{3} + \frac{2}{3} \right), \\ &= \frac{1}{6}.\end{aligned}$$

B.2.4 $\hat{s}_z$ の行列表示

$$\hat{s}_z = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{6} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & -\frac{1}{6} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{6} \end{bmatrix}.$$

B.3 $\hat{s}_{\pm}$ の行列要素

B.3.1 $|3/2, +3/2\rangle$ の列

$$\hat{s}_+ |3/2, +3/2\rangle = 0.$$

B.3.2 $|3/2, +1/2\rangle$ の列

$$\hat{s}_+ |3/2, +1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 1, \uparrow\rangle.$$

$\langle 3/2, +3/2 |$ の行

$$\langle 3/2, +3/2 | \hat{s}_+ |3/2, +1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

B.3.3 $|3/2, -1/2\rangle$ の列

$$\hat{s}_+ |3/2, -1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |Z, \uparrow\rangle.$$

$\langle 3/2, +1/2 |$ の行

$$\langle 3/2, +1/2 | \hat{s}_+ | 3/2, +1/2 \rangle = \frac{2}{3}.$$

$\langle 1/2, +1/2 |$ の行

$$\langle 3/2, -1/2 | \hat{s}_+ | 3/2, +1/2 \rangle = -\frac{\sqrt{2}}{3}.$$

B.3.4 $|3/2, -3/2\rangle$ の列

$$\hat{s}_+ | 3/2, -3/2 \rangle = |m_l = -1, \uparrow \rangle.$$

$\langle 3/2, -1/2 |$ の行

$$\langle 3/2, -1/2 | \hat{s}_+ | 3/2, -3/2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

$\langle 1/2, -1/2 |$ の行

$$\langle 1/2, -1/2 | \hat{s}_+ | 3/2, -3/2 \rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}}.$$

B.3.5 $|1/2, +1/2\rangle$ の列

$$\hat{s}_+ | 1/2, +1/2 \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 1, \uparrow \rangle.$$

$\langle 3/2, +3/2 |$ の行

$$\langle 3/2, +3/2 | \hat{s}_+ | 1/2, +1/2 \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}.$$

B.3.6 $|1/2, -1/2\rangle$ の列

$$\hat{s}_+ | 1/2, -1/2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |m_l = 0, \uparrow \rangle.$$

$\langle 3/2, +1/2 |$ の行

$$\langle 3/2, +1/2 | \hat{s}_+ | 1/2, +1/2 \rangle = \frac{\sqrt{2}}{3}.$$

$\langle 2/2, +1/2 |$ の行

$$\langle 2/2, +1/2 | \hat{s}_+ | 1/2, +1/2 \rangle = -\frac{1}{3}.$$

B.3.7 $\hat{s}_{\pm}$ の行列表示

$$\hat{s}_+ = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & -\frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\hat{s}_- = (\hat{s}_+)^{\dagger} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & -\frac{1}{3} & 0 \end{bmatrix}.$$

B.4 $\hat{s}_{x,y}$ の行列表示

$$\hat{s}_x = \frac{\hat{s}_+ + \hat{s}_-}{2} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{3\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{3\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{1}{3\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{1}{6} \\ 0 & \frac{1}{3\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{6} & 0 \end{bmatrix},$$

$$\hat{s}_y = i \frac{\hat{s}_- - \hat{s}_+}{2} = i \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & -\frac{1}{3\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 & -\frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{3\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{3\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{6} \\ 0 & \frac{1}{3\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{6} & 0 \end{bmatrix}.$$

付録 C

Quasi-Degenerate Perturbation Theory - 有効ハミルトニアンの摂動論的構築

本章で Quasi-Degenerate Perturbation Theory と呼ばれている、摂動論による有効ハミルトニアンの構築方法を説明する。この手法は様々な系で応用されてきた経緯から、Löwdin 摂動 [1, 99, 100], Schrieffer-Wolff 変換 [101] などとも呼ばれる。実際、半導体のバンド構造のための有効ハミルトニアン構築 [1, 99, 102], van Vleck による二原子分子のスペクトル解析 [103], Foldy-Wouthuysen 変換 [104], Anderson モデル [105] から局在スピンとの交換相互作用を導出する変換 [101] などで用いられてきた。包括的な議論は文献 [106] で成されている。

C.1 一般的な有効ハミルトニアンの表式

C.1.1 前提

まず一般の全ハミルトニアンが

$$H = H^{(0)} + H',$$

であるとする。そして、 $H^{(0)}$ の固有値方程式

$$H^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle,$$

は解かれているとする。 $H^{(0)}$ を無摂動項とし、任意に縮退を含んでもよいとする。摂動項 H' は条件 $|\langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_m^{(0)} \rangle / (E_n^{(0)} - E_m^{(0)})| \ll 1 (n \neq m)$ を満たすとする。さらに全ハミルトニアンに対する Schrödinger 方程式は

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (\text{C.1})$$

である。

ここで $H^{(0)}$ の固有エネルギーのうち、特定のエネルギー領域（例えば、半導体のバンド構造なら Fermi エネルギーに最も近い複数のバンド）の状態で摂動の受けた状態を抽出したい。そこで固有ベクトルを

$$|\psi\rangle = \sum_{m \in A} C_m |\psi_m^{(0)}\rangle + \sum_{l \in B} C_l |\psi_l^{(0)}\rangle, \quad (\text{C.2})$$

のように, 着目しているエネルギー領域のクラス A とそれ以外のクラス B に分ける. 指標について m, m' はクラス A の状態, l, l' はクラス B の状態を指定する. 式 (C.2) を式 (C.1) へと代入して, Schrödinger 方程式は $\{|\psi_n^{(0)}\rangle\}$ の表示で

$$H \left[\sum_{m \in A} C_m |\psi_m^{(0)}\rangle + \sum_{l \in B} C_l |\psi_l^{(0)}\rangle \right] = E \left[\sum_{m \in A} C_m |\psi_m^{(0)}\rangle + \sum_{l \in B} C_l |\psi_l^{(0)}\rangle \right],$$

である. 行列表示は

$$HC = EC, \quad (C.3)$$

である. なお以下では行列表示された演算子を見やすさのために H のようにローマン体で表記する.

C.1.2 ブロック対角化

続いて固有値方程式 [式 (C.3)] を図 C.1 に示すユニタリー変換によってクラス A について閉じた方程式に変換していく. 要点は, 摂動項 H' が A と B クラス間を結びつける非対角ブロックの項を持っており, その項をユニタリー変換 $e^S (S^\dagger = -S)$ で摂動的に消去する点である. そうすることで図 C.1 (b) の右側に示すようにクラス A のみで閉じたブロックを得られ, そのクラス A のブロックを以て着目したエネルギー領域の状態を記述する有効ハミルトニアンと定義できる.

まず固有値方程式 [式 (C.3)] をユニタリー変換して, その方程式は

$$\begin{aligned} \tilde{H}\tilde{C} &= E\tilde{C}, \\ \tilde{H} &= e^{-S}He^S, \quad \tilde{C} = e^{-S}C, \end{aligned}$$

である. なお後に示すが, 反ユニタリー演算子 S の行列表示 S は非対角ブロックのみをノンゼロにもつ行列である. そして, H' の中でブロック対角の項を H_1 , 非対角の項を H_2 と書くと [図 C.1 (a)], 行列 $\tilde{H}$ は Baker-Campbell-Hausdorff 公式より

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{j!} [H^{(0)} + H_1, S]^{(j)} + \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{j!} [H_2, S]^{(j)}, \\ e^S &= 1 + S + \frac{1}{2!}S^2 + \frac{1}{3!}S^3 + \dots, \end{aligned}$$

であり, 略記のために

$$[A, B]^{(j)} = [\dots [A, B], \underbrace{B, \dots, B}_j \text{ times}], \quad \text{e.g.} \quad [A, B]^{(0)} = A, \quad [A, B]^{(3)} = [[[A, B], B], B],$$

を定義した. 現れる多重の交換関係において, S が非対角ブロックのみを含むため

$$[H^{(0)} + H_1, S]^{(j)} = [(\text{ブロック対角}) \quad \text{ただし } j = 0, 2, 4, \dots], \quad (C.4a)$$

$$[(\text{ブロック非対角}) \quad \text{ただし } j = 1, 3, 5, \dots], \quad (C.4b)$$

$$[H_2, S]^{(j)} = [(\text{ブロック対角}) \quad \text{ただし } j = 1, 3, 5, \dots], \quad (C.4c)$$

$$[(\text{ブロック非対角}) \quad \text{ただし } j = 0, 2, 4, \dots], \quad (C.4d)$$

である.

条件 [式 (C.4a-C.4d)] を用いて, ハミルトニアン $\tilde{H}$ は対角ブロックの項 $\tilde{H}_d$, 非対角ブロックの項 $\tilde{H}_{\text{off}}$

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= \tilde{H}_d + \tilde{H}_{\text{off}}, \\ \tilde{H}_d &= \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{(2j)!} \left[H^{(0)} + H_1, S \right]^{(2j)} + \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{(2j+1)!} [H_2, S]^{(2j+1)}, \\ \tilde{H}_{\text{off}} &= \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{(2j+1)!} \left[H^{(0)} + H_1, S \right]^{(2j+1)} + \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{(2j)!} [H_2, S]^{(2j)},\end{aligned}$$

へと分解できる. そして, ブロック対角化は S を $\tilde{H}_{\text{off}}$ を消去するように決定すれば達成できる. つまり, ブロック対角化のための S を決める方程式は

$$\tilde{H}_{\text{off}} = \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{(2j+1)!} \left[H^{(0)} + H_1, S \right]^{(2j+1)} + \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{(2j)!} [H_2, S]^{(2j)} = 0, \quad (\text{C.5})$$

である.

厳密に方程式 (C.5) を解くことは数学的に困難であるため, 摂動的に解き S を決定する. まず S を

$$S = S^{(1)} + S^{(2)} + S^{(3)} + \dots, \quad (\text{C.6})$$

の形で摂動展開する. $S^{(i)}$ は摂動項 H' について i 次である. 続いて式 (C.6) を式 (C.5) へ代入して, S の方程式は

$$\sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{(2j+1)!} \left[H^{(0)} + H_1, S^{(1)} + S^{(2)} + S^{(3)} + \dots \right]^{(2j+1)} + \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{(2j)!} \left[H_2, S^{(1)} + S^{(2)} + S^{(3)} + \dots \right]^{(2j)} = 0, \quad (\text{C.7})$$

である. 各 j の項を書き出すと $j = 0$ の項は

$$\left[H^{(0)} + \tilde{H}_1, S^{(1)} + S^{(2)} + S^{(3)} + \dots \right] + H_2,$$

であり, 摂動の一次が最低次である. $j = 1$ は

$$\begin{aligned}& \frac{1}{3!} \left[\left[\left[H^{(0)} + H_1, S^{(1)} + S^{(2)} + S^{(3)} + \dots \right], S^{(1)} + S^{(2)} + S^{(3)} + \dots \right], S^{(1)} + S^{(2)} + S^{(3)} + \dots \right] \\ & + \frac{1}{2!} \left[\left[H_2, S^{(1)} + S^{(2)} + S^{(3)} + \dots \right], S^{(1)} + S^{(2)} + S^{(3)} + \dots \right],\end{aligned}$$

であり, 最低次は三次である. 以上から摂動の次数で方程式 (C.7) を分割して連立方程式に変換すると,

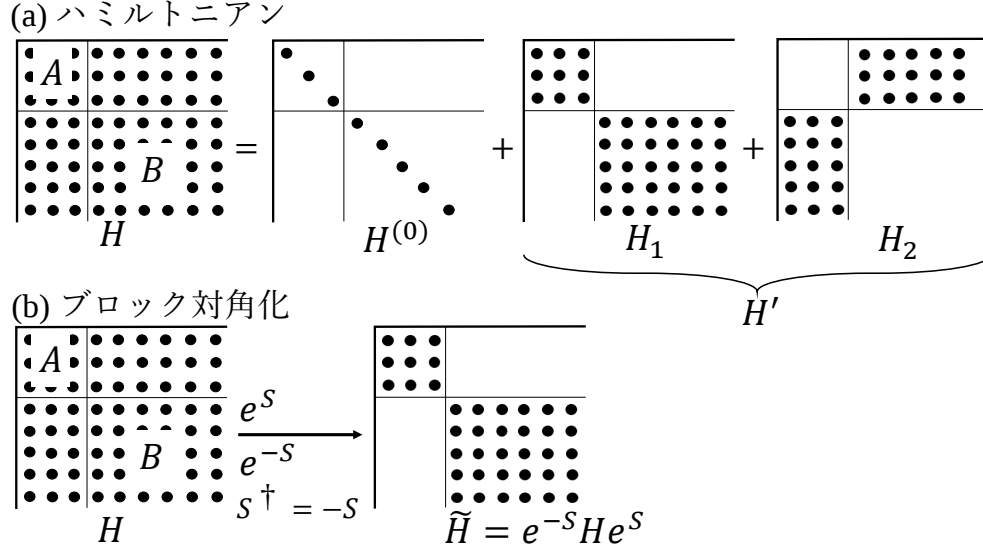


図 C.1 Quasi-Degenerate Perturbation Theory による有効ハミルトニアン構築の概念図. 黒丸で一般にノンゼロの成分を表す. 空白の成分はゼロである. (a) ハミルトニアンがある基底で行列表現され, 注目するエネルギー準位に対応する状態の部分空間を記述するブロック A とそれ以外のブロック B に分ける. そして, ハミルトニアンを対角成分のみの $H^{(0)}$, 対角ブロックかつ非対角成分を含む H_1 , 非対角ブロック成分のみを持つ H_2 に分ける. (b) $H_1 + H_2$ を摂動項 H' とし, 反ユニタリー演算子 S によるユニタリー変換 e^S でブロック対角化する. 得られたブロック A のみを取り出して有効ハミルトニアンとする.

方程式は

$$\begin{cases} [H^{(0)}, S^{(1)}] + H_2 = 0, (\text{摂動一次}) \\ [H^{(0)}, S^{(2)}] + [H_1, S^{(1)}] = 0, (\text{摂動二次}) \\ [H^{(0)}, S^{(3)}] + [H_1, S^{(2)}] + \frac{1}{3!} [[H^{(0)}, S^{(1)}], S^{(1)}, S^{(1)}] + \frac{1}{2!} [[H_2, S^{(1)}], S^{(1)}] = 0, (\text{摂動三次}) \\ \dots = \dots \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

である. この方程式を指定した次数まで系統的に解くことで S を得られ, その S を $\tilde{H}_d$ に代入することで有効ハミルトニアンを構築できる.

C.1.3 摂動二次までの有効ハミルトニアン

後のために、ここでは摂動二次までの有効ハミルトニアンを導く．まず式 (C.8) を $\langle \psi_m^{(0)} | (m \in A)$ と $|\psi_l^{(0)}\rangle (l \in B)$ もしくは $|\psi_{m'}^{(0)}\rangle (m' \in A)$ によって行列表示して、S の摂動一次の項は H_2 の定義から

$$S_{ml}^{(1)} = -\frac{H'_{ml}}{E_m^{(0)} - E_l^{(0)}}, \quad S_{mm'}^{(1)} = 0, \quad (\text{C.9})$$

である． $(H_2)_{ml} = H'_{ml}$ と $(H_1)_{mm'} = H'_{mm'}$ である．

一方、有効ハミルトニアンの対角ブロックは摂動二次まで書くと $\tilde{H}_d$ の、 $\langle \psi_m^{(0)} | (m \in A)$ と $|\psi_{m'}^{(0)}\rangle (m' \in A)$ による行列表示で

$$\begin{aligned} H_{mm'}^{(0)} &= (\tilde{H}_d^{(0)})_{mm'} = H_{mm'}^{(0)}, \\ H_{mm'}^{(1)} &= (\tilde{H}_d^{(1)})_{mm'} = (H_1)_{mm'}, \\ H_{mm'}^{(2)} &= (\tilde{H}_d^{(2)})_{mm'} = \frac{1}{2} \left[[H^{(0)}, S^{(1)}], S^{(1)} \right]_{mm'} + [H_2, S^{(1)}]_{mm'}, \end{aligned}$$

である．式 (C.9) から、最終的に有効ハミルトニアンの摂動二次の項は

$$\begin{aligned} H_{mm'}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left[[H^{(0)}, S^{(1)}], S^{(1)} \right]_{mm'} + [H_2, S^{(1)}]_{mm'}, \\ &= \frac{1}{2} [H_2, S^{(1)}]_{mm'}, \\ &= \frac{1}{2} \left[\langle \psi_m^{(0)} | H_2 \left(\sum_{M' \in A} |\psi_{M'}^{(0)}\rangle \langle \psi_{M'}^{(0)}| + \sum_{l \in B} |\psi_l^{(0)}\rangle \langle \psi_l^{(0)}| \right) S^{(1)} |\psi_{m'}^{(0)}\rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle \psi_m^{(0)} | S^{(1)} \left(\sum_{M' \in A} |\psi_{M'}^{(0)}\rangle \langle \psi_{M'}^{(0)}| + \sum_{l \in B} |\psi_l^{(0)}\rangle \langle \psi_l^{(0)}| \right) H_2 |\psi_{m'}^{(0)}\rangle \right], \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l \in B} \left[H'_{ml} \frac{-H'_{lm'}}{E_l^{(0)} - E_{m'}^{(0)}} - \frac{-H'_{ml}}{E_m^{(0)} - E_l^{(0)}} H'_{lm'} \right], \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l \in B} H'_{ml} H'_{lm'} \left[\frac{1}{E_{m'}^{(0)} - E_l^{(0)}} + \frac{1}{E_m^{(0)} - E_l^{(0)}} \right], \end{aligned}$$

である． $m = m'$ とすれば、量子力学で議論される二次摂動の結果が導かれる．上式で重要な点はクラス A に縮退を許す点である．分母に現れるエネルギー差がクラス A, B 間のエネルギー差のみであり、従来の縮退のない場合の二次摂動で現れうる分母の発散を回避できている．このために III-V 族半導体の価電子帯のように縮退が存在しても有効ハミルトニアンを構築できる．

C.2 半導体の 8 バンドハミルトニアン導出の概略

本節では C.1 節の摂動二次までの有効ハミルトニアンを用い、III-V 族半導体のバンドを記述する有効ハミルトニアンを導出する．

また本章では略記のため、相対論的スピン軌道結合を SOI と略す．

C.2.1 方針

対称性, バンド端の状態

結晶は zinc-blende 構造であり, 点群 T_d [図 4.5 (a)] に従う. 既約表現は一重群なら

$$\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4, \Gamma_5$$

で [1, 107], Fermi エネルギーに最も近い伝導帯のバンド端は Γ_1 (エネルギー E_c), 価電子帯と次に高い伝導帯のバンド端は Γ_4 に従う (エネルギー E_v, E'_c). 二重群なら

$$\Gamma_6, \Gamma_8, \Gamma_7$$

で Fermi エネルギーに最も近い伝導帯のバンド端は Γ_6 , 価電子帯は Γ_8 (四重縮退), SOI で分裂したバンド端は Γ_7 (二重縮退) に従う.

E_v, E_c, E'_c での状態を順に

$$\begin{aligned} &|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle, \quad \langle \mathbf{r}|X\rangle \propto xf(r) \\ &|S\rangle \\ &|X'\rangle, |Y'\rangle, |Z'\rangle \end{aligned}$$

とする [図 3.2 (a)]. ただし, $|X'\rangle$ などは p 軌道の反結合性軌道によるバンド端の軌道であり, $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ に存在する. 対応するエネルギー準位は $|S\rangle$ を持つ伝導帯の一つ上の伝導帯に関するバンド端である.

クラス A の取り方

図 3.2 (a) に示すようなバンドを記述する有効ハミルトニアンの構築を目指す. その際の基本的な方針としてクラス A に取り入れるバンド端を段階的に大きくし, かつスピン自由度を増やす. 具体的には

- (a) 伝導帯のみ. ただし, 価電子帯で SOI を無視する
- (a'') 伝導帯のみ. ただし, 価電子帯の SOI を取り入れる
- (b) 価電子帯のみ. ただし, SOI を無視する
- (b') 価電子帯のみ. ただし, SOI を取り入れる
- (b'') 価電子帯のみ. ただし, SOI によるギャップを対角化する表現基底にとる
- (c) 伝導帯と価電子帯をとる. ただし, SOI を無視する
- (c'') 伝導帯と価電子帯をとり, SOI を取り入れる. ただし, (a'') と (b'') によってハミルトニアンを組み立てる

とする. 各ケースでの表現基底は

- (a) $|S\rangle$
- (a'') $|S\rangle$
- (b) $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$
- (b') $|X, \uparrow\rangle, |X, \downarrow\rangle, |Y, \uparrow\rangle, |Y, \downarrow\rangle, |Z, \uparrow\rangle, |Z, \downarrow\rangle$

- (b'') $|3/2, 3/2\rangle_v, |3/2, 1/2\rangle_v, |3/2, -1/2\rangle_v, |3/2, -3/2\rangle_v, |1/2, 1/2\rangle_v, |1/2, -1/2\rangle_v$
- (c) $|S\rangle, |X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$
- (c'') $|S, \uparrow\rangle, |S, \downarrow\rangle, |3/2, 3/2\rangle_v, |3/2, 1/2\rangle_v, |3/2, -1/2\rangle_v, |3/2, -3/2\rangle_v, |1/2, 1/2\rangle_v, |1/2, -1/2\rangle_v$

である。 $|3/2, 3/2\rangle_v, |3/2, 1/2\rangle_v, |3/2, -1/2\rangle_v, |3/2, -3/2\rangle_v, |1/2, 1/2\rangle_v, |1/2, -1/2\rangle_v$ は $|X, \uparrow\rangle, |X, \downarrow\rangle, |Y, \uparrow\rangle, |Y, \downarrow\rangle, |Z, \uparrow\rangle, |Z, \downarrow\rangle$ で表すと、表 A.4 の通りである。

ハミルトニアンの組み立て方の概略

(a) などで得られる有効ハミルトニアンを $H_{(a)}$ などと書くことにする。導出する順番は (a), (b), (c), (b'), (b''), (a''), (c'') とする。

後に示すように現れるパラメータは対称操作と表現基底の位相の取り方のみで定義できる。そのため、クラス A をより大きくとった場合にパラメータの値をクラス A の取り方に合わせて再定義するのみで、波数依存性などは同じ形である。例えば、 $H_{(a)}$ について

$$H_{(a)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}$$

と求まったとする。 m_c は対称性と位相のみで定義できるパラメータとする。 つづいて

$$\begin{bmatrix} H_{1c} & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_{4v} \end{bmatrix}$$

という価電子帯を含めたクラス A の取り方の際、 H_{1c} の波数依存性はバンド端の対称性、用いる基底関数の位相のみで決まるため $H_{(a)}$ と同一の波数依存性だが、パラメータは E_v を含む H_{4v} のバンドによる項を含まない。そのため、(a) の m_c のうち、価電子帯の分を差し引くことで H_{1c} のパラメータが得られる。具体的には

$$H_{1c} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m'_c}, \quad \frac{m_0}{m'_c} = \frac{m_0}{m_c} - (H_{4v} \text{ の価電子帯との混成による項})$$

となる。

また、表現基底を変える (b') から (b'') の場合には表 A.4 から得られるユニタリー変換を用いる。こうすることで、(c'') の場合の価電子帯における波数に関する関数形が得られる。

最終的な目標は (c'') の場合の有効ハミルトニアンである。

有効ハミルトニアン

有効ハミルトニアンは Quasi-Degenerate Perturbation Theory より

$$\begin{aligned}
H_{\nu\nu'}^{\text{eff}} &= H_{\nu\nu'} + \frac{1}{2} \sum_{\beta, \sigma\beta \in B} H'_{\nu\beta} H'_{\beta\nu'} \left[\frac{1}{E_\nu - E_\beta} + \frac{1}{E_{\nu'} - E_\beta} \right] \\
H_{\nu\nu'} &= \left[E_{\nu'} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu\nu'} + H'_{\nu\nu'} \\
H'_{\nu\nu'} &= \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\nu\nu'} + \Delta_{\nu\nu'} \\
\mathbf{P}_{\nu\nu'} &= \langle \nu | \mathbf{p} | \nu' \rangle \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \times \langle \nu | \nabla V_0(\mathbf{r}) | \nu' \rangle \\
\Delta_{\nu\nu'} &= \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \cdot \langle \nu | \nabla V_0 \times \mathbf{p} | \nu' \rangle
\end{aligned}$$

である. $E_{\nu'}$ はバンド端のエネルギーで判明しているとし, (a) などの場合で $E_{\nu'}^{(a)}$ などと記述する. ただし, ν, ν', β はスピンを含まない. この式は (b') で用いる. (a), (b) なら SOI を無視するため有効ハミルトニアンに

$$\begin{aligned}
H_{\nu\nu'}^{\text{eff}} &= H_{\nu\nu'} + \frac{1}{2} \sum_{\beta \in B} H'_{\nu\beta} H'_{\beta\nu'} \left[\frac{1}{E_\nu - E_\beta} + \frac{1}{E_{\nu'} - E_\beta} \right] \\
H_{\nu\nu'} &= \left[E_{\nu'} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu\nu'} + H'_{\nu\nu'} \\
H'_{\nu\nu'} &= \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\nu\nu'} \\
\mathbf{P}_{\nu\nu'} &= \langle \nu | \mathbf{p} | \nu' \rangle
\end{aligned}$$

を用いる.

価電子帯で SOI を取り入れる (a'') では有効ハミルトニアン

$$\begin{aligned}
H_{jj'}^{\text{eff}} &= H_{jj'} + \frac{1}{2} \sum_{j\beta \in B} H'_{jj\beta} H'_{j\beta j'} \left[\frac{1}{E_j - E_{j\beta}} + \frac{1}{E_{j'} - E_{j\beta}} \right] \\
H_{jj'} &= \left[E_{j'} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'} + H'_{jj'} \\
H'_{jj'} &= \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{jj'} \\
\mathbf{P}_{jj'} &= \langle j | \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0(\mathbf{r}) | j' \rangle
\end{aligned}$$

を用いる. ただし, $\{|j\rangle\}$ は $\Delta_{\nu\nu'}^{\sigma\sigma'}$ を対角化する表現基底のため, $E_{j'}$ に取り入れた.

注意点として,

- 有効ハミルトニアンの表式は $\{|j\rangle\}$ の方が単純であるが, 点群 T_d の対称性を反映させて機械的に計算する際は $\{|\nu, \sigma\rangle\}$ の方が便利である. そのため, $\{|j\rangle\}$ の有効ハミルトニアンはクラス A が最小かつ SOI を価電子帯で取り入れる (a'') にのみ用いる.

- $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}$ におけるエネルギー E_j や E_ν の定義は用いる表現基底で変わってくる．そのため，ケース (a), (b) などごとに再定義する．
- なお $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 法の仮定から E_j などには実験や第一原理計算といった他の手法による結果を入力する．さらに E_j の絶対値でなく差がエネルギーギャップを与えるため，基準を設定してエネルギーギャップといったパラメータが有効ハミルトニアンに現れる．

記号と注意点

後で必要になるため記号の定義と注意点を書いておく．

- 以下, p 軌道と同じ対称性の軌道を p -like や, p_x -like なら X -like な軌道と呼ぶ．
- β 和の中で X -like な軌道を β_X などと書くことにする．
- s -like や p -like な軌道の厳密な意味は点群 T_d の既約表現 Γ_1, Γ_4 の基底関数という意味である．
- クラス B はクラス A の取り方で変化するため, (a) などクラス A の取り方に対して数式中で $B_{(a)}$ などと書くことにする．
- クラス B による摂動項で現れるパラメータを一般に Remote バンドパラメータと呼ぶ．
- クラス A を拡大した際, そこまでに定義してきた Remote バンドパラメータから今までクラス B としてきたバンドの項を差し引くことになる．その差し引いたパラメータを Reduced バンドパラメータと呼ぶ．
- 計算で頻繁に T_d の対称操作 G に関し, $G|S\rangle$ などの表現が現れる．この表現は厳密に考えると位置表示した波動関数 $S(\mathbf{r})$ への作用

$$G|S\rangle = \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|G|S\rangle = \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle S(G^{-1}\mathbf{r})$$

である．しかし, 毎回その等式を書くことは煩わしいため, $S(G^{-1}\mathbf{r}) = S(\mathbf{r})$ のもと, 簡略して $G|S\rangle = |S\rangle$ と書くことにする．

SOI の注意点は

- クラス B のバンドの SOI を無視する．この近似は SOI 自体比較的小さい効果が, Remote バンドパラメータでさらに小さくなると予想されるためである
- SOI はクラス A 内の効果のみ取り入れる
- こうすると SOI についてクラス A の効果に関しては厳密になる

である

基底関数の位相の取り方

ハミルトニアンが他の文献と一貫するように, 位相の取り方として $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ の位置表示が実数となるようにとり, 残りの $|S\rangle, |X'\rangle, |Y'\rangle, |Z'\rangle$ の位置表示は純虚数となるようにとる．より具体的には, $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ の位置表示である球面調和関数 $Y_{l,m}$ について $Y_{1,1} + Y_{1,-1}$ と $(Y_{1,1} - Y_{1,-1})/i, Y_{1,0}$ がそれぞれ実数となるように位相を取る．

この取り方によって Kane のパラメータ $\hbar \langle S|p_x|X \rangle / m_0$ は実数となる。また, Dresselhaus SOI はよく知られた関数形となり, 係数は文献 [1] より

$$b_{41}^{6c6c} = i \langle S|p_x|X \rangle \langle S|p_x|X' \rangle \langle X|p_y|Z' \rangle \times (\text{実数})$$

であり, 実数に取れる。このように実験と比較しやすいパラメータが実数となるように位相を決める。また異なる位相の取り方はユニタリー変換で結びつく有効ハミルトニアンを与える [1, 108].

C.2.2 運動量演算子の行列要素

対称性のみを反映した行列要素

有効ハミルトニアンに現れる行列要素は点群 T_d の対称操作で変換できる行列要素である。例えば

$$\langle S|p_x|X \rangle = \langle S|p_y|Y \rangle = \langle S|p_z|Z \rangle$$

である。

逆に現れないパラメータの例は T_d の対称操作から

$$\langle S|p_x|S \rangle = -\langle S|p_x|S \rangle = 0$$

である。

C.2.3 位相の取り方も取り入れた行列要素

位相の取り方と対称性から価電子帯間の $\langle \nu|p_i|\nu' \rangle$ はゼロになる。 $\langle X|p_y|Z \rangle$ を例に考えてみる。

$$\begin{cases} \langle X|p_y|Z \rangle = \langle X|\sigma_{101}^{-1}\sigma_{101}p_y\sigma_{101}^{-1}\sigma_{101}|Z \rangle = \langle Z|p_y|X \rangle \\ ((\langle X|p_y|Z \rangle)^* = \langle Z|p_y|X \rangle) \\ ((\langle X|p_y|Z \rangle)^* = -\langle X|p_y|Z \rangle \quad \because |X \rangle, |Y \rangle, |Z \rangle \text{ の位相の取り方} \end{cases}$$

よって, $\langle X|p_y|Z \rangle = 0$ である。なお $|X' \rangle$ などは位置表示で純虚数のため, $\langle X|p_y|Z' \rangle$ などはノンゼロである。

C.2.4 (a) 伝導帯のみを記述する有効ハミルトニアン

有効ハミルトニアン

用いる有効ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_{\nu\nu'}^{\text{eff}} &= H_{\nu\nu'} + \frac{1}{2} \sum_{\beta \in B(a)} H'_{\nu\beta} H'_{\beta\nu'} \left[\frac{1}{E_\nu - E_\beta} + \frac{1}{E_{\nu'} - E_\beta} \right], \\ H_{\nu\nu'} &= \left[E_{\nu'}^{(a)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu\nu'} + H'_{\nu\nu'}, \\ H'_{\nu\nu'} &= \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\nu\nu'}, \\ \mathbf{P}_{\nu\nu'} &= \langle \nu|\mathbf{p}|\nu' \rangle, \end{aligned}$$

である。クラス $B_{(a)}$ は伝導帯以外のバンド全てである。

表現基底は s -like な軌道 $|S\rangle$ である ($\nu = \nu' = S$)。

摂動一次

摂動の一次は $\langle S|p|S\rangle$ である。しかし、この行列要素は対称性からゼロに等しい。たとえば、 T_d の対称操作の一つである i 軸周りの π 回転 C_{2i} を施すと

$$\begin{aligned}\langle S|p_j|S\rangle &= \langle S|C_{2i}^{-1}C_{2i}p_jC_{2i}^{-1}C_{2i}|S\rangle = \langle S| -p_j|S\rangle, \\ C_{2i}p_jC_{2i}^{-1} &= -p_j, \quad C_{2i}|S\rangle = |S\rangle, i \neq j,\end{aligned}$$

である。

摂動二次

摂動二次の項は

$$\begin{aligned}& \frac{1}{2} \sum_{\beta \in B_{(a)}} H'_{\nu\beta} H'_{\beta\nu'} \left[\frac{1}{E_\nu - E_\beta} + \frac{1}{E_{\nu'} - E_\beta} \right], \\ &= \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{\beta \in B_{(a)}} \langle S|p_i|\beta\rangle \langle \beta|p_j|S\rangle \times \frac{1}{E_c - E_\beta} \times 2, \\ &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{\beta \in B_{(a)}} \frac{\langle S|p_i|\beta\rangle \langle \beta|p_j|S\rangle}{E_c - E_\beta},\end{aligned}$$

である。

β として例えば価電子帯の X をとると、行列要素の部分は $\langle S|p_i|X\rangle \langle X|p_j|S\rangle$ である。この行列要素は $i \neq j$ である限り、どちらかの行列要素が対称性からゼロである。よって、 $i = j$ である。同様に対称性から $i = j = x$ の時、ノンゼロの行列要素は $\beta = X, X'$ など X -like な軌道 β_X によってのみ与えられる。 $i = j = y, z$ の時は Y, Z -like 軌道である。

さらに、 T_d の対称操作として、例えば S_{4z} を取ると

$$\langle S|p_x|X\rangle = \langle S|S_{4z}^{-1}S_{4z}p_xS_{4z}^{-1}S_{4z}|X\rangle = \langle S|p_y|Y\rangle = \langle S|p_z|Z\rangle,$$

である。以上から、摂動二次の項は

$$\begin{aligned}& \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{\beta \in B_{(a)}} \frac{\langle S|p_i|\beta\rangle \langle \beta|p_j|S\rangle}{E_c - E_\beta}, \\ &= \left[\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta_X \in B_{(a)}} \frac{\langle S|p_x|\beta_X\rangle \langle \beta_X|p_x|S\rangle}{E_c - E_{\beta_X}} \right] (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2),\end{aligned}$$

である。

ハミルトニアン $H_{(a)}$ は

$$H_{(a)} = E_c^{(a)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \left[\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta_X \in B_{(a)}} \frac{\langle S|p_x|\beta_X\rangle \langle \beta_X|p_x|S\rangle}{E_c - E_{\beta_X}} \right] k^2 \equiv E_c^{(a)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c},$$

$$\frac{m_0}{m_c} = 1 + \frac{2}{m_0} \sum_{\beta_X \in B_{(a)}} \frac{\langle S|p_x|\beta_X\rangle \langle \beta_X|p_x|S\rangle}{E_c - E_{\beta_X}},$$

である.

C.2.5 (b) 価電子帯のみを記述する有効ハミルトニアン

有効ハミルトニアン

用いる有効ハミルトニアンの表式は (a) と同じである. クラス $B_{(b)}$ は価電子帯以外のバンド全てである. 表現基底は p -like な軌道 $\{|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$ である ($\nu, \nu' = X, Y, Z$).

摂動一次

摂動の一次に含まれる行列要素は $\langle \nu|p|\nu'\rangle$ である. $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ の位置表示が実数となるようにとっているため現れない.

摂動二次

ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{\beta \in B_{(b)}} H'_{\nu\beta} H'_{\beta\nu'} \left[\frac{1}{E_\nu - E_\beta} + \frac{1}{E_{\nu'} - E_\beta} \right], \\ &= \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{\beta \in B_{(b)}} \langle \nu|p_i|\beta\rangle \langle \beta|p_j|\nu'\rangle \times \frac{1}{E_\nu - E_\beta} \times 2, \\ &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{\beta \in B_{(b)}} \frac{\langle \nu|p_i|\beta\rangle \langle \beta|p_j|\nu'\rangle}{E_\nu - E_\beta}, \end{aligned}$$

である.

$\nu = \nu' = X$ とする. Y, Z の場合は T_d の C_3 の操作によって x, y, z の巡回置換で得られる.

ゼロかどうか判定する行列要素の積は $\langle X|p_i|\beta\rangle \langle \beta|p_j|X\rangle$ である.

- $i \neq j$ なら二つの行列要素どちらかが対称性からゼロである.
- $i = j = x$ なら任意の β に対してノンゼロである.
- $i = j = y$ なら $\beta = \beta_Z$ でノンゼロである.
- $i = j = z$ の場合は, $i = j = y$ の時の値と等しい. 例えば, T_d の対称操作の内, σ_{011} (yz 平面に直交し, $z = -y$ を含む平面の鏡映) を用いると x は変えず, $y \rightarrow -z, z \rightarrow -y$ という形で y, z を入れ替えられる. そのため,

$$\langle X|p_y|\beta_Z\rangle \langle \beta_Z|p_y|X\rangle = \langle X| -p_z(-|\beta_Y\rangle)(-\langle \beta_Y|) - p_z|X\rangle = \langle X|p_z|\beta_Y\rangle \langle \beta_Y|p_z|X\rangle,$$

である。結果, $i = j = y, z$ は行列要素の部分で一致する。 $i = j = x$ の場合は任意の β を取れたため, 一般に $i = j = y, z$ の場合と行列要素の部分は異なる。

以上から $\nu = \nu' = X$ の場合, 摂動の二次の項は

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{\beta \in B_{(b)}} \frac{\langle X|p_i|\beta\rangle \langle \beta|p_j|X\rangle}{E_v - E_\beta} &= Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2), \\ L &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \in B_{(b)}} \frac{\langle X|p_x|\beta\rangle \langle \beta|p_x|X\rangle}{E_v - E_\beta}, \\ M &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta_Z \in B_{(b)}} \frac{\langle X|p_y|\beta_Z\rangle \langle \beta_Z|p_y|X\rangle}{E_v - E_{\beta_Y}}, \end{aligned}$$

である。 $\nu = \nu' = Y, Z$ の場合は T_d の C_3 の操作によって x, y, z の巡回置換で得られる。 また, T_d の対称操作によって Y, Z の場合でも L, M は変わらない。

$\nu = X, \nu' = Y$ とする。 他の場合は T_d の C_3 の操作によって x, y, z の巡回置換で得られる。

ゼロかどうか判定する行列要素の積は $\langle X|p_i|\beta\rangle \langle \beta|p_j|Y\rangle$ である。

- $i = x, j = y$ なら任意の β に対してノンゼロである。
- それ以外の場合は任意の β に対してゼロである。

以上から $\nu = X, \nu' = Y$ の場合, 摂動の二次の項は

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{\beta \in B_{(b)}} \frac{\langle X|p_i|\beta\rangle \langle \beta|p_j|Y\rangle}{E_v - E_\beta} &= Nk_x k_y, \\ N &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \in B_{(b)}} \frac{\langle X|p_x|\beta\rangle \langle \beta|p_y|Y\rangle}{E_v - E_\beta}, \end{aligned}$$

である。 他の場合は T_d の C_3 の操作によって x, y, z の巡回置換で得られる。 また, T_d の対称操作によって他の場合でも N は変わらない。

(b) の場合のまとめ

ハミルトニアン $H_{(b)}$ は

$$\begin{aligned} H_{(b)} &= \left(E_v^{(b)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \hat{1}_3 + \begin{bmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_z k_x \\ Nk_y k_x & Lk_y^2 + M(k_z^2 + k_x^2) & Nk_y k_z \\ Nk_x k_z & Nk_z k_y & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix}, \\ L &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \in B_{(b)}} \frac{\langle X|p_x|\beta\rangle \langle \beta|p_x|X\rangle}{E_v - E_\beta}, \\ M &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta_Z \in B_{(b)}} \frac{\langle X|p_y|\beta_Z\rangle \langle \beta_Z|p_y|X\rangle}{E_v - E_{\beta_Y}}, \\ N &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \in B_{(b)}} \frac{\langle X|p_x|\beta\rangle \langle \beta|p_y|Y\rangle}{E_v - E_\beta}, \end{aligned}$$

である. $\hat{1}_3$ は 3×3 の単位行列, 表現基底の並びは列に関して $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ である.

C.2.6 (c) での有効ハミルトニアン

有効ハミルトニアンの式と表現基底

用いる有効ハミルトニアンの表式は (a) と同じである. クラス B は伝導帯と価電子帯以外のバンド全てである. 表現基底は s, p -like な軌道 $\{|S\rangle, |X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$ である ($\nu, \nu' = S, X, Y, Z$).

有効ハミルトニアンのブロック分け

有効ハミルトニアンをブロックに分けた表記は

$$H_{(c)} = \begin{bmatrix} H_{1c} & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_{4v} \end{bmatrix},$$

である. 表現基底の並びは列に関して $\{|S\rangle, |X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$ である. H_{1c} は伝導帯のバンド端を持つブロックで, 行列のサイズは 1×1 である. 一重群でバンド端は Γ_1 の既約表現に従うため, $1c$ という添え字をつけた. H_{4v} は価電子帯のバンド端を持つブロックで, 行列のサイズは 3×3 である. 一重群でバンド端は Γ_4 の既約表現に従うため, $4v$ の添え字をつけた. H_{cv} は $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 項によってノンゼロの波数で伝導帯と価電子帯のバンド端を混成するブロックで, 行列のサイズは 1×3 である.

伝導帯のバンド端を持つブロック

$H_{(a)}$ の形が対称性のみで決まったことから, H_{1c} の波数に関する関数形は $H_{(a)}$ と同一である. 結果, H_{1c} は

$$H_{1c} = E_c^{(c)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m'_c},$$

$$\frac{m_0}{m'_c} = 1 + \frac{2}{m_0} \sum_{\beta_X \in B_{(c)}} \frac{\langle S|p_x|\beta_X\rangle \langle \beta_X|p_x|S\rangle}{E_c - E_{\beta_X}},$$

である. パラメータ m'_c を (a) でのパラメータ m_c を用いて表しておく. (c) ではクラス B に価電子帯を取り入れないため, パラメータで価電子帯の項を (a) でのパラメータから差し引かなければならない. そうすることで m'_c と m_c の関係が得られる. 実際, その関係は

$$\begin{aligned} \frac{m_0}{m'_c} &= 1 + \frac{2}{m_0} \sum_{\beta_X \in B_{(c)}} \frac{\langle S|p_x|\beta_X\rangle \langle \beta_X|p_x|S\rangle}{E_c - E_{\beta_X}}, \\ &= 1 + \frac{2}{m_0} \sum_{\beta_X \in B_{(a)}} \frac{\langle S|p_x|\beta_X\rangle \langle \beta_X|p_x|S\rangle}{E_c - E_{\beta_X}} - \frac{2}{m_0} \frac{\langle S|p_x|X\rangle \langle X|p_x|S\rangle}{E_c - E_v}, \\ &= \frac{m_0}{m_c} - \frac{2}{m_0} \frac{\langle S|p_x|X\rangle \langle X|p_x|S\rangle}{E_c - E_v}, \end{aligned}$$

である.

価電子帯のバンド端を持つブロック

H_{4v} の形も H_{1c} と全く同じように考えればよい. $H_{(b)}$ と波数依存性は同じで $H_{(b)}$ のパラメータから伝導帯の項を差し引けば, H_{4v} である. よって

$$H_{4v} = \left(E_v^{(c)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \hat{1}_3 + \begin{bmatrix} L'k_x^2 + M'(k_y^2 + k_z^2) & N'k_x k_y & N'k_z k_x \\ N'k_y k_x & L'k_y^2 + M'(k_z^2 + k_x^2) & N'k_y k_z \\ N'k_x k_z & N'k_z k_y & L'k_z^2 + M'(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix},$$

$$L' = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \in B(c)} \frac{\langle X|p_x|\beta\rangle \langle \beta|p_x|X\rangle}{E_v - E_\beta} = L - \frac{\hbar^2}{m_0^2} \frac{\langle X|p_x|S\rangle \langle S|p_x|X\rangle}{E_v - E_c},$$

$$M' = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta_Z \in B(c)} \frac{\langle X|p_y|\beta_Z\rangle \langle \beta_Z|p_y|X\rangle}{E_v - E_{\beta_Z}} = M,$$

$$N' = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \in B(c)} \frac{\langle X|p_x|\beta\rangle \langle \beta|p_y|Y\rangle}{E_v - E_\beta} = N - \frac{\hbar^2}{m_0^2} \frac{\langle X|p_x|S\rangle \langle S|p_y|Y\rangle}{E_v - E_c},$$

である. M' は単に記号を統一的に書くために書いた. M は Z -like な軌道でノンゼロとなるため, Z -like な軌道を含まない伝導帯がクラス A に入っても変わらない.

非対角ブロックの摂動一次

摂動の一次は

$$\frac{\hbar}{m_0} \sum_{i=x,y,z} k_i \langle \nu|p_i|\nu'\rangle,$$

である. 話を固定するために $\nu = S, \nu' = X$ とする. すると, 対称性から

$$\frac{\hbar}{m_0} k_x \langle S|p_x|X\rangle,$$

のみが残るとわかる. $\nu' = Y, Z$ の場合も単に p_x をそれぞれ p_y, p_z に置き換えるのみである. さらに対称性から

$$\langle S|p_x|X\rangle = \langle S|p_y|Y\rangle = \langle S|p_z|Z\rangle,$$

である. 結果, 摂動の一次による項は

$$\begin{bmatrix} Pk_x & Pk_y & Pk_z \end{bmatrix},$$

$$P = \frac{\hbar}{m_0} \langle S|p_x|X\rangle,$$

である.

非対角ブロックの摂動二次

話を固定するために $\nu = S, \nu' = X$ とする. $\nu' = Y, Z$ は下記の $i = j, i \neq j$ それぞれで議論する. ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{\beta \in B(c)} H'_{S\beta} H'_{\beta X} \left[\frac{1}{E_c - E_\beta} + \frac{1}{E_v - E_\beta} \right], \\ &= \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{\beta \in B(c)} \langle S|p_i|\beta \rangle \langle \beta|p_j|X \rangle \left[\frac{1}{E_c - E_\beta} + \frac{1}{E_v - E_\beta} \right], \end{aligned}$$

である.

$i = j$ のとき

$\langle S|p_i|\beta \rangle \neq 0$ であるためには $|\beta \rangle$ が i -like な軌道である必要がある. しかし, その場合では $\langle \beta|p_i|X \rangle$ が対称性からゼロになる. よって, $i = j$ のときの項は現れない. $\nu' = Y, Z$ の時でも同様である.

$i \neq j$ のとき

- i, j のどちらかが x の時
 - $i = x$ の時: $j = y, z$ に対して対称性から $\langle \beta_X|p_j|X \rangle = 0$ である.
 - $j = x$ の時: 対称性から $\langle \beta_S|p_x|X \rangle \neq 0$ だが, $\langle S|p_i|\beta_S \rangle = 0$ である.
- $i = y, j = z$ の時: 対称性から $\langle S|p_y|\beta_Y \rangle \langle \beta_Y|p_z|X \rangle \neq 0$ である.
- $i = z, j = y$ の時: 対称性から $\langle S|p_z|\beta_Z \rangle \langle \beta_Z|p_y|X \rangle \neq 0$ である.

さらに対称性から $\langle S|p_y|\beta_Y \rangle \langle \beta_Y|p_z|X \rangle = \langle S|p_z|\beta_Z \rangle \langle \beta_Z|p_y|X \rangle$ である. そのため, $i = y, j = z$ と $i = z, j = y$ のパラメータは等しい.

$\nu' = Y, Z$ の時は巡回置換で得られる.

結果, 摂動の二次の項は

$$\begin{aligned} & [Bk_y k_z \quad Bk_z k_x \quad Bk_x k_y], \\ B &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \in B(c)} \langle S|p_y|\beta_Y \rangle \langle \beta_Y|p_z|X \rangle \left[\frac{1}{E_c - E_\beta} + \frac{1}{E_v - E_\beta} \right], \end{aligned}$$

である. なおこの B は Kane の B パラメータと呼ばれており, 空間反転対称性のあるダイヤモンド構造 (点群 O_h) でゼロになる. なぜなら, パリティ奇の因子が奇数個あるためである. また, 位相の取り方から純虚数 $B^* = -B$ である.

(c) のまとめ

ハミルトニアン $H_{(c)}$ は

$$H_{(c)} = \begin{bmatrix} H_{1c} & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_{4v} \end{bmatrix},$$

である．対角ブロックは

$$H_{1c} = E_c^{(c)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m'_c},$$

$$\frac{m_0}{m'_c} = \frac{m_0}{m_c} - \frac{2}{m_0} \frac{\langle S|p_x|\beta_X\rangle \langle \beta_X|p_x|S\rangle}{E_c - E_v},$$

および

$$H_{4v} = \left(E_v^{(c)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \hat{1}_3 + \begin{bmatrix} L'k_x^2 + M'(k_y^2 + k_z^2) & N'k_x k_y & N'k_z k_x \\ N'k_y k_x & L'k_y^2 + M'(k_z^2 + k_x^2) & N'k_y k_z \\ N'k_x k_z & N'k_z k_y & L'k_z^2 + M'(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix},$$

$$L' = L - \frac{\hbar^2}{m_0^2} \frac{\langle X|p_x|S\rangle \langle S|p_x|X\rangle}{E_v - E_c},$$

$$M' = M,$$

$$N' = N - \frac{\hbar^2}{m_0^2} \frac{\langle X|p_x|S\rangle \langle S|p_y|Y\rangle}{E_v - E_c},$$

である． m_c は $H_{(a)}$ で， L, M, N は $H_{(b)}$ で定義されているパラメータである．非対角ブロックは

$$H_{cv} = \begin{bmatrix} Pk_x + Bk_y k_z & Pk_y + Bk_z k_x & Pk_z + Bk_x k_y \end{bmatrix},$$

$$P = \frac{\hbar}{m_0} \langle S|p_x|X\rangle,$$

$$B = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \in B_{(c)}} \langle S|p_y|\beta_Y\rangle \langle \beta_Y|p_z|X\rangle \left[\frac{1}{E_c - E_\beta} + \frac{1}{E_v - E_\beta} \right],$$

である．

C.2.7 (b') での有効ハミルトニアン

有効ハミルトニアン

用いる有効ハミルトニアンの表式は

$$H_{\sigma\sigma'}^{\text{eff}} = H_{\nu\nu'} + \frac{1}{2} \sum_{\beta, \sigma_\beta \in B} H'_{\sigma\sigma_\beta} H'_{\sigma_\beta\nu'} \left[\frac{1}{E_\nu - E_\beta} + \frac{1}{E_{\nu'} - E_\beta} \right],$$

$$H_{\nu\nu'} = \left[E_{\nu'}^{(b')} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'} + H'_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'},$$

$$H'_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'} = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'} + \Delta_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'},$$

$$\mathbf{P}_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'} = \langle \nu|\mathbf{p}|\nu'\rangle \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \langle \sigma|\boldsymbol{\sigma}|\sigma'\rangle \times \langle \nu|\nabla V_0(\mathbf{r})|\nu'\rangle,$$

$$\Delta_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle \sigma|\boldsymbol{\sigma}|\sigma'\rangle \cdot \langle \nu|\nabla V_0 \times \mathbf{p}|\nu'\rangle,$$

である．クラス $B_{(b')}$ は価電子帯以外のバンド全てである．表現基底は $|X, \uparrow\rangle, |X, \downarrow\rangle, |Y, \uparrow\rangle, |Y, \downarrow\rangle, |Z, \uparrow\rangle, |Z, \downarrow\rangle$ である ($\nu, \nu' = S, X, Y, Z$ と $\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$)．

SOI の取り扱い

有効ハミルトニアンは

$$H_{(b')} = (\text{SOI によらない項}) + (\text{SOI による項}),$$

である.

$H'_{\nu\nu',\sigma\sigma'}$ の項を摂動とみなして有効ハミルトニアンを導く. すると, 現れる項は

- $H'_{\nu\nu',\sigma\sigma'}$ の一次
 - $\mathbf{k} \cdot \langle \nu | \mathbf{p} | \nu' \rangle \delta_{\sigma\sigma'}$ の一次: (SOI によらない項) に含まれる
 - $\mathbf{P}_{\nu\nu',\sigma\sigma'}$ の中の SOI 一次: (SOI による項) に含まれる
 - $\Delta_{\nu\nu',\sigma\sigma'}$ の一次: (SOI による項) に含まれる
- $H'_{\nu\nu',\sigma\sigma'}$ の二次
 - $\mathbf{k} \cdot \langle \nu | \mathbf{p} | \nu' \rangle \delta_{\sigma\sigma'}$ の二次: (SOI によらない項) に含まれる
 - Remote バンドの SOI

である.

ここでは SOI に関して Remote バンドの項を無視する. この近似は次の予想に基づく. SOI の表式を見ればわかる通り, 分母に真空中のエネルギーギャップが存在し, そのギャップは 0.5 MeV 程度である. さらに Remote バンドはエネルギー分母の分, さらに小さくなる. そのため, 無視する. 計算は可能であるが, 群論を用いた系統的な解析 [1] ですら載っておらず, パラメータの値も未知である.

結果, SOI は $H'_{\nu\nu',\sigma\sigma'}$ のクラス A 内の項のみ計算していく.

SOI によらない項

(SOI によらない項) は $H_{\nu\nu',\sigma\sigma'}$ の $\delta_{\nu\nu'}\delta_{\sigma\sigma'}$ の項, そして $H'_{\nu\nu',\sigma\sigma'}$ の二次から現れる $\mathbf{k} \cdot \langle \nu | \mathbf{p} | \nu' \rangle \delta_{\sigma\sigma'}$ の二次である. 結果, 各スピン $\uparrow, \downarrow$ ごとに $H_{(b)}$ と全く同じ計算をすることで得られる. $H_{(b)}$ の行列要素を $|X, \uparrow\rangle, |X, \downarrow\rangle, |Y, \uparrow\rangle, |Y, \downarrow\rangle, |Z, \uparrow\rangle, |Z, \downarrow\rangle$ の順番に並べて

$$\begin{aligned}
 & \begin{array}{cccccc}
 |X, \uparrow\rangle & |X, \downarrow\rangle & |Y, \uparrow\rangle & |Y, \downarrow\rangle & |Z, \uparrow\rangle & |Z, \downarrow\rangle \\
 \text{(SOI によらない項)} = & \begin{bmatrix}
 h_x^{LM} & 0 & h_z^N & 0 & h_y^N & 0 \\
 & h_x^{LM} & 0 & h_z^N & 0 & h_y^N \\
 & & h_y^{LM} & 0 & h_x^N & 0 \\
 & & \dagger & h_y^{LM} & 0 & h_x^N \\
 & & & & h_z^{LM} & 0 \\
 & & & & & h_z^{LM}
 \end{bmatrix}, \\
 h_p^{LM} = & E_v^{(b')} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + Lk_p^2 + M(k_q^2 + k_r^2), \\
 h_p^N = & Nk_q k_r,
 \end{aligned}
 \end{aligned}$$

である. 左下三角部分の $\dagger$ は右上三角部分に対してエルミート共役を取ることによって得られると示している. ただし, h_p^{LM} と h_p^N で p, q, r は x, y, z の巡回置換でとる.

SOI による項 - Δ の項

計算すべきハミルトニアンの行列要素は $H'_{\nu\nu', \sigma\sigma'}$ の一次に現れる SOI の項から

$$\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \frac{\hbar}{4m_0c^2} \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \times \langle \nu | \nabla V_0(\mathbf{r}) | \nu' \rangle,$$

$$\Delta_{\nu\nu', \sigma\sigma'} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \cdot \langle \nu | \nabla V_0 \times \mathbf{p} | \nu' \rangle,$$

である.

計算対象は

$$\Delta_{\nu\nu', \sigma\sigma'} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \cdot \langle \nu | \nabla V_0 \times \mathbf{p} | \nu' \rangle,$$

$$(\nabla V_0 \times \mathbf{p})_x = \frac{\partial V_0}{\partial y} p_z - \frac{\partial V_0}{\partial z} p_y,$$

$$(\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y = \frac{\partial V_0}{\partial z} p_x - \frac{\partial V_0}{\partial x} p_z,$$

$$(\nabla V_0 \times \mathbf{p})_z = \frac{\partial V_0}{\partial x} p_y - \frac{\partial V_0}{\partial y} p_x,$$

である. 以下, $\nu, \nu' = X, Y, Z$ と取って行列要素を調べていく. $\nabla V_0 \times \mathbf{p}$ の成分から調べていく演算子は $\frac{\partial V_0}{\partial y} p_z, \frac{\partial V_0}{\partial z} p_x, \frac{\partial V_0}{\partial x} p_y$ である. 残りの項はそれらの演算子の行列要素と同一の変換則に従う.

ゼロ, ノンゼロとなる行列要素を判定する際に $\forall g \in T_d$ の対称操作に対して

$$V_0(g^{-1}\mathbf{r}) = V_0(\mathbf{r}),$$

である. (結晶ポテンシャルが点群 T_d の対称性を持つという意味である.)

対角 $\nu = \nu'$ の例として $\nu = \nu' = X$ の時

- $\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} p_z | X \rangle$ は y 軸周りの π 回転 C_{2y} によって

$$\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} p_z | X \rangle = (-\langle X |) \frac{\partial V_0(C_{2y}^{-1}\mathbf{r})}{\partial y} (-p_z)(-\langle X |) = -\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} p_z | X \rangle,$$

であるため, $\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} p_z | X \rangle = 0$ である.

- $\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} p_x | X \rangle$ は z 軸周りの π 回転 C_{2z} によって

$$\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} p_x | X \rangle = -\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} p_x | X \rangle,$$

であるため, $\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} p_x | X \rangle = 0$ である.

- $\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial x} p_y | X \rangle$ は x 軸周りの π 回転 C_{2x} によって

$$\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial x} p_y | X \rangle = -\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial x} p_y | X \rangle,$$

であるため, $\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial x} p_y | X \rangle = 0$ である.

$\nu = \nu' = Y, Z$ の時でも同様にゼロである。よって, $\Delta_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} = 0$ である。

非対角 $\nu \neq \nu'$ の例として $\nu = X, \nu' = Y$ の時, T_d の対称性から

$$\begin{aligned}\langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_x | Y \rangle &= \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} p_z - \frac{\partial V_0}{\partial z} p_y | Y \rangle = 0, \\ \langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | Y \rangle &= \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} p_x - \frac{\partial V_0}{\partial x} p_z | Y \rangle = 0, \\ \langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_z | Y \rangle &= \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial x} p_y - \frac{\partial V_0}{\partial y} p_x | Y \rangle \neq 0,\end{aligned}$$

である。そのため

$$\begin{aligned}\Delta_{\sigma\sigma'}^{XY} &= \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle \sigma | \sigma_z | \sigma' \rangle \langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_z | Y \rangle, \\ &\equiv \frac{\Delta_g}{3i} \langle \sigma | \sigma_z | \sigma' \rangle, \\ \Delta_g &= \frac{3i\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_z | Y \rangle = -\frac{3i\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | Z \rangle,\end{aligned}$$

である。

他の行列要素は

$$\begin{aligned}\Delta_{\sigma\sigma'}^{XZ} &= \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle \sigma | \sigma_y | \sigma' \rangle \langle X | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_y | Z \rangle = -\frac{\Delta_g}{3i} \langle \sigma | \sigma_y | \sigma' \rangle, \\ \Delta_{\sigma\sigma'}^{YZ} &= \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle \sigma | \sigma_x | \sigma' \rangle \langle Y | (\nabla V_0 \times \mathbf{p})_x | Z \rangle = \frac{\Delta_g}{3i} \langle \sigma | \sigma_x | \sigma' \rangle,\end{aligned}$$

である。

以上をまとめると,

$$\Delta_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} = \frac{\Delta_g}{3i} \begin{bmatrix} O & \sigma_z & -\sigma_y \\ -\sigma_z & O & \sigma_x \\ \sigma_y & -\sigma_x & O \end{bmatrix}_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'},$$

である。ブロックの並びは $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ である。 O は 2×2 のゼロ行列である。

SOI による項 - P に含まれる項

計算対象は

$$\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \times \langle \nu | \nabla V_0(\mathbf{r}) | \nu' \rangle,$$

である。

対角 $\nu = \nu'$ の例として $\langle X | \nabla V_0(\mathbf{r}) | X \rangle$ について

$$\begin{aligned}\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial x} | X \rangle &= 0, \\ \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} | X \rangle &= 0, \\ \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} | X \rangle &= 0,\end{aligned}$$

である. $\nu = \nu' = Y, Z$ の時でも同様にゼロである. よって, $\langle \nu | \nabla V_0(\mathbf{r}) | \nu \rangle = \mathbf{0}$ である.

非対角 $\nu \neq \nu'$ の例として $\nu = X, \nu' = Y$

$$\begin{aligned}\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial x} | Y \rangle &= 0, \\ \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} | Y \rangle &= 0, \\ \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} | Y \rangle &\neq 0,\end{aligned}$$

である. そのため

$$\begin{aligned}& \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \times \langle X | \nabla V_0(\mathbf{r}) | Y \rangle, \\ &= \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \left[\langle \sigma | \sigma_y | \sigma' \rangle \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} | Y \rangle \mathbf{e}_x - \langle \sigma | \sigma_x | \sigma' \rangle \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} | Y \rangle \mathbf{e}_y \right], \\ &= C'_k \langle \sigma | k_x \sigma_y - k_y \sigma_x | \sigma' \rangle, \\ C'_k &\equiv \frac{\hbar}{m_0} \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} | Y \rangle,\end{aligned}$$

である.

$\nu = X, \nu' = Z$

$$\begin{aligned}\langle X | \frac{\partial V_0}{\partial x} | Z \rangle &= 0, \\ \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} | Z \rangle &\neq 0, \\ \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} | Z \rangle &= 0,\end{aligned}$$

である. そのため

$$\begin{aligned}& \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \times \langle X | \nabla V_0(\mathbf{r}) | Z \rangle, \\ &= \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \left[-\langle \sigma | \sigma_z | \sigma' \rangle \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} | Z \rangle \mathbf{e}_x + \langle \sigma | \sigma_x | \sigma' \rangle \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} | Z \rangle \mathbf{e}_z \right], \\ &= C'_k \langle \sigma | -k_x \sigma_z + k_z \sigma_x | \sigma' \rangle, \\ \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} | Z \rangle &= \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial z} | Y \rangle \quad \because [011] \text{ 面に関する鏡映操作 } \sigma_{011},\end{aligned}$$

である.

$\nu = Y, \nu' = Z$

$$\begin{aligned}\langle Y | \frac{\partial V_0}{\partial x} | Z \rangle &= \langle X | \frac{\partial V_0}{\partial y} | Z \rangle \neq 0 \quad \because [110] \text{ 面に関する鏡映操作 } \sigma_{011}, \\ \langle Y | \frac{\partial V_0}{\partial y} | Z \rangle &= 0, \\ \langle Y | \frac{\partial V_0}{\partial z} | Z \rangle &= 0,\end{aligned}$$

である. そのため

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \frac{\hbar}{4m_0c^2} \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \times \langle Y | \nabla V_0(\mathbf{r}) | Z \rangle, \\ &= \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \frac{\hbar}{4m_0c^2} \left[\langle \sigma | \sigma_z | \sigma' \rangle \langle Y | \frac{\partial V_0}{\partial x} | Z \rangle \mathbf{e}_y - \langle \sigma | \sigma_y | \sigma' \rangle \langle Y | \frac{\partial V_0}{\partial x} | Z \rangle \mathbf{e}_z \right], \\ &= C'_k \langle \sigma | k_y \sigma_z - k_z \sigma_y | \sigma' \rangle, \end{aligned}$$

である.

以上から

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \frac{\hbar}{4m_0c^2} \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \times \langle \nu | \nabla V_0(\mathbf{r}) | \nu' \rangle, \\ &= C'_k \begin{bmatrix} O & k_x \sigma_y - k_y \sigma_x & -k_x \sigma_z + k_z \sigma_x \\ k_x \sigma_y - k_y \sigma_x & O & k_y \sigma_z - k_z \sigma_y \\ -k_x \sigma_z + k_z \sigma_x & k_y \sigma_z - k_z \sigma_y & O \end{bmatrix}_{\nu\nu'}^{\sigma\sigma'}, \end{aligned}$$

である.

まとめ

有効ハミルトニアンは

$$H_{(b')} = (\text{SOI によらない項}) + (\text{SOI による項}),$$

であり

$$\begin{aligned} & \begin{matrix} |X, \uparrow\rangle & |X, \downarrow\rangle & |Y, \uparrow\rangle & |Y, \downarrow\rangle & |Z, \uparrow\rangle & |Z, \downarrow\rangle \end{matrix} \\ (\text{SOI によらない項}) &= \begin{bmatrix} h_x^{LM} & 0 & h_z^N & 0 & h_y^N & 0 \\ & h_x^{LM} & 0 & h_z^N & 0 & h_y^N \\ & & h_y^{LM} & 0 & h_x^N & 0 \\ & \dagger & & h_y^{LM} & 0 & h_x^N \\ & & & & h_z^{LM} & 0 \\ & & & & & h_z^{LM} \end{bmatrix}, \\ h_p^{LM} &= E_v^{(b')} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + Lk_p^2 + M(k_q^2 + k_r^2), \\ h_p^N &= Nk_q k_r, \end{aligned}$$

と SOI に関しては一次までで

$$\begin{aligned} (\text{SOI による項}) &= \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \frac{\hbar}{4m_0c^2} \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle \times \langle \nu | \nabla V_0(\mathbf{r}) | \nu' \rangle + \Delta_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'}, \\ &= C'_k \begin{bmatrix} O & k_x \sigma_y - k_y \sigma_x & -k_x \sigma_z + k_z \sigma_x \\ k_x \sigma_y - k_y \sigma_x & O & k_y \sigma_z - k_z \sigma_y \\ -k_x \sigma_z + k_z \sigma_x & k_y \sigma_z - k_z \sigma_y & O \end{bmatrix}_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} + \frac{\Delta_g}{3i} \begin{bmatrix} O & \sigma_z & -\sigma_y \\ -\sigma_z & O & \sigma_x \\ \sigma_y & -\sigma_x & O \end{bmatrix}_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'}, \end{aligned}$$

である.

C.2.8 (b'') での有効ハミルトニアン

次に (b') での表現基底 $|X, \uparrow\rangle, |X, \downarrow\rangle, |Y, \uparrow\rangle, |Y, \downarrow\rangle, |Z, \uparrow\rangle, |Z, \downarrow\rangle$ を $|3/2, 3/2\rangle_v, |3/2, 1/2\rangle_v, |3/2, -1/2\rangle_v, |3/2, -3/2\rangle_v, |1/2, 1/2\rangle_v, |1/2, -1/2\rangle_v$ にユニタリー変換する。

有効ハミルトニアンとユニタリー変換

$|3/2, 3/2\rangle_v, |3/2, 1/2\rangle_v, |3/2, -1/2\rangle_v, |3/2, -3/2\rangle_v, |1/2, 1/2\rangle_v, |1/2, -1/2\rangle_v$ による有効ハミルトニアン H^{eff} を $H_{(b'')}$ と書く。 $|X, \uparrow\rangle, |X, \downarrow\rangle, |Y, \uparrow\rangle, |Y, \downarrow\rangle, |Z, \uparrow\rangle, |Z, \downarrow\rangle$ で表現したハミルトニアンを $H_{(b')}$ と書く。

ユニタリー変換 U は

$$\begin{aligned} \langle jM_j | H^{\text{eff}} | j'M'_j \rangle &= \sum_{\nu, \sigma} \sum_{\nu', \sigma'} \langle jM_j | \nu\sigma \rangle \langle \nu\sigma | H^{\text{eff}} | \nu'\sigma' \rangle \langle \nu'\sigma' | j'M'_j \rangle, \\ &= \sum_{\nu, \sigma} \sum_{\nu', \sigma'} \langle \nu\sigma | jM_j \rangle^* \langle \nu\sigma | H^{\text{eff}} | \nu'\sigma' \rangle \langle \nu'\sigma' | j'M'_j \rangle \\ [H_{(b'')}]_{M_j M'_j}^{jj'} &= \sum_{\nu, \sigma} \sum_{\nu', \sigma'} U_{\sigma M_j}^* \nu_j [H_{(b')}]_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} U_{\sigma' M'_j}^{\nu'j'}, \\ &= \sum_{\nu, \sigma} \sum_{\nu', \sigma'} [U^\dagger]_{M_j \sigma}^{j\nu} [H_{(b')}]_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} U_{\sigma' M'_j}^{\nu'j'}, \end{aligned}$$

で定義される。行列で書くと

$$H_{(b'')} = U^\dagger H_{(b')} U,$$

である。 U の定義は

$$U_{\sigma' M'_j}^{\nu' j'} = \langle \nu'\sigma' | j'M'_j \rangle,$$

であり、あからさまに成分を書くと

$$U = \begin{bmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{6} & 0 & 0 & -1/\sqrt{3} \\ 0 & -1/\sqrt{6} & 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{3} & 0 \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{6} & 0 & 0 & i/\sqrt{3} \\ 0 & -i/\sqrt{6} & 0 & -i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{3} & 0 \\ 0 & \sqrt{2/3} & 0 & 0 & -1/\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2/3} & 0 & 0 & 1/\sqrt{3} \end{bmatrix},$$

である。

SOI による項のユニタリー変換

(b') の (SOI による項) をユニタリー変換すると

$$\begin{aligned}
 (\text{SOI による項})_{(b'')} &= C'_k U^\dagger \begin{bmatrix} O & k_x \sigma_y - k_y \sigma_x & -k_x \sigma_z + k_z \sigma_x \\ k_x \sigma_y - k_y \sigma_x & O & k_y \sigma_z - k_z \sigma_y \\ -k_x \sigma_z + k_z \sigma_x & k_y \sigma_z - k_z \sigma_y & O \end{bmatrix} U \\
 &\quad + \frac{\Delta_g}{3i} U^\dagger \begin{bmatrix} O & \sigma_z & -\sigma_y \\ -\sigma_z & O & \sigma_x \\ \sigma_y & -\sigma_x & O \end{bmatrix} U,
 \end{aligned}$$

である.

Δ_g の項は

$$\frac{\Delta_g}{3i} U^\dagger \begin{bmatrix} O & \sigma_z & -\sigma_y \\ -\sigma_z & O & \sigma_x \\ \sigma_y & -\sigma_x & O \end{bmatrix} U = \frac{\Delta_g}{3} \text{diag}[1, 1, 1, 1, -2, -2],$$

である. $\text{diag}[x, y, \dots]$ は $x, y, \dots$ を対角成分に持つ対角行列である.

C'_k の項では, 後の表式の見やすさのために C'_k を

$$C'_k = -\frac{\sqrt{3}}{2} C_k,$$

によって C_k へ変換する. ユニタリー変換すると

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\sqrt{3}}{2} C_k U^\dagger \begin{bmatrix} O & k_x \sigma_y - k_y \sigma_x & -k_x \sigma_z + k_z \sigma_x \\ k_x \sigma_y - k_y \sigma_x & O & k_y \sigma_z - k_z \sigma_y \\ -k_x \sigma_z + k_z \sigma_x & k_y \sigma_z - k_z \sigma_y & O \end{bmatrix} U, \\
 &= C_k \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2}k_+ & k_z & -\frac{\sqrt{3}}{2}k_- & \frac{1}{2\sqrt{2}}k_+ & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z \\ & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}k_+ & -k_z & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_+ \\ & & 0 & -\frac{1}{2}k_+ & \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_- & 0 \\ & & & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z & -\frac{1}{2\sqrt{2}}k_- \\ \dagger & & & & 0 & 0 \\ & & & & & 0 \end{bmatrix},
 \end{aligned}$$

である. 左下三角にある $\dagger$ は右上三角のエルミート共役であることを表す.

以上をまとめると

$$(\text{SOI による項})_{(b'')} = \frac{\Delta_g}{3} \text{diag}[1, 1, 1, 1, -2, -2] + C_k \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2}k_+ & k_z & -\frac{\sqrt{3}}{2}k_- & \frac{1}{2\sqrt{2}}k_+ & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z \\ & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}k_+ & -k_z & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_+ \\ & & 0 & -\frac{1}{2}k_+ & \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_- & 0 \\ & & & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z & -\frac{1}{2\sqrt{2}}k_- \\ \dagger & & & & 0 & 0 \\ & & & & & 0 \end{bmatrix},$$

である.

SOI によらない項のユニタリー変換

計算するユニタリー変換は

$$\begin{aligned}
 (\text{SOI によらない項})_{(b'')} &= U^\dagger (\text{SOI によらない項})_{(b')} U, \\
 |X, \uparrow\rangle \quad |X, \downarrow\rangle \quad |Y, \uparrow\rangle \quad |Y, \downarrow\rangle \quad |Z, \uparrow\rangle \quad |Z, \downarrow\rangle \\
 (\text{SOI によらない項})_{(b')} &= \begin{bmatrix} h_x^{LM} & 0 & h_z^N & 0 & h_y^N & 0 \\ & h_x^{LM} & 0 & h_z^N & 0 & h_y^N \\ & & h_y^{LM} & 0 & h_x^N & 0 \\ & & \dagger & h_y^{LM} & 0 & h_x^N \\ & & & & h_z^{LM} & 0 \\ & & & & & h_z^{LM} \end{bmatrix}, \\
 h_p^{LM} &= E_v^{(b'')} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + Lk_p^2 + M(k_q^2 + k_r^2), \\
 h_p^N &= Nk_q k_r,
 \end{aligned}$$

である.

$|3/2, 3/2\rangle_v, |3/2, 1/2\rangle_v, |3/2, -1/2\rangle_v, |3/2, -3/2\rangle_v, |1/2, 1/2\rangle_v, |1/2, -1/2\rangle_v$ をそれぞれ 1, 2, 3, 4, 5, 6 と番号づける.

HH, LH の対角成分は

$$\begin{aligned}
 (1, 1) &= \frac{L+M}{2} (k_x^2 + k_y^2) + Mk_z^2 + E_v^{(b'')} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \\
 (2, 2) &= \frac{L+5M}{6} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{2L+M}{3} k_z^2 + E_v^{(b'')} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \\
 (3, 3) &= (2, 2), \\
 (4, 4) &= (1, 1),
 \end{aligned}$$

である.

HH, LH の非対角成分は

$$\begin{aligned}
 (1, 2) &= -\frac{\sqrt{3}}{3} Nk_z k_-, \\
 (1, 3) &= -\frac{\sqrt{3}}{6} (L-M) (k_x^2 - k_y^2) + i\frac{\sqrt{3}}{3} Nk_x k_y, \\
 (1, 4) &= 0, \\
 (2, 3) &= 0, \\
 (2, 4) &= (1, 3), \\
 (3, 4) &= -(1, 2),
 \end{aligned}$$

である.

SO の対角と非対角成分は

$$\begin{aligned}(5, 5) &= \frac{L + 2M}{3}k^2 + E_v^{(b'')} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \\(6, 6) &= (5, 5), \\(5, 6) &= 0,\end{aligned}$$

である.

HH, LH-SO の非対角ブロックの成分は

$$\begin{aligned}(1, 5) &= \frac{\sqrt{6}}{6}Nk_zk_-, \\(1, 6) &= \frac{\sqrt{6}}{6}(L - M)(k_x^2 - k_y^2) - \frac{\sqrt{6}}{3}iNk_xk_y, \\(2, 5) &= \frac{\sqrt{2}}{6}(L - M)(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \\(2, 6) &= -\frac{\sqrt{2}}{2}Nk_zk_-, \\(3, 5) &= (2, 6)^*, \\(3, 6) &= -(2, 5), \\(4, 5) &= -(1, 6)^*, \\(4, 6) &= (1, 5)^*,\end{aligned}$$

である.

Luttinger パラメータの導入

次に Luttinger パラメータを導入する. 定義は

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1 &= \frac{L + 2M}{3} + \frac{\hbar^2}{2m_0}, \\-\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2 &= \frac{L - M}{6}, \\-\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 &= \frac{N}{6},\end{aligned}$$

である.

Luttinger パラメータを使うと, HH, LH の対角成分に現れているパラメータは

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + \gamma_2) &= \frac{L + M}{2} + \frac{\hbar^2}{2m_0}, \\-\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2) &= M + \frac{\hbar^2}{2m_0}, \\-\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - \gamma_2) &= \frac{L + 5M}{6} + \frac{\hbar^2}{2m_0}, \\-\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2) &= \frac{2L + M}{3} + \frac{\hbar^2}{2m_0},\end{aligned}$$

である. よって

$$\begin{aligned}
(1, 1) &= \frac{L+M}{2} (k_x^2 + k_y^2) + Mk_z^2 + E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + \gamma_2) (k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - 2\gamma_2) k_z^2 + E_v, \\
(2, 2) &= \frac{L+5M}{6} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{2L+M}{3} k_z^2 + E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - \gamma_2) (k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + 2\gamma_2) k_z^2 + E_v, \\
(3, 3) &= (2, 2), \\
(4, 4) &= (1, 1),
\end{aligned}$$

である.

Luttinger パラメータを使うと, HH, LH の非対角成分で現れているパラメータは

$$\begin{aligned}
2\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 &= -\frac{\sqrt{3}}{3} N, \\
\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 &= -\frac{\sqrt{3}}{6} (L - M), \\
-2i\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 &= i\frac{\sqrt{3}}{3} N,
\end{aligned}$$

である. よって

$$\begin{aligned}
(1, 2) &= -\frac{\sqrt{3}}{3} N k_z k_- = 2\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 k_z k_-, \\
(1, 3) &= -\frac{\sqrt{3}}{6} (L - M) (k_x^2 - k_y^2) + i\frac{\sqrt{3}}{3} N k_x k_y = \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) - 2i\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 k_x k_y, \\
(1, 4) &= 0, \\
(2, 3) &= 0, \\
(2, 4) &= (1, 3), \\
(3, 4) &= -(1, 2),
\end{aligned}$$

である.

Luttinger パラメータを使うと, SO の対角と非対角成分は

$$\begin{aligned}
(5, 5) &= \frac{L+2M}{3} k^2 + E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 k^2 + E_v, \\
(6, 6) &= (5, 5), \\
(5, 6) &= 0,
\end{aligned}$$

である.

Luttinger パラメータを使うと, HH, LH-SO の非対角ブロックで現れているパラメータは

$$\begin{aligned}
 -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 &= \frac{\sqrt{6}}{6}N, \\
 2i\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 &= -\frac{\sqrt{6}}{3}iN, \\
 3\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 &= -\frac{\sqrt{2}}{2}N, \\
 -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2 &= \frac{\sqrt{6}}{6}(L-M), \\
 -\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2 &= \frac{\sqrt{2}}{6}(L-M),
 \end{aligned}$$

である. よって

$$\begin{aligned}
 (1, 5) &= \frac{\sqrt{6}}{6}Nk_zk_-, \\
 &= -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3k_zk_-, \\
 (1, 6) &= \frac{\sqrt{6}}{6}(L-M)(k_x^2 - k_y^2) - \frac{\sqrt{6}}{3}iNk_xk_y, \\
 &= -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) + 2i\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3k_xk_y, \\
 (2, 5) &= \frac{\sqrt{2}}{6}(L-M)(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \\
 &= -\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \\
 (2, 6) &= -\frac{\sqrt{6}}{2}Nk_zk_-, \\
 &= 3\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3k_zk_-, \\
 (3, 5) &= (2, 6)^*, \\
 (3, 6) &= -(2, 5), \\
 (4, 5) &= -(1, 6)^*, \\
 (4, 6) &= (1, 5)^*,
 \end{aligned}$$

である.

まとめ

有効ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H_{(b'')} &= U^\dagger H_{(b')} U, \\
 &= (\text{SOI によらない項})_{(b'')} + (\text{SOI による項})_{(b'')},
 \end{aligned}$$

であり

$$(\text{SOI によらない項})_{(b'')} = \begin{bmatrix} (1,1) & (1,2) & (1,3) & 0 & (1,5) & (1,6) \\ & (2,2) & 0 & (1,3) & (2,5) & (2,6) \\ & & (2,2) & -(1,2) & (2,6)^* & -(2,5) \\ & \dagger & & (1,1) & -(1,6)^* & (1,5)^* \\ & & & & (5,5) & 0 \\ & & & & & (5,5) \end{bmatrix},$$

$$(1,1) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2 + E_v^{(b'')},$$

$$(2,2) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2 + E_v^{(b'')},$$

$$(5,5) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1 k^2 + E_v^{(b'')},$$

$$(1,2) = 2\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 k_z k_-,$$

$$(1,3) = \sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) - 2i\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 k_x k_y,$$

$$(1,5) = -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 k_z k_-,$$

$$(1,6) = -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) + 2i\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 k_x k_y,$$

$$(2,5) = -\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2),$$

$$(2,6) = 3\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 k_z k_-,$$

そして,

$$(\text{SOI による項})_{(b'')} = \frac{\Delta_g}{3} \text{diag}[1, 1, 1, 1, -2, -2] \\ + C_k \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2}k_+ & k_z & -\frac{\sqrt{3}}{2}k_- & \frac{1}{2\sqrt{2}}k_+ & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z \\ & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}k_+ & -k_z & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_+ \\ & & 0 & -\frac{1}{2}k_+ & \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_- & 0 \\ & & & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z & -\frac{1}{2\sqrt{2}}k_- \\ & \dagger & & & 0 & 0 \\ & & & & & 0 \end{bmatrix},$$

である.

任意の値 $E_v^{(b'')}$ を $E_v^{(b'')} = -\Delta_g/3$ にとることで HH, LH の対角ブロックでの $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ におけるエネルギーを基準に取れる.

Luttinger パラメータにおける伝導帯の項

Luttinger パラメータにおける伝導帯の項を特定しておく.

Luttinger パラメータは再掲すると

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1 &= \frac{L+2M}{3} + \frac{\hbar^2}{2m_0}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2 &= \frac{L-M}{6}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 &= \frac{N}{6}, \end{aligned}$$

である. パラメータ L, M, N は伝導帯の項をあからさまに取り出しておく, その定義から

$$\begin{aligned} L' &= L - \frac{\hbar^2}{m_0^2} \frac{\langle X|p_x|S\rangle \langle S|p_x|X\rangle}{E_v - E_c}, \\ M' &= M, \\ N' &= N - \frac{\hbar^2}{m_0^2} \frac{\langle X|p_x|S\rangle \langle S|p_y|Y\rangle}{E_v - E_c}, \end{aligned}$$

である. M は対称性から β 和の中で伝導帯の項を含まない. Kane の行列要素 $P = \hbar \langle S|p_x|X\rangle / m_0$ を用いると

$$\begin{aligned} L' &= L - \frac{P^2}{E_v - E_c}, \\ M' &= M, \\ N' &= N - \frac{P^2}{E_v - E_c}, \end{aligned}$$

である. さらに伝導帯下端と価電子帯頂上で形成されるエネルギーギャップ E_g を用いると, $E_v - E_c = -E_g$ であるため

$$\begin{aligned} L' &= L + \frac{P^2}{E_g}, \\ M' &= M, \\ N' &= N + \frac{P^2}{E_g}, \end{aligned}$$

である.

L', M', N' に対応する Reduced バンドパラメータ $\gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3$ を

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_1 &= \frac{L'+2M'}{3} + \frac{\hbar^2}{2m_0}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2 &= \frac{L'-M'}{6}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 &= \frac{N'}{6}, \end{aligned}$$

で定義する.

$\gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3$ を $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ で表すと

$$\begin{aligned}\gamma'_1 &= \gamma_1 - \frac{1}{3} \frac{E_P}{E_g}, \\ \gamma'_2 &= \gamma_2 - \frac{1}{6} \frac{E_P}{E_g}, \\ \gamma'_3 &= \gamma_3 - \frac{1}{6} \frac{E_P}{E_g},\end{aligned}$$

である。ただし

$$E_P \equiv \frac{2m_0}{\hbar^2} P^2,$$

とした。 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, E_P, E_g$ は測定値である。

C.2.9 (a'') での有効ハミルトニアン

次に (a'') での表現基底 $|S, \uparrow\rangle, |S, \downarrow\rangle$ の有効ハミルトニアンを導く。 (a) での有効ハミルトニアンは SOI を無視したが, (b'') で見たように SOI はバンド端のギャップ Δ_g を開くため, (a) での有効ハミルトニアンをユニタリー変換してもエネルギー分母で SOI を取り入れられない。そこで改めて計算する。

有効ハミルトニアン

有効ハミルトニアンの表式は

$$\begin{aligned}H_{jj'}^{\text{eff}} &= H_{jj'} + \frac{1}{2} \sum_{j\beta \in B} H'_{jj\beta} H'_{j\beta j'} \left[\frac{1}{E_j - E_{j\beta}} + \frac{1}{E_{j'} - E_{j\beta}} \right], \\ H_{jj'} &= \left[E_{j'}^{(a'')} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'} + H'_{jj'}, \\ H'_{jj'} &= \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{jj'}, \\ \mathbf{P}_{jj'} &= \langle j | \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0(\mathbf{r}) | j' \rangle,\end{aligned}$$

である。またバンド端のインデックス j, j_β は $j = (S, \sigma), j_\beta = (3/2, 3/2)_v \dots$ である。

$|j_\beta\rangle$ として HH, LH, SO をとると (b'') で見たように $\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V_0 \times \hat{\mathbf{p}})$ を対角化する基底であるため, 上記の表式で $\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V_0 \times \hat{\mathbf{p}})$ は E_j に既に含まれている。エネルギー分母は SOI を考慮すると例えば

$$\begin{aligned}E_S - E_{\text{HH, LH}} &= E_g, \\ E_S - E_{\text{SO}} &= E_g + \Delta_g,\end{aligned}$$

である。

摂動一次

摂動の一次は $\langle S | \mathbf{p} | S \rangle, \langle S | \nabla V_0 | S \rangle$ に比例する。しかし, この行列要素は対称性からゼロに等しい。

摂動二次

SOI として非自明な項は $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ と $\langle S | \nabla V_0 | p\text{-like} \rangle$ の積の項である．しかし、この項は (b'') で無視したオーダーの項であるため、ここでも無視する．

ここでは後の (c'') のため、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 二次による有効質量まで導く．特に

$$\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in B_{a''}} \frac{\langle S, \sigma | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \sigma' \rangle}{E_c - E_{j_\beta}},$$

で

$$|j_\beta\rangle = |3/2, 3/2\rangle_v, \dots |1/2, -1/2\rangle_v,$$

の項を計算する．

計算の際には

$$\langle S, \sigma | p_i | X \rangle = \langle S, \sigma | p_x | X \rangle \delta_{i,x},$$

などを用いる．

HH での行列要素は

$$\begin{aligned} & \langle S, \sigma | p_i | 3/2, 3/2 \rangle_v \langle 3/2, 3/2 | p_j | S, \sigma' \rangle, \\ &= \langle S, \sigma | p_i \frac{-1}{\sqrt{2}} (|X, \uparrow\rangle + i |Y, \uparrow\rangle) \frac{-1}{\sqrt{2}} (\langle X, \uparrow| - i \langle Y, \uparrow|) p_j | S, \sigma' \rangle, \\ &= \frac{1}{2} \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\uparrow} |\langle S | p_x | X \rangle|^2 (\delta_{ix} + i\delta_{iy})(\delta_{jx} - i\delta_{jy}), \\ &= \frac{1}{2} \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\uparrow} |\langle S | p_x | X \rangle|^2 (\delta_{ix}\delta_{jx} + \delta_{iy}\delta_{jy} - i\delta_{ix}\delta_{jy} + i\delta_{iy}\delta_{jx}), \end{aligned}$$

と

$$\begin{aligned} & \langle S, \sigma | p_i | 3/2, -3/2 \rangle_v \langle 3/2, -3/2 | p_j | S, \sigma' \rangle, \\ &= \frac{1}{2} \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\downarrow} |\langle S | p_x | X \rangle|^2 (\delta_{ix}\delta_{jx} + \delta_{iy}\delta_{jy} + i\delta_{ix}\delta_{jy} - i\delta_{iy}\delta_{jx}), \end{aligned}$$

である．

LH での行列要素は

$$\begin{aligned} & \langle S, \sigma | p_i | 3/2, 1/2 \rangle_v \langle 3/2, 1/2 | p_j | S, \sigma' \rangle, \\ &= |\langle S | p_x | X \rangle|^2 \left[\frac{-1}{\sqrt{6}} \delta_{\sigma\downarrow} (\delta_{ix} + i\delta_{iy}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{iz} \right] \cdot \left[\frac{-1}{\sqrt{6}} \delta_{\sigma'\downarrow} (\delta_{jx} - i\delta_{jy}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \delta_{\sigma'\uparrow} \delta_{jz} \right], \end{aligned}$$

そして

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{-1}{\sqrt{6}} \delta_{\sigma\downarrow} (\delta_{ix} + i\delta_{iy}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{iz} \right] \cdot \left[\frac{-1}{\sqrt{6}} \delta_{\sigma'\downarrow} (\delta_{jx} - i\delta_{jy}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \delta_{\sigma'\uparrow} \delta_{jz} \right], \\
&= \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\downarrow} \times \frac{1}{6} (\delta_{ix} + i\delta_{iy}) (\delta_{jx} - i\delta_{jy}) \\
&\quad + \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\uparrow} \times \frac{-1}{3} (\delta_{ix} + i\delta_{iy}) \delta_{jz} \\
&\quad + \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\downarrow} \times \frac{-1}{3} \delta_{iz} (\delta_{jx} - i\delta_{jy}) \\
&\quad + \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\uparrow} \times \frac{2}{3} \delta_{iz} \delta_{jz},
\end{aligned}$$

である。また,

$$\begin{aligned}
& \langle S, \sigma | p_i | 3/2, -1/2 \rangle_v \langle 3/2, -1/2 | p_j | S, \sigma' \rangle, \\
&= | \langle S | p_x | X \rangle |^2 \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \delta_{\sigma\uparrow} (\delta_{ix} - i\delta_{iy}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{iz} \right] \cdot \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \delta_{\sigma'\uparrow} (\delta_{jx} + i\delta_{jy}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \delta_{\sigma'\downarrow} \delta_{jz} \right],
\end{aligned}$$

そして

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \delta_{\sigma\uparrow} (\delta_{ix} - i\delta_{iy}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{iz} \right] \cdot \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \delta_{\sigma'\uparrow} (\delta_{jx} + i\delta_{jy}) + \sqrt{\frac{2}{3}} \delta_{\sigma'\downarrow} \delta_{jz} \right], \\
&= \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\uparrow} \times \frac{1}{6} (\delta_{ix} - i\delta_{iy}) (\delta_{jx} + i\delta_{jy}) \\
&\quad + \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\downarrow} \times \frac{-1}{3} (\delta_{ix} - i\delta_{iy}) \delta_{jz} \\
&\quad + \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\uparrow} \times \frac{-1}{3} \delta_{iz} (\delta_{jx} + i\delta_{jy}) \\
&\quad + \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\downarrow} \times \frac{2}{3} \delta_{iz} \delta_{jz},
\end{aligned}$$

である。

以上から

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in \text{HH,LH}} \frac{\langle S, \uparrow | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \uparrow \rangle}{E_c - E_{j_\beta}}, \\
&= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \frac{| \langle S | p_x | X \rangle |^2}{E_c - E_v} \\
&\quad \times \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \left[\frac{1}{2} (\delta_{ix} \delta_{jx} + \delta_{iy} \delta_{jy} + i\delta_{ix} \delta_{jy} - i\delta_{iy} \delta_{jx}) + \frac{2}{3} \delta_{iz} \delta_{jz} + \frac{1}{6} (\delta_{ix} - i\delta_{iy}) (\delta_{jx} + i\delta_{jy}) \right], \\
&= \frac{P^2}{E_g} \left[\frac{k_x^2 + k_y^2 + i k_x k_y - i k_y k_x}{2} + \frac{2}{3} k_z^2 + \frac{k_x^2 + k_y^2 - i k_y k_x + i k_x k_y}{6} \right], \\
&= \frac{2}{3} \frac{P^2}{E_g} k^2,
\end{aligned}$$

である。

また

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in \text{HH,LH}} \frac{\langle S, \downarrow | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \downarrow \rangle}{E_c - E_{j_\beta}}, \\
&= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in \text{HH,LH}} \frac{\langle S, \uparrow | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \uparrow \rangle}{E_c - E_{j_\beta}}, \\
&= \frac{2}{3} \frac{P^2}{E_g} k^2,
\end{aligned}$$

であり,

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in \text{HH,LH}} \frac{\langle S, \uparrow | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \downarrow \rangle}{E_c - E_{j_\beta}}, \\
&= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in \text{HH,LH}} \frac{\langle S, \downarrow | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \uparrow \rangle}{E_c - E_{j_\beta}}, \\
&= 0,
\end{aligned}$$

である.

SO での行列要素は

$$\begin{aligned}
& \langle S, \sigma | p_i | 1/2, 1/2 \rangle_v \langle 1/2, 1/2 | p_j | S, \sigma' \rangle, \\
&= \frac{|\langle S | p_x | X \rangle|^2}{3} [\delta_{\sigma\downarrow}(\delta_{ix} + i\delta_{iy}) + \delta_{\sigma\uparrow}\delta_{iz}] \cdot [\delta_{\sigma'\downarrow}(\delta_{jx} - i\delta_{jy}) + \delta_{\sigma'\uparrow}\delta_{jz}],
\end{aligned}$$

そして

$$\begin{aligned}
& [\delta_{\sigma\downarrow}(\delta_{ix} + i\delta_{iy}) + \delta_{\sigma\uparrow}\delta_{iz}] \cdot [\delta_{\sigma'\downarrow}(\delta_{jx} - i\delta_{jy}) + \delta_{\sigma'\uparrow}\delta_{jz}], \\
&= \delta_{\sigma\downarrow}\delta_{\sigma'\downarrow} \times (\delta_{ix} + i\delta_{iy})(\delta_{jx} - i\delta_{jy}) \\
&\quad + \delta_{\sigma\downarrow}\delta_{\sigma'\uparrow} \times (\delta_{ix} + i\delta_{iy})\delta_{jz} \\
&\quad + \delta_{\sigma\uparrow}\delta_{\sigma'\downarrow} \times \delta_{iz}(\delta_{jx} - i\delta_{jy}) \\
&\quad + \delta_{\sigma\uparrow}\delta_{\sigma'\uparrow} \times \delta_{iz}\delta_{jz},
\end{aligned}$$

である. また

$$\begin{aligned}
& \langle S, \sigma | p_i | 1/2, -1/2 \rangle_v \langle 1/2, -1/2 | p_j | S, \sigma' \rangle \\
&= \frac{|\langle S | p_x | X \rangle|^2}{3} [\delta_{\sigma\uparrow}(\delta_{ix} - i\delta_{iy}) - \delta_{\sigma\downarrow}\delta_{iz}] \cdot [\delta_{\sigma'\uparrow}(\delta_{jx} + i\delta_{jy}) - \delta_{\sigma'\downarrow}\delta_{jz}],
\end{aligned}$$

そして

$$\begin{aligned}
& [\delta_{\sigma\uparrow}(\delta_{ix} - i\delta_{iy}) - \delta_{\sigma\downarrow}\delta_{iz}] \cdot [\delta_{\sigma'\uparrow}(\delta_{jx} + i\delta_{jy}) - \delta_{\sigma'\downarrow}\delta_{jz}], \\
&= \delta_{\sigma\uparrow}\delta_{\sigma'\uparrow} \times (\delta_{ix} - i\delta_{iy})(\delta_{jx} + i\delta_{jy}) \\
&\quad - \delta_{\sigma\uparrow}\delta_{\sigma'\downarrow} \times (\delta_{ix} - i\delta_{iy})\delta_{jz} \\
&\quad - \delta_{\sigma\downarrow}\delta_{\sigma'\uparrow} \times \delta_{iz}(\delta_{jx} + i\delta_{jy}) \\
&\quad + \delta_{\sigma\downarrow}\delta_{\sigma'\downarrow} \times \delta_{iz}\delta_{jz},
\end{aligned}$$

である。

以上から

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in \text{SO}} \frac{\langle S, \uparrow | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \uparrow \rangle}{E_c - E_{j_\beta}} \\
&= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \frac{1}{3} \frac{|\langle S | p_x | X \rangle|^2}{E_c - E_{\text{SO}}} \times \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j [\delta_{iz} \delta_{jz} + (\delta_{ix} - i\delta_{iy})(\delta_{jx} + i\delta_{jy})] \\
&= \frac{1}{3} \frac{P^2}{E_g + \Delta_g} k^2,
\end{aligned}$$

である。また

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in \text{SO}} \frac{\langle S, \downarrow | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \downarrow \rangle}{E_c - E_{j_\beta}}, \\
&= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in \text{SO}} \frac{\langle S, \uparrow | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \uparrow \rangle}{E_c - E_{j_\beta}}, \\
&= \frac{1}{3} \frac{P^2}{E_g + \Delta_g} k^2,
\end{aligned}$$

であり,

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in \text{SO}} \frac{\langle S, \uparrow | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \downarrow \rangle}{E_c - E_{j_\beta}}, \\
&= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in \text{SO}} \frac{\langle S, \downarrow | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \uparrow \rangle}{E_c - E_{j_\beta}}, \\
&= 0,
\end{aligned}$$

である。

まとめると

$$\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j=x,y,z} k_i k_j \sum_{j_\beta \in \text{HH,LH,SO}} \frac{\langle S, \sigma | p_i | j_\beta \rangle \langle j_\beta | p_j | S, \sigma' \rangle}{E_c - E_{j_\beta}} = \left[\frac{2}{3} \frac{P^2}{E_g} + \frac{1}{3} \frac{P^2}{E_g + \Delta_g} \right] k^2 \delta_{\sigma\sigma'},$$

である。よって、クラス A に HH, LH, SO を入れる (c'') で、伝導帯のパラメータは SOI を取り入れると

$$\frac{m_0}{m'_c} = \frac{m_0}{m_c} - \frac{E_P}{3} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_g} \right),$$

の m'_c である。 m_c は (a'') のパラメータであり、実験や第一原理計算の値を用いる。

C.2.10 (c'') での有効ハミルトニアン

有効ハミルトニアンの構成

有効ハミルトニアンは

$$H_{(c'')} = \begin{bmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_v \end{bmatrix},$$

である．表現基底の並び $|S, \uparrow\rangle, |S, \downarrow\rangle, |3/2, 3/2\rangle_v, |3/2, 1/2\rangle_v, |3/2, -1/2\rangle_v, |3/2, -3/2\rangle_v, |1/2, 1/2\rangle_v, |1/2, -1/2\rangle_v$ である．

(c'') での有効ハミルトニアンを得るためには $|S, \uparrow\rangle, |S, \downarrow\rangle, |X, \uparrow\rangle, |X, \downarrow\rangle, |Y, \uparrow\rangle, |Y, \downarrow\rangle, |Z, \uparrow\rangle, |Z, \downarrow\rangle$ を用いた表現

$$\tilde{H}_{(c'')} = \begin{bmatrix} \tilde{H}_c & \tilde{H}_{cv} \\ \tilde{H}_{cv}^\dagger & \tilde{H}_v \end{bmatrix},$$

を $|S, \uparrow\rangle, |S, \downarrow\rangle, |3/2, 3/2\rangle_v, |3/2, 1/2\rangle_v, |3/2, -1/2\rangle_v, |3/2, -3/2\rangle_v, |1/2, 1/2\rangle_v, |1/2, -1/2\rangle_v$ の表現 $H_{(c'')}$ に変換する．そのためには, (b'') での 6×6 のユニタリー変換を $U_{(b'')}$ と書くと,

$$\begin{bmatrix} \hat{1}_2 & \\ & U_{(b'')} \end{bmatrix},$$

のユニタリー変換を $\tilde{H}_{(c'')}$ に施せばよい．より具体的には

$$\begin{bmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{1}_2 & \\ & U_{(b'')} \end{bmatrix}^\dagger \begin{bmatrix} \tilde{H}_c & \tilde{H}_{cv} \\ \tilde{H}_{cv}^\dagger & \tilde{H}_v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{1}_2 & \\ & U_{(b'')} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{H}_c & \tilde{H}_{cv} U_{(b'')} \\ U_{(b'')}^\dagger \tilde{H}_{cv}^\dagger & U_{(b'')}^\dagger \tilde{H}_v U_{(b'')} \end{bmatrix},$$

を計算する．

ただし, 対角ブロックでのユニタリー変換の結果は (a''), (b'') からわかっている．非対角ブロックでの SOI の項は後で説明するように, 比較的小さいとして取り入れない．

対角ブロック

対角ブロック H_c, H_v はそれぞれ (a''), (b'') でクラス A に入れていなかったバンド端を取り入れ, パラメータを再定義するだけである．そのため H_c は (a'') より

$$H_c = E_c^{(c'')} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m'_c},$$

$$\frac{m_0}{m'_c} = \frac{m_0}{m_c} - \frac{E_P}{3} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_g} \right),$$

であり, m_c は測定値である．

そして, H_v は (b'') より

$$H_v = \begin{bmatrix} (1,1) & (1,2) & (1,3) & 0 & (1,5) & (1,6) \\ & (2,2) & 0 & (1,3) & (2,5) & (2,6) \\ & & (2,2) & -(1,2) & (2,6)^* & -(2,5) \\ & \dagger & & (1,1) & -(1,6)^* & (1,5)^* \\ & & & & (5,5) & 0 \\ & & & & & (5,5) \end{bmatrix} \\ + \frac{\Delta_g}{3} \text{diag}[1, 1, 1, 1, -2, -2] \\ + C_k \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2}k_+ & k_z & -\frac{\sqrt{3}}{2}k_- & \frac{1}{2\sqrt{2}}k_+ & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z \\ & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}k_+ & -k_z & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_+ \\ & & 0 & -\frac{1}{2}k_+ & \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_- & 0 \\ & & & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z & -\frac{1}{2\sqrt{2}}k_- \\ \dagger & & & & 0 & 0 \\ & & & & & 0 \end{bmatrix},$$

であり, ただし

$$\begin{aligned} (1,1) &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 + \gamma'_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 - 2\gamma'_2)k_z^2 + E_v^{(c'')}, \\ (2,2) &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 - \gamma'_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 + 2\gamma'_2)k_z^2 + E_v^{(c'')}, \\ (5,5) &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_1 k^2 + E_v^{(c'')}, \\ (1,2) &= 2\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_z k_-, \\ (1,3) &= \sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2(k_x^2 - k_y^2) - 2i\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_x k_y, \\ (1,5) &= -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_z k_-, \\ (1,6) &= -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2(k_x^2 - k_y^2) + 2i\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_x k_y, \\ (2,5) &= -\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \\ (2,6) &= 3\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_z k_-, \end{aligned}$$

である. パラメータは

$$\begin{aligned} \gamma'_1 &= \gamma_1 - \frac{1}{3}\frac{E_P}{E_g}, \\ \gamma'_2 &= \gamma_2 - \frac{1}{6}\frac{E_P}{E_g}, \\ \gamma'_3 &= \gamma_3 - \frac{1}{6}\frac{E_P}{E_g}, \\ E_P &= \frac{2m_0}{\hbar^2}P^2, \end{aligned}$$

であり, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, E_P, E_g, C_k, \Delta_g$ は測定値である.

非対角ブロック

右上の非対角ブロックであれば, $U_{(b'')}$ が右からかかるので

$$H_{cv} = \tilde{H}_{cv} U_{(b'')},$$

である.

SOI の項を計算すると, SOI の一次で HH, LH ブロックと SO ブロックで Kane の行列要素が変わる. しかし, その区別は文献 [1] の群論による系統的な解析ですら現れていない. おそらく SOI であるため, Kane の行列要素に比べて十分小さいとして無視されていると考えられる.

他にも SOI の二次の項が文献 [1] で示されているが, そもそも一次を無視しているため二次を取り入れる理由がない.

以上から, H_{cv} で SOI のゼロ次とする.

H_{cv} は (b'') と同様にユニタリー変換から求める.

(c) からユニタリー変換前の非対角ブロックは $|S, \uparrow\rangle, |S, \downarrow\rangle$ を行のラベルにし, $|X, \uparrow\rangle, |X, \downarrow\rangle, |Y, \uparrow\rangle, |Y, \downarrow\rangle, |Z, \uparrow\rangle, |Z, \downarrow\rangle$ を列の並びとして

$$\tilde{H}_{cv} = \begin{bmatrix} h_1 & 0 & h_2 & 0 & h_3 & 0 \\ 0 & h_1 & 0 & h_2 & 0 & h_3 \end{bmatrix},$$

である. ただし

$$\begin{aligned} h_1 &= Pk_x + Bk_y k_z, \\ h_2 &= Pk_y + Bk_z k_x, \\ h_3 &= Pk_z + Bk_x k_y, \end{aligned}$$

である.

ユニタリー変換すると

$$H_{cv} = \begin{bmatrix} h_{cv1} & h_{cv2} & \frac{1}{\sqrt{3}}h_{cv3} & 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}}h_{cv2} & -\sqrt{\frac{2}{3}}h_{cv3} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}h_{cv1} & h_{cv2} & h_{cv3} & \sqrt{\frac{2}{3}}h_{cv1} & \frac{1}{\sqrt{2}}h_{cv2} \end{bmatrix},$$

であり,

$$\begin{aligned} h_{cv1} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ + \frac{1}{\sqrt{2}}B'k_z k_-, \\ h_{cv2} &= \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z + i\sqrt{\frac{2}{3}}B'k_x k_y, \\ h_{cv3} &= \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_- + \frac{1}{\sqrt{2}}B'k_z k_+, \end{aligned}$$

である. ただし, 位相の取り方と B の定義

$$B = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \in B(c)} \langle S|p_y|\beta_Y\rangle \langle \beta_Y|p_z|X\rangle \left[\frac{1}{E_c - E_\beta} + \frac{1}{E_v - E_\beta} \right],$$

から B が純虚数なので, 実数 $B' \equiv -iB$ とした.

文献 [1] は SOI の二次の効果のために B' を $B_{8v}^{\pm}, B_{7v}$ と区別している. しかし, SOI を無視するため, ここで区別する必要はない. 文献 [1] との整合性は

$$B' = (B_{8v}^+ + B_{7v})/2, \quad B_{8v}^- = 0,$$

で取れると予想されるが, 比較的小さい効果のためこれ以上の検証を行わない. 実際, この関係式は III-V 族半導体で近似的に成り立っている (文献 [1] の p.74 参照).

エネルギーの原点の取り方

$\mathbf{k} = \mathbf{0}$ の固有値

$$E_c^{(c'')}, E_c^{(c'')} - E_g, E_c^{(c'')} - E_g - \Delta_g, \quad E_v^{(c'')} = E_c^{(c'')} - E_g,$$

からエネルギーの原点は $E_c^{(c'')} = 0$ とする.

まとめ

有効ハミルトニアンは

$$H_{(c'')} = \begin{bmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_v \end{bmatrix},$$

である. 各ブロックは

$$\begin{aligned} H_c &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m'_c}, \\ \frac{m_0}{m'_c} &= \frac{m_0}{m_c} - \frac{E_P}{3} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_g} \right), \\ H_v &= \begin{bmatrix} (1,1) & (1,2) & (1,3) & 0 & (1,5) & (1,6) \\ & (2,2) & 0 & (1,3) & (2,5) & (2,6) \\ & & (2,2) & -(1,2) & (2,6)^* & -(2,5) \\ & \dagger & & (1,1) & -(1,6)^* & (1,5)^* \\ & & & & (5,5) & 0 \\ & & & & & (5,5) \end{bmatrix} \\ &\quad - \text{diag}[E_g, E_g, E_g, E_g, E_g + \Delta_g, E_g + \Delta_g] \\ &\quad + C_k \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2}k_+ & k_z & -\frac{\sqrt{3}}{2}k_- & \frac{1}{2\sqrt{2}}k_+ & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z \\ & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}k_+ & -k_z & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_+ \\ & & 0 & -\frac{1}{2}k_+ & \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}k_- & 0 \\ & & & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}k_z & -\frac{1}{2\sqrt{2}}k_- \\ & \dagger & & & 0 & 0 \\ & & & & & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

であり, ただし

$$\begin{aligned}
(1, 1) &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 + \gamma'_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 - 2\gamma'_2)k_z^2, \\
(2, 2) &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 - \gamma'_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 + 2\gamma'_2)k_z^2, \\
(5, 5) &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_1 k^2, \\
(1, 2) &= 2\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_z k_-, \\
(1, 3) &= \sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2(k_x^2 - k_y^2) - 2i\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_x k_y, \\
(1, 5) &= -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_z k_-, \\
(1, 6) &= -\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2(k_x^2 - k_y^2) + 2i\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_x k_y, \\
(2, 5) &= -\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \\
(2, 6) &= 3\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_z k_-,
\end{aligned}$$

である. パラメータは

$$\begin{aligned}
\gamma'_1 &= \gamma_1 - \frac{1}{3}\frac{E_P}{E_g}, \\
\gamma'_2 &= \gamma_2 - \frac{1}{6}\frac{E_P}{E_g}, \\
\gamma'_3 &= \gamma_3 - \frac{1}{6}\frac{E_P}{E_g}, \\
E_P &= \frac{2m_0}{\hbar^2}P^2,
\end{aligned}$$

である. そして,

$$H_{cv} = \begin{bmatrix} h_{cv1} & h_{cv2} & \frac{1}{\sqrt{3}}h_{cv3} & 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}}h_{cv2} & -\sqrt{\frac{2}{3}}h_{cv3} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}h_{cv1} & h_{cv2} & h_{cv3} & \sqrt{\frac{2}{3}}h_{cv1} & \frac{1}{\sqrt{2}}h_{cv2} \end{bmatrix},$$

であり,

$$\begin{aligned}
h_{cv1} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ + \frac{1}{\sqrt{2}}B'k_z k_-, \\
h_{cv2} &= \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z + i\sqrt{\frac{2}{3}}B'k_x k_y, \\
h_{cv3} &= \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_- + \frac{1}{\sqrt{2}}B'k_z k_+,
\end{aligned}$$

である. 以上で本論で用いた半導体のハミルトニアン H_0 [式 (3.9)] が導かれた.

付録 D

対称性による有効ハミルトニアンの別導出法

D.1 Theory of Invariants による導出

この節では Theory of Invariants [1, 69, 86, 102, 109] を用いて n 型強磁性半導体の伝導帯の電子状態に関する有効ハミルトニアン H_{CB} を導く。

Theory of Invariants においても 4.3.1 節と同様に母体半導体の点群 T_d の基本とし、磁化と波数を摂動的に取り入れる。なお以下の既約表現の記号や番号は文献 [1, 86] に合わせる。有効ハミルトニアンの構築方法は次の通りである。ハミルトニアンは一般にスピンなど自由度を表す行列と波数などの物理量の積から成る。これらの物理量が属する群の既約表現を特定し、積表現をとり既約分解する。そして、全対称表現を含む積の組み合わせを残し、最後にバンド電子の時間反転対称性と合致する項のみがハミルトニアンの項として許される。

T_d の二重群の既約表現で伝導帯 (のバンド端) の対称性に対応する既約表現は Γ_6 である。そして、 H_{CB} はこの Γ_6 の基底関数の行列表示で得られるが、 H_{CB} が全対称表現に属するために、その行列は積表現 $\Gamma_6 \times \Gamma_6$ に従う。この積表現は T_d の一重群の既約表現 Γ_1 から Γ_5 のうち一次元と二次元の既約表現 Γ_1, Γ_4 によって $\Gamma_6 \times \Gamma_6 = \Gamma_1 + \Gamma_4$ の形に既約分解できる。 Γ_1 の基底関数はスピンに依存せず、この基底関数による行列表示はスピン空間の 2×2 の単位演算子 $\hat{1}_\sigma$ に従う。 Γ_4 の基底関数はスピンに依存し、 z 軸方向を量子化軸として、この基底関数による行列表示は Pauli 行列 $\hat{\sigma}_i (i = x, y, z)$ に従う。以上から、 H_{CB} の一般形は

$$H_{CB} = H_{CB,1} + H_{CB,4},$$

$$H_{CB,I} = \sum_{\nu_I} a_{I,\nu_I} \sum_{\lambda_I} X_{\lambda_I} K_{\lambda_I,\nu_I}^*, \quad I = 1, 4,$$

である。 I は T_d の一重群の既約表現の番号の指標、 X_{λ_I} は表現基底を表す行列であり、 $\lambda_1 = 1$ に対しては $\hat{1}_\sigma$ 、 $\{X_{\lambda_4}\}$ に対しては $\{\hat{\sigma}_{\lambda_4} : \lambda_4 = x, y, z\}$ である。 K_{λ_I,ν_I}^* は波数や電磁場、磁化の成分の積で構成されるテンソル K_{λ_I,ν_I} の複素共役である。表 D.1 に波数 $\mathbf{k}$ 二次、磁化 $\mathbf{M}$ について一次までのテンソルをまとめた。指標 ν_I は同一の既約表現に属する複数のテンソルを区別するための指標である。 a_{I,ν_I} は対称性以外から決定できる係数であり、物質パラメータを表す。

表 D.1 各既約表現に属するテンソル $\{K_{\lambda_I, \nu_I}\}$ の表. $I = 1$ に対して単位行列 $X_{\lambda_1} = \hat{1}_\sigma$, $I = 4$ に対しては Pauli 行列 $X_{\lambda_4} = \hat{\sigma}_{\lambda_4}$, $\lambda_4 = x, y, z$ であり, $I = 4$ はもともと二重群の既約表現を分解して出てきているため, 伝導帯のスピン自由度を表している. 伝導帯の有効ハミルトニアンはこれらテンソルと対応する行列の積で構成される.

I	λ_I	K_{λ_I, ν_I}
1	1	$1 (\nu_1 = 1), \quad k^2 (\nu_1 = 2)$
4	x, y, z	$\{M_x, M_y, M_z\} (\nu_4 = 1)$ $\{k^2 M_x, k^2 M_y, k^2 M_z\} (\nu_4 = 2)$ $\{k_x^2 M_x, k_y^2 M_y, k_z^2 M_z\} (\nu_4 = 3)$ $\{k_x(k_y M_y + k_z M_z), k_y(k_z M_z + k_x M_x), k_z(k_x M_x + k_y M_y)\} (\nu_4 = 4)$

表 D.1 の行列とテンソルをかけ合わせると点群の対称性を満たした項が得られる. 物理的にはさらに波数 $\mathbf{k}$, スピン $\hat{\sigma}$, 磁化 $\mathbf{M}$ を反転させる時間反転対称性も要請され, 時間反転対称性を反映させて符号の変化しない項のみ残る.

以上から, $H_{\text{CB}, I}$ は

$$\begin{aligned}
 H_{\text{CB}, 1} &= (a_{1,1} 1 + a_{1,2} k^2) \hat{1}_{2 \times 2}, \\
 H_{\text{CB}, 4} &= a_{4,1} (M_x \hat{\sigma}_x + \text{c.p.}) + a_{4,2} k^2 (M_x \hat{\sigma}_x + \text{c.p.}) + a_{4,3} (k_x^2 M_x \hat{\sigma}_x + \text{c.p.}) \\
 &\quad + a_{4,4} [(k_x k_y M_y + k_x k_z M_z) \hat{\sigma}_x + \text{c.p.}],
 \end{aligned}$$

である. $\mathbf{k}$ を二次で打ち切ったため, $\mathbf{k}$ 三次から始まる Dresselhaus スピン軌道結合 [5], $\mathbf{k}$ 四次から始まる nonparabolicity を記述する項 [1, 86, 110–112] は現れない. c.p. は x, y, z の指標の巡回置換を表す. $H_{\text{CB}, 1}$ の $a_{1,1}$ の項は波数とスピン依存性からエネルギーの定数, $a_{1,2}$ の項は運動エネルギーである. $H_{\text{CB}, 4}$ の $a_{4,1}$ は $\mathbf{k}$ に依存しない磁化と伝導電子のスピンとの交換相互作用であり, s - d 交換相互作用である. $a_{4,2}, a_{4,3}, a_{4,4}$ は波数 $\mathbf{k}$, 伝導電子のスピン $\hat{\sigma}$, 磁化 $\mathbf{M}$ の結合項であり, 交換相互作用によるスピン軌道結合項である. このスピン軌道結合は $\mathbf{k}$ 依存性を有するため, 図 2.2 (b) の $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ バンド間遷移によって現れる. よって, このスピン軌道結合をもたらず交換相互作用は価電子帯の p - d 交換相互作用である.

ここではスピン自由度を二重群の既約表現で取り入れた. 一方で基本とする群を一重群にとり, テンソルにスピンを入れる方法もある [113, 114]. このようにスピンの取り入れ方に二重群か, テンソルに入れるか二通りの方法がある. 二つの方法で得られる有効ハミルトニアンは互いにユニタリー変換で結びつくため [113], 本質的に変わらない.

D.2 時間反転対称操作を要素に持つ群による導出

4.3 節では群を特定して物理量の変換則を調べ, 不変なハミルトニアンを特定し, 時間反転対称性まで反映させた. ここでは時間反転操作 R をあからさまに群の要素として取り入れて同様の解析を行う. R は電子の波数, スピン, 磁化を反転させる操作である. このもとで系全体を不変に保つ群は図 4.5 (b) の点群 S_4 に R を伴う二つの操作を加えた次の群

(a) キャリア波数 $\mathbf{k}$
(極性ベクトル)

E	C_2	S_4	S_4^{-1}	$RC_2(x)$	$RC_2(y)$
k_x	$-k_x$	k_y	$-k_y$	$-k_x$	k_x
k_y	$-k_y$	$-k_x$	k_x	k_y	$-k_y$
k_z	k_z	$-k_z$	$-k_z$	k_z	k_z

(b) キャリアスピン (パウリスピン) と
磁化 (z成分のみ) (軸性ベクトル)

E	C_2	S_4	S_4^{-1}	$RC_2(x)$	$RC_2(y)$
σ_x	$-\sigma_x$	$-\sigma_y$	σ_y	$-\sigma_x$	σ_x
σ_y	$-\sigma_y$	σ_x	$-\sigma_x$	σ_y	$-\sigma_y$
σ_z, M_z	σ_z, M_z	σ_z, M_z	σ_z, M_z	σ_z, M_z	σ_z, M_z

(c) 波数 $\mathbf{k}$ 二次

E	C_2	S_4	S_4^{-1}	$RC_2(x)$	$RC_2(y)$
k_x^2	k_x^2	k_y^2	k_y^2	k_x^2	k_x^2
k_y^2	k_y^2	k_x^2	k_x^2	k_y^2	k_y^2
k_z^2	k_z^2	k_z^2	k_z^2	k_z^2	k_z^2
$k_x k_y$	$k_x k_y$	$-k_x k_y$	$-k_x k_y$	$-k_x k_y$	$-k_x k_y$
$k_y k_z$	$-k_y k_z$	$k_x k_z$	$-k_x k_z$	$k_y k_z$	$-k_y k_z$
$k_z k_x$	$-k_z k_x$	$-k_z k_y$	$k_z k_y$	$-k_z k_x$	$k_z k_x$

図 D.1 点群 S_4 に時間反転操作 R による対称操作を追加した群での対称操作に対する (a) キャリアの波数 $\mathbf{k}$, (b) キャリアスピンと磁化 (z 成分), (c) 波数二次の変換則. 時間反転操作は $\mathbf{k}$, キャリアスピンや磁化の向きを反転させる操作である. (a-c) では各物理量に関して符号の変える項目で赤字の強調表示をした.

- E : 恒等操作
- C_2 : z 軸に関して π 回転
- S_4 : z 軸に関して $\pi/2$ 回転して, 回転軸に直交する平面で鏡映
- S_4^{-1} : z 軸に関して $-\pi/2$ 回転して, 回転軸に直交する平面で鏡映
- $RC_2(x)$: x 軸で π 回転してから時間反転操作
- $RC_2(y)$: y 軸で π 回転してから時間反転操作

である. なお R は $R^{-1} = R$ であり, 点群 S_4 の対称操作すべてと可換であるため, 上記の操作の集合は群の定義を満たす.

図 4.6 に示したように波数, キャリアスピン, 磁化, 波数二次の変換則を図 D.1 にまとめ, 符号の変化する項目を赤字で強調表示した. この図 D.1 から符号を変えない項目の組み合わせが不変なハミルトニアンを構成できる. 簡単のため波数ゼロ次の結果を省いて, 結果は

- スピンと波数の一次で対応する赤項目がないため, ハミルトニアンに波数一次の項がない
- 波数二次について
 - $M_z \sigma_z$ と結びつく項目: $k_x^2 + k_y^2$ と k_z^2
 - $M_z \sigma_x$ と結びつく項目: $k_z k_x$
 - $M_z \sigma_y$ と結びつく項目: $k_z k_y$

であり, 式 (4.23) と合致する.

付録 E

内因性異常 Hall 伝導率の線形応答理論による表式

j 方向に DC 電場を印加した際の i 方向に流れる電流密度の表式を導く. $-e(e > 0)$ を電子の電荷とし, $eE\hat{x}_j$ を摂動項 ($\hat{x}_i$ は位置演算子の i 成分), それ以外のハミルトニアン H (例えば $H_0 + H_{\text{ex}}$ [式 (4.2)]) を無摂動項とする.

摂動によって無摂動項 H の固有状態 $|\alpha\rangle$ は

$$|\alpha'\rangle = |\alpha\rangle + \sum_{\beta(\neq\alpha)} \frac{\langle\beta|eE\hat{x}_j|\alpha\rangle}{E_\alpha - E_\beta} |\beta\rangle + O(E^2), \quad (\text{E.1})$$

の状態へと変化する. 以下, 簡単のため電場二次の項 $O(E^2)$ を無視する. また d 次元系の電流密度演算子 (i 成分) を

$$\hat{j}_i = \frac{-e\hat{v}_i}{L^d}, \quad \hat{v}_i = \frac{-i}{\hbar} [\hat{x}_i, H]. \quad (\text{E.2})$$

で定義する. $\hat{v}_i$ は速度演算子 (の i 成分) であり, $\hat{x}_i$ の Heisenberg 方程式から決まる. なお $\hat{j}_i$ は定義からわかるように電場を含まない.

式 (E.1, E.2) を用いて電流密度演算子の統計平均は電場ゼロ次の密度行列を ρ_0 として

$$\begin{aligned} \langle\hat{j}_i\rangle &= \text{tr}[\rho_0\hat{j}_i], \\ &= \sum_{\alpha} f_{\text{FD}}(E_{\alpha}) \langle\alpha'|\hat{j}_i|\alpha'\rangle \\ &= \sum_{\alpha} f_{\text{FD}}(E_{\alpha}) \left[\langle\alpha| + \sum_{\beta(\neq\alpha)} \frac{\langle\alpha|eE\hat{x}_j|\beta\rangle}{E_{\alpha} - E_{\beta}} \langle\beta| \right] \frac{-e\hat{v}_i}{L^d} \left[|\alpha\rangle + \sum_{\beta(\neq\alpha)} \frac{\langle\beta|eE\hat{x}_j|\alpha\rangle}{E_{\alpha} - E_{\beta}} |\beta\rangle \right], \\ &= \sum_{\alpha} f_{\text{FD}}(E_{\alpha}) \langle\alpha| \frac{-e\hat{v}_i}{L^d} |\alpha\rangle + \sum_{\alpha} f_{\text{FD}}(E_{\alpha}) \left[\sum_{\beta(\neq\alpha)} \frac{\langle\alpha|eE\hat{x}_j|\beta\rangle}{E_{\alpha} - E_{\beta}} \langle\beta| \frac{-e\hat{v}_i}{L^d} |\alpha\rangle + \sum_{\beta(\neq\alpha)} \langle\alpha| \frac{-e\hat{v}_i}{L^d} |\beta\rangle \frac{\langle\beta|eE\hat{x}_j|\alpha\rangle}{E_{\alpha} - E_{\beta}} \right], \\ &= \frac{1}{L^d} \sum_{\alpha} f_{\text{FD}}(E_{\alpha}) \sum_{\beta(\neq\alpha)} \frac{\langle\alpha| - e\hat{v}_i |\beta\rangle \langle\beta| eE\hat{x}_j |\alpha\rangle}{E_{\alpha} - E_{\beta}} + \text{c.c.}, \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

である. c.c は前の項の複素共役を表す. また密度行列の電場一次の項 ρ_1 を無視した. なぜなら, キャリアの自由度に関する平均操作を Tr で表して,

$$\begin{aligned}\text{Tr}[\rho \hat{j}_i] &= \text{Tr}[(\rho_0 + \rho_1) \hat{j}_i], \\ \text{Tr}[\rho_1 \hat{j}_i] &= \text{Tr}[(\delta f \hat{\sigma}_0 + (\sigma_x \text{などの線形結合で表される項})) \hat{j}_i], \\ &= \text{Tr}[\delta f \hat{j}_i \hat{\sigma}_0], \\ &\propto \sum_{\alpha} \delta f \langle \alpha | \hat{v}_i | \alpha \rangle \propto \sum_{\alpha} \delta f \langle \alpha | [\hat{x}_i, H] | \alpha \rangle = \sum_{\alpha} \delta f (E_{\alpha} - E_{\alpha}) \langle \alpha | \hat{x}_i | \alpha \rangle = 0,\end{aligned}$$

から無視できるためである. なお δf は ρ_1 のスピンの依存しない成分であり, $\hat{j}_i$ はスピンの依存しないためスピンに関する平均操作 $\text{Tr}_{\sigma}[\hat{j}_i \hat{\sigma}_{x,y,z}] = 0$ を用いた.

電流密度をさらに物理的に理解しやすく使いやすい形へ変形していく. 速度演算子の行列要素を

$$\langle \alpha | \hat{v}_i | \beta \rangle = \langle \alpha | \frac{-i}{\hbar} [\hat{x}_i, H] | \beta \rangle = \langle \alpha | \frac{-i}{\hbar} \cdot i \frac{\partial H}{\partial \hat{k}_i} | \beta \rangle = \langle \alpha | \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \hat{k}_i} | \beta \rangle, \quad (\text{E.4})$$

へ変形できる. $\hat{k}_i$ は正準運動量演算子を波数に変換した演算子であり, 例えば Bloch 電子なら Bloch 波数である. 最後の変形で運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ の任意の関数 $G(\hat{\mathbf{p}})$ に対する恒等式

$$[\hat{x}_i, G(\hat{\mathbf{p}})] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial \hat{p}_i},$$

を用いた. 位置演算子の行列要素は

$$\langle \beta | \hat{v}_j | \alpha \rangle = \langle \beta | \frac{-i}{\hbar} [\hat{x}_j, H] | \alpha \rangle = \frac{-i}{\hbar} (E_{\alpha} - E_{\beta}) \langle \beta | \hat{x}_j | \alpha \rangle,$$

へと変形される. ただし, $E_{\alpha} \neq E_{\beta}$ とした. ブラとケットを入れ替えた行列要素についても同様に

$$\langle \beta | \hat{v}_j | \alpha \rangle = \langle \beta | \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \hat{k}_j} | \alpha \rangle,$$

と

$$\langle \beta | \hat{x}_j | \alpha \rangle = \frac{i\hbar}{E_{\alpha} - E_{\beta}} \langle \beta | \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \hat{k}_j} | \alpha \rangle, \quad (\text{E.5})$$

である. 以上の式 (E.4, E.5) を電流密度 [式 (E.3)] へ代入すると, 電流密度は

$$\begin{aligned}\langle \hat{j}_i \rangle &= \frac{-e^2}{L^d} \sum_{\alpha} f_{\text{FD}}(E_{\alpha}) \sum_{\beta(\neq \alpha)} \frac{\langle \alpha | \hat{v}_i | \beta \rangle \langle \beta | \hat{x}_j | \alpha \rangle}{E_{\alpha} - E_{\beta}} E + \text{c.c.}, \\ &= \frac{-e^2}{L^d} \sum_{\alpha} f_{\text{FD}}(E_{\alpha}) \sum_{\beta(\neq \alpha)} \frac{\langle \alpha | \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \hat{k}_i} | \beta \rangle \frac{i\hbar}{E_{\alpha} - E_{\beta}} \langle \beta | \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \hat{k}_j} | \alpha \rangle}{E_{\alpha} - E_{\beta}} E + \text{c.c.}, \\ &= \frac{-i e^2}{L^d \hbar} \sum_{\alpha} f_{\text{FD}}(E_{\alpha}) \sum_{\beta(\neq \alpha)} \frac{\langle \alpha | \frac{\partial H}{\partial \hat{k}_i} | \beta \rangle \langle \beta | \frac{\partial H}{\partial \hat{k}_j} | \alpha \rangle}{(E_{\alpha} - E_{\beta})^2} E + \text{c.c.},\end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

である.

得られた電流密度 [式 (E.6)] から伝導率テンソルを $E_\alpha \neq E_\beta$ のもとで

$$\begin{aligned}\sigma_{ij} &= \langle \hat{j}_i \rangle / E, \\ &= \frac{-1}{L^d} \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\alpha} f_{\text{FD}}(E_{\alpha}) \cdot i \sum_{\beta (\neq \alpha)} \frac{\langle \alpha | \frac{\partial H}{\partial k_i} | \beta \rangle \langle \beta | \frac{\partial H}{\partial k_j} | \alpha \rangle - \langle \alpha | \frac{\partial H}{\partial k_j} | \beta \rangle \langle \beta | \frac{\partial H}{\partial k_i} | \alpha \rangle}{(E_{\alpha} - E_{\beta})^2},\end{aligned}$$

の形に定義できる. 最後に伝導率テンソルに Berry 曲率 $B_{\alpha,k}$ が現れているため明示すると, 伝導率テンソルは

$$\sigma_{ij} = \frac{-1}{L^d} \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\alpha} f_{\text{FD}}(E_{\alpha}) B_{\alpha,k}(\mathbf{k}), \quad B_{\alpha,k} = i \sum_{\beta (\neq \alpha)} \frac{\langle \alpha | \frac{\partial H}{\partial k_i} | \beta \rangle \langle \beta | \frac{\partial H}{\partial k_j} | \alpha \rangle - \langle \alpha | \frac{\partial H}{\partial k_j} | \beta \rangle \langle \beta | \frac{\partial H}{\partial k_i} | \alpha \rangle}{(E_{\alpha} - E_{\beta})^2},$$

である. $B_{\alpha,k}(\mathbf{k})$ が Berry 曲率の k 成分であり, 例えば $(i, j) = (x, y)$ なら $k = z$ である. Berry 曲率は無摂動項 H のみで決まる.

H の記述する系として Bloch 電子を採用すると, n, m をバンド指標として $\alpha = (n, \mathbf{k}), \beta = (m, \mathbf{K})$ である. もし H が本論文で扱う $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ハミルトニアンのように波数 $\mathbf{k}$ について対角であるのなら, $\beta = (m, \mathbf{K})$ で α と一般に異なる波数を取りうる場合, $\langle \mathbf{k} | \frac{\partial H}{\partial k_i} | \mathbf{K} \rangle = \frac{\partial H}{\partial k_i} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{K}}$ である. よって, β は α と同一の波数に限られ, $\beta = (m, \mathbf{k})$ のようにバンド指標のみ一般に異なる. Bloch 電子に対する伝導率テンソルは

$$\begin{aligned}\sigma_{ij} &= \frac{-1}{L^d} \frac{e^2}{\hbar} \sum_n \sum_{\mathbf{k}} f_{\text{FD}}(E_{n,\mathbf{k}}) B_{n,k}(\mathbf{k}), \quad B_{n,k}(\mathbf{k}) = i \sum_{m (\neq n)} \frac{\langle n | \frac{\partial H}{\partial k_i} | m \rangle \langle m | \frac{\partial H}{\partial k_j} | n \rangle - \langle n | \frac{\partial H}{\partial k_j} | m \rangle \langle m | \frac{\partial H}{\partial k_i} | n \rangle}{(E_n - E_m)^2}. \\ &= -\frac{e^2}{\hbar} \sum_n \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} f_{\text{FD}}(E_{n,\mathbf{k}}) B_{n,k}(\mathbf{k}).\end{aligned}\tag{E.7}$$

である. 波数和を後のために積分に直した. また, H が波数について対角であるため演算子 $\hat{k}_{i,j}$ をスカラーに直した. この伝導率テンソルの表式は久保公式による内因性異常 Hall 伝導率の表式と合致する [88].

付録 F

内因性異常 Hall 伝導率の母体半導体ハミルトニアンに関する比較

精密なハミルトニアン [式 (3.9)] と簡単化したハミルトニアン [式 (4.3)] を用い, 5 章で述べた方法で計算した Hall 伝導率を図 F.1 に載せた. 精密なハミルトニアンが実線で, 簡単化したハミルトニアンが点線である. Γ 点近傍のバンド構造同様 [図 4.1], Hall 伝導率でも本質的な変化は見られない.

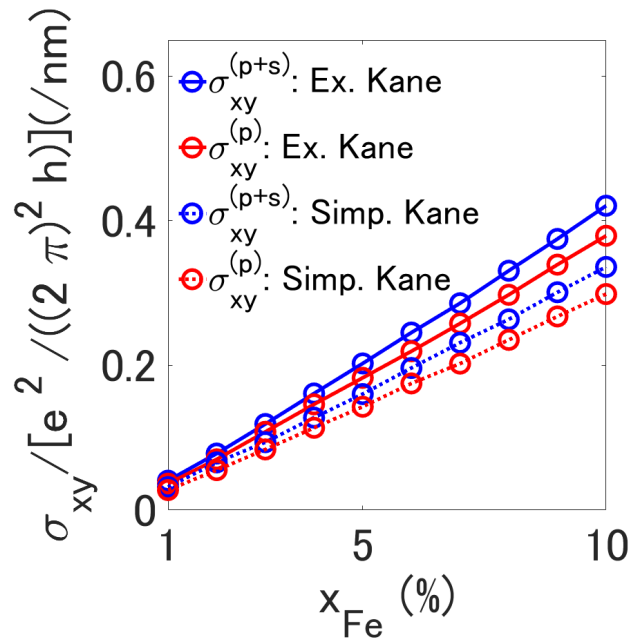


図 F.1 n 型強磁性半導体 での p - d と s - d 両方を伴った内因性異常 Hall 伝導率 (青), p - d のみの Hall 伝導率 (赤) を精密な半導体のハミルトニアン (Ex. Kane, 実線) [式 (3.9)] と簡単化したハミルトニアン (Simp. Kane, 点線) [式 (4.3)] で計算した結果.

付録 G

主要な記号と用語一覧

交換スピン軌道結合: 交換相互作用を起源に持つスピン軌道結合

$\mathbf{k}$: Bloch 波数ベクトル, または単に波数ベクトル, 波数を指す

Γ 点: III-V 族半導体の第一 Brillouin ゾーンの原点 (波数 $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ の点)

H : 全ハミルトニアン

H_0 : 母体半導体のバンド構造を記述するハミルトニアン

H_{ex} : 交換相互作用を記述するハミルトニアン

$\mathbf{B}_{\text{eff}}$: 有効磁場

$\mathbf{B}_{\text{eff}}^{(p-d)}$: p - d 交換スピン軌道結合による有効磁場

E_g : III-V 族半導体の基本的なエネルギーギャップ

P : Kane の行列要素

E_P : Kane の行列要素をエネルギーに換算した物理量

Δ_g : split-off ギャップ

γ_i ($i = 1, 2, 3$): Luttinger パラメータ

a : 母体半導体の格子定数

$N_0 J_{s-d}, N_0 J_{p-d} (A_{s-d}, B_{p-d})$: s - d , p - d 交換相互作用の係数

$\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$: 局在スピンの統計平均, 局在スピン偏極

$\langle \hat{P}_{c(v)} \hat{\mathbf{s}} / V \rangle$: 伝導帯 (価電子帯) のバンド端 Bloch 関数で表現されたキャリアスピン偏極密度

T_c : Curie 温度

ϵ_r : 比誘電率

付録 H

用いた物質パラメータ値

本研究で用いた三次元バルクのバンドパラメータを表 H.1 にまとめる．量子井戸構造のパラメータは表 4.2 に載せた．

母体半導体のパラメータについて実験 [49–56] で鉄添加による主だった結晶構造の変化が観測されていないことから，値を母体半導体での推奨値 [67] とした．誘電率は文献 [20, 83] から引用した．ただし $B' = (B_{8v}^+ + B_{7v})/2$ と C_k は文献 [67] に記載されていないため，別の文献 [1] (の Table 6.3, p.74) の値を用いた．さらに H [式 (3.9)] に現れる H_c のパラメータ m_c には伝導帯下端の有効質量の実験値を再現する式

$$\frac{m_0}{m_c} = 1 + \frac{E_P}{3} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_g} \right),$$

を用いた．

s - d と p - d 交換相互作用の係数は第一原理計算による値 [72] を用いる．ただし，符号は実験的にも不明であるため (III,Mn)V 強磁性半導体で典型的な符号 [61] に従う．また第一原理計算の値は鉄濃度 3.7 % の値であり，便利さのために鉄濃度に依存しない係数 $N_0 J_{s-d}$, $N_0 J_{p-d}$ の形へ式 (4.5) によって変換する．

各記号とパラメータの意味は付録 G に述べた．

表 H.1 本研究で用いた三次元バルクのバンド, 物質パラメータ. N_0J_{s-d}, N_0J_{p-d} を計算する際に A_{s-d}, B_{p-d} は鉄濃度 3.7 % ($x = 0.037$) の値, スピンの大きさ $S = 5/2$ とした. (...) で物理量の単位を記した. (...) を伴わないパラメータは無次元量である. AlSb での値は量子井戸の側壁と表 4.1 での Reduced バンドパラメータの見積もりに用いたため掲載した. その AlSb での空白の部分は本論で用いなかったため省いたことを表す. AlSb において量子井戸でのパラメータとしては X 点でのバンドギャップ E_g^X と Γ 点でのスピン軌道分裂 Δ_g を用い, Reduced バンドパラメータの見積もりには Γ 点でのバンドギャップ $E_g, E_P, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ を用いた.

パラメータ	In(Fe)As	In(Fe)Sb	AlSb
E_g (eV)	0.418	0.235	2.386 ($E_g^X = 1.696$)
Δ_g (eV)	0.39	0.81	0.676
E_P (eV)	21.5	23.3	18.7
a (nm)	0.605	0.6479	
γ_1	20	34.8	5.18
γ_2	8.5	15.5	1.19
γ_3	9.2	16.5	1.97
B' (eV · nm ²)	-0.0329	-0.2999	
C_k (eV · nm)	-0.0011	-0.00082	
A_{s-d} (Fe 3.7%) (eV)	0.02/6	0.03/6	
B_{p-d} (Fe 3.7%) (eV)	-0.22/6	-0.25/6	
$N_0J_{s-d} = 6A_{s-d}/(xS)$ (eV)	0.2162	0.3243	
$N_0J_{p-d} = 6B_{p-d}/(xS)$ (eV)	-2.3784	-2.7027	
ϵ_r	12.3	16.8	

付録 I

有限差分化ハミルトニアンの詳細

この章で図 4.4 に示した有限差分化ハミルトニアンで、ノンゼロの成分を持つブロックの詳細な行列表示を各ブロックごとに示す。要点は、 $\hat{k}_z$ を含む成分に対応するブロックは非対角成分を持ち、それ以外の成分のブロックは対角成分のみを持つ点である。ただし、ハミルトニアンはエルミートであるために対角と右上のブロックのみ示す。また、図をコンパクトにするために Hartree ポテンシャルなど井戸構造に関わるポテンシャル [式 (4.10, 4.11)] は対角成分にのみ入るものとして省いている。同時に A_{s-d}, B_{p-d} を A, B と略記している。各ブロックの図で $z_i (i = 1, 2, \dots, N)$ は離散化した z 軸上での位置を表す。またもとの (i, j) 成分などと述べた時は式 (4.2) の全ハミルトニアン (i, j) 成分を指すとする。

I.1 (1, 1), (1, 2), (2, 2) ブロック

もとの (1, 1), (2, 2) 成分は

$$E_k^0 \pm 3A_{s-d}e_z \quad (+ : (1, 1), \quad - : (2, 2))$$

である。ブロックを図 I.1 に示す。

	Z_1	Z_2	Z_3	$\cdots$	Z_{N-2}	Z_{N-1}	Z_N
Z_1	$\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $\pm 3A(z_1)e_z(z_1)$	$-\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$					$P \mid -\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$ $F \mid 0$
Z_2	$-\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $\pm 3A(z_2)e_z(z_2)$	$-\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$				
Z_3		$-\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $\pm 3A(z_3)e_z(z_3)$				
$\vdots$			$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$		
Z_{N-2}					$\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $\pm 3A(z_{N-2})e_z(z_{N-2})$	$-\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	
Z_{N-1}					$-\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $\pm 3A(z_{N-1})e_z(z_{N-1})$	$-\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$
Z_N	$P \mid -\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$ $F \mid 0$					$-\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $\pm 3A(z_N)e_z(z_N)$

図 I.1 図 4.4 の (1,1), (2,2) ブロック. 空白の成分はゼロである. P と F の書かれた成分で, 本論で採用した固定端境界条件なら F の成分が, 周期境界条件なら P の成分が入る.

次にもとの (1,2) 成分は

$$3A_{s-d}e_{-},$$

であり, ブロックの詳細は図 I.2 である.

	Z_1	Z_2	Z_3	$\cdots$	Z_{N-2}	Z_{N-1}	Z_N
Z_1	$3A(z_1)e_{-}(z_1)$						
Z_2		$3A(z_2)e_{-}(z_2)$					
Z_3			$3A(z_3)e_{-}(z_3)$				
$\vdots$				$\cdots$			
Z_{N-2}					$3A(z_{N-2})e_{-}(z_{N-2})$		
Z_{N-1}						$3A(z_{N-1})e_{-}(z_{N-1})$	
Z_N							$3A(z_N)e_{-}(z_N)$

図 I.2 (1,2) ブロック.

I.2 (1, 3), (1, 4), (1, 5), と (2, 4), (2, 5), (2, 6) ブロック

もとの (1, 3), (2, 4) と (2, 6), (1, 5) 成分は

$$\begin{aligned}
 & - \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) Pk_+ \quad (1, 3), \quad (2, 4), \\
 & + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) Pk_- \quad (2, 6), \quad (1, 5),
 \end{aligned}$$

であり, ブロックの図は図 I.3 である.

	z_1	z_2	z_3	$\cdots$	z_{N-2}	z_{N-1}	z_N
z_1	$\mp \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) Pk_{\pm}$						
z_2		$\mp \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) Pk_{\pm}$					
z_3			$\mp \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) Pk_{\pm}$				
$\vdots$				$\cdots$			
z_{N-2}					$\mp \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) Pk_{\pm}$		
z_{N-1}						$\mp \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) Pk_{\pm}$	
z_N							$\mp \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) Pk_{\pm}$

図 I.3 (1, 3), (2, 4) と (2, 6), (1, 5) ブロック.

もとの (1, 4), (2, 5) 成分は

$$\sqrt{\frac{2}{3}} P\hat{k}_z,$$

であり, 図 I.4 に詳細を示す.

	z_1	z_2	z_3	$\dots$	z_{N-2}	z_{N-1}	z_N
z_1		$\sqrt{\frac{2-iP}{3 \cdot 2\Delta z}}$					$P \mid -\sqrt{\frac{2-iP}{3 \cdot 2\Delta z}}$ $F \mid 0$
z_2	$-\sqrt{\frac{2-iP}{3 \cdot 2\Delta z}}$		$\sqrt{\frac{2-iP}{3 \cdot 2\Delta z}}$				
z_3		$-\sqrt{\frac{2-iP}{3 \cdot 2\Delta z}}$					
$\vdots$				$\dots$			
z_{N-2}						$\sqrt{\frac{2-iP}{3 \cdot 2\Delta z}}$	
z_{N-1}					$-\sqrt{\frac{2-iP}{3 \cdot 2\Delta z}}$		$\sqrt{\frac{2-iP}{3 \cdot 2\Delta z}}$
z_N	$P \mid \sqrt{\frac{2-iP}{3 \cdot 2\Delta z}}$ $F \mid 0$					$-\sqrt{\frac{2-iP}{3 \cdot 2\Delta z}}$	

図 I.4 (1, 4), (2, 5) ブロック.

I.3 (1, 7), (1, 8) と (2, 7), (2, 8) ブロック

もとの (1, 8), (2, 7) 成分は

$$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{\mp} \quad (+ : (2, 7), \quad - : (1, 8)),$$

であり, 図 I.5 に示す.

$\begin{matrix} (1,8) - \\ (2,7) + \end{matrix}$	Z_1	Z_2	Z_3	$\cdots$	Z_{N-2}	Z_{N-1}	Z_N
Z_1	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{\pm}$						
Z_2		$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{\pm}$					
Z_3			$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{\pm}$				
$\vdots$				$\cdots$			
Z_{N-2}					$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{\pm}$		
Z_{N-1}						$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{\pm}$	
Z_N							$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{\pm}$

図 I.5 (1, 8) と (2, 7) ブロック.

もとの (1, 7), (2, 8) 成分は

$$\mp \frac{1}{\sqrt{3}} P \hat{k}_z \quad (+ : (2, 8), \quad - : (1, 7)),$$

であり, 図 I.6 に示す.

$\begin{matrix} (1,7) \text{upper} \\ (2,8) \text{lower} \end{matrix}$	Z_1	Z_2	Z_3	$\cdots$	Z_{N-2}	Z_{N-1}	Z_N
Z_1		$\mp \frac{1-iP}{\sqrt{3}2\Delta z}$					$P \pm \frac{1-iP}{\sqrt{3}2\Delta z}$ $F 0$
Z_2	$\pm \frac{1-iP}{\sqrt{3}2\Delta z}$		$\mp \frac{1-iP}{\sqrt{3}2\Delta z}$				
Z_3		$\pm \frac{1-iP}{\sqrt{3}2\Delta z}$		$\mp \frac{1-iP}{\sqrt{3}2\Delta z}$			
$\vdots$				$\cdots$			
Z_{N-2}						$\mp \frac{1-iP}{\sqrt{3}2\Delta z}$	
Z_{N-1}					$\pm \frac{1-iP}{\sqrt{3}2\Delta z}$		$\mp \frac{1-iP}{\sqrt{3}2\Delta z}$
Z_N	$P \mp \frac{1-iP}{\sqrt{3}2\Delta z}$ $F 0$					$\pm \frac{1-iP}{\sqrt{3}2\Delta z}$	

図 I.6 (1, 7) と (2, 8) ブロック.

I.4 (3, 3), (4, 4), (5, 5), (6, 6) と (3, 4), (4, 5), (5, 6) ブロック

もとの (3, 3), (6, 6) 成分は

$$-E_k^0 - E_g \pm 3B_{p-d}e_z \quad (+ : (3, 3), \quad - : (6, 6)),$$

であり, 図 I.7 に示す.

	Z_1	Z_2	Z_3	$\cdots$	Z_{N-2}	Z_{N-1}	Z_N
$\begin{matrix} (3,3) + \\ (6,6) - \end{matrix}$ Z_1	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm 3Be_z)(z_1)$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$					$\begin{matrix} P \frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2} \\ F 0 \end{matrix}$
Z_2	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm 3Be_z)(z_2)$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$				
Z_3		$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm 3Be_z)(z_3)$				
$\vdots$			$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$		
Z_{N-2}					$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm 3Be_z)(z_{N-2})$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	
Z_{N-1}					$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm 3Be_z)(z_{N-1})$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$
Z_N	$\begin{matrix} P \frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2} \\ F 0 \end{matrix}$					$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm 3Be_z)(z_N)$

図 I.7 (3, 3) と (6, 6) ブロック.

もとの (4, 4), (5, 5) 成分は

$$-E_k^0 - E_g \pm B_{p-d}e_z \quad (+ : (4, 4), \quad - : (5, 5)),$$

であり, 図 I.8 である.

$\begin{matrix} (4,4) + \\ (5,5) - \end{matrix}$	Z_1	Z_2	Z_3	$\cdots$	Z_{N-2}	Z_{N-1}	Z_N
Z_1	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm B e_z)(z_1)$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$					$\begin{matrix} P \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{\Delta z^2} \\ F 0 \end{matrix}$
Z_2	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm B e_z)(z_2)$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$				
Z_3		$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm B e_z)(z_3)$				
$\vdots$			$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$		
Z_{N-2}					$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm B e_z)(z_{N-2})$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	
Z_{N-1}					$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm B e_z)(z_{N-1})$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$
Z_N	$\begin{matrix} P \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{\Delta z^2} \\ F 0 \end{matrix}$					$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g \pm B e_z)(z_N)$

図 I.8 (4, 4) と (5, 5) ブロック.

もとの (3, 4), (4, 5), (5, 6) 成分は

$$\sqrt{3}B_{p-d}e_- : (3, 4), (5, 6), \quad 2B_{p-d}e_- : (4, 5),$$

であり, 図 I.9 に示す.

$\begin{matrix} (3,4), (5,6) \sqrt{3} \\ (4,5) 2 \end{matrix}$	Z_1	Z_2	Z_3	$\cdots$	Z_{N-2}	Z_{N-1}	Z_N
Z_1	$(\sqrt{3}, 2)B(z_1)e_-(z_1)$						
Z_2		$(\sqrt{3}, 2)B(z_2)e_-(z_2)$					
Z_3			$(\sqrt{3}, 2)B(z_3)e_-(z_3)$				
$\vdots$				$\cdots$			
Z_{N-2}					$(\sqrt{3}, 2)B(z_{N-2})e_-(z_{N-2})$		
Z_{N-1}						$(\sqrt{3}, 2)B(z_{N-1})e_-(z_{N-1})$	
Z_N							$(\sqrt{3}, 2)B(z_N)e_-(z_N)$

図 I.9 (3, 4), (4, 5), (5, 6) ブロック.

I.5 (3, 7), (4, 7), (4, 8), (5, 7), (5, 8), (6, 8) ブロック

もとの (3, 7), (4, 8), (5, 7), (6, 8) 成分は

$$\begin{aligned} \pm \sqrt{6} B_{p-d} e_{\mp} & \quad (+, -) : (3, 7), \quad (-, +) : (6, 8), \\ \pm \sqrt{2} B_{p-d} e_{\mp} & \quad (+, -) : (4, 8), \quad (-, +) : (5, 7), \end{aligned}$$

であり, 図 I.10 に示す.

	z_1	z_2	z_3	$\cdots$	z_{N-2}	z_{N-1}	z_N
z_1	$\pm \sqrt{6} B(z_1) e_{\mp}(z_1)$ $\pm \sqrt{2} B(z_1) e_{\mp}(z_1)$						
z_2		$\pm \sqrt{6} B(z_2) e_{\mp}(z_2)$ $\pm \sqrt{2} B(z_2) e_{\mp}(z_2)$					
z_3			$\pm \sqrt{6} B(z_3) e_{\mp}(z_3)$ $\pm \sqrt{2} B(z_3) e_{\mp}(z_3)$				
$\vdots$				$\cdots$			
z_{N-2}					$\pm \sqrt{6} B(z_{N-2}) e_{\mp}(z_{N-2})$ $\pm \sqrt{2} B(z_{N-2}) e_{\mp}(z_{N-2})$		
z_{N-1}						$\pm \sqrt{6} B(z_{N-1}) e_{\mp}(z_{N-1})$ $\pm \sqrt{2} B(z_{N-1}) e_{\mp}(z_{N-1})$	
z_N							$\pm \sqrt{6} B(z_N) e_{\mp}(z_N)$ $\pm \sqrt{2} B(z_N) e_{\mp}(z_N)$

図 I.10 (3, 7), (4, 8), (5, 7), (6, 8) ブロック.

もとの (4, 7), (5, 8) 成分は

$$- 2\sqrt{2} B_{p-d} e_z,$$

であり, 図 I.11 に示す.

	z_1	z_2	z_3	$\cdots$	z_{N-2}	z_{N-1}	z_N
z_1	$-2\sqrt{2}B(z_1)e_z(z_1)$						
z_2		$-2\sqrt{2}B(z_2)e_z(z_2)$					
z_3			$-2\sqrt{2}B(z_3)e_z(z_3)$				
$\vdots$				$\cdots$			
z_{N-2}					$-2\sqrt{2}B(z_{N-2})e_z(z_{N-2})$		
z_{N-1}						$-2\sqrt{2}B(z_{N-1})e_z(z_{N-1})$	
z_N							$-2\sqrt{2}B(z_N)e_z(z_N)$

図 I.11 (4, 7), (5, 8) ブロック.

I.6 (7, 7), (7, 8), (8, 8) ブロック

もとの (7, 7), (8, 8) 成分は

$$-E_k^0 - E_g - \Delta_g \mp B_{p-d}e_z \quad (- : (7, 7), \quad + : (8, 8)), \quad (\text{I.1})$$

であり, 図 I.12 に示す.

	Z_1	Z_2	Z_3	$\cdots$	Z_{N-2}	Z_{N-1}	Z_N
Z_1	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g - \Delta_g \mp B e_z)(z_1)$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$					$P \mid \frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$ $F \mid 0$
Z_2	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g - \Delta_g \mp B e_z)(z_2)$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$				
Z_3		$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g - \Delta_g \mp B e_z)(z_3)$				
$\vdots$			$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$		
Z_{N-2}					$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g - \Delta_g \mp B e_z)(z_{N-2})$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	
Z_{N-1}					$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g - \Delta_g \mp B e_z)(z_{N-1})$	$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$
Z_N	$P \mid \frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$ $F \mid 0$					$\frac{\hbar^2}{2m_0 \Delta z^2}$	$-\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{m_0 \Delta z^2}$ $(-E_g - \Delta_g \mp B e_z)(z_N)$

図 I.12 (7, 7), (8, 8) ブロック.

もとの (7, 8) 成分は

$$-B_{p-d} e_z,$$

であり, 図 I.13 に示す.

	Z_1	Z_2	Z_3	$\cdots$	Z_{N-2}	Z_{N-1}	Z_N
Z_1	$-B(z_1)e_-(z_1)$						
Z_2		$-B(z_2)e_-(z_2)$					
Z_3			$-B(z_3)e_-(z_3)$				
$\vdots$				$\cdots$			
Z_{N-2}					$-B(z_{N-2})e_-(z_{N-2})$		
Z_{N-1}						$-B(z_{N-1})e_-(z_{N-1})$	
Z_N							$-B(z_N)e_-(z_N)$

図 I.13 (7, 8) ブロック.

付録 J

ハミルトニアンに現れる行列 T と J の表式

3.5 節とハミルトニアン [式 (4.2)] に現れる行列 T と J の表式は

$$T_x = \frac{1}{3\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -\sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix},$$

$$T_y = \frac{-i}{3\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix},$$

$$T_z = \frac{\sqrt{2}}{3} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$J_x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{bmatrix},$$

$$J_y = \frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{bmatrix},$$

$$J_z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{bmatrix} \tag{J.1}$$

である [1].

付録 K

量子井戸での有効ハミルトニアンに現れる Rashba 型の項の係数

式 (4.34) と (4.35) における Rashba 型の項の係数は

$$\frac{P^2}{3}C(z) = \eta_B \frac{dB_{p-d}}{dz} + \eta_H \frac{dV_H(z)}{dz} - \eta_w \frac{dh_w}{dz},$$

であり, 各種係数は

$$\eta_B = \frac{P^2}{3} \frac{\Delta_g(18B_{p-d} + \Delta_g)}{\left[E_g(E_g + \Delta_g) - \Delta_g B_{p-d} - 9B_{p-d}^2\right]^2},$$

$$\eta_H = \frac{P^2}{3}(\eta_2 - \eta_1), \quad \eta_w = \frac{P^2}{3}(\eta_2\delta_8 - \eta_1\delta_7),$$

$$\eta_1 = \frac{(E_g - B_{p-d})(E_g + \Delta_g + B_{p-d})}{\delta_-} \frac{1}{E_g + \Delta_g + B_{p-d}} \\ \times \left\{ \frac{1}{E_g - B_{p-d}} - \frac{\Delta_g}{\delta_-} \right\},$$

$$\eta_2 = \frac{(E_g - B_{p-d})(E_g + \Delta_g + B_{p-d})}{\delta_-} \frac{1}{E_g - B_{p-d}} \\ \times \left\{ \frac{1}{E_g + \Delta_g + B_{p-d}} + \frac{\Delta_g}{\delta_-} \right\},$$

である.

付録 L

Curie 温度の平均場理論による解析式

L.1 前提

Schrödinger 方程式 [式 (3.16)] を議論の開始点とする. 考える温度領域として

$$T \simeq T_c,$$

とすると, 局在スピン偏極の大きさについて

$$|\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle| \ll 1,$$

が成り立つ. このためにハミルトニアンの中で

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \lambda H_{\text{ex},c}, \quad \lambda \rightarrow 1, \\ H_0 &= (\text{無摂動項}), \quad H_{\text{ex},c} = (\text{摂動項}), \end{aligned}$$

と扱える. 同時に密度行列も摂動項について

$$\begin{aligned} \rho_c &= \rho_c^{(0)} + \rho_c^{(1)} + O(\lambda^2), \\ \rho_c^{(0)} &= f_{\text{FD}}(H_0), \end{aligned}$$

の形に展開できる. $\rho_c^{(i)}$ は摂動 i 次の項である. 無摂動項についての固有値方程式は

$$H_0 |n_0, \mathbf{k}\rangle = E_{n_0 \mathbf{k}} |n_0, \mathbf{k}\rangle,$$

の形に解けているとする.

$T \simeq T_c$ の下でキャリアスピン偏極密度は

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_c \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle &= \frac{1}{V} \text{Tr}_c \left[(\hat{P}_c \mathbf{s}) \rho_c \right], \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\substack{n_0, m_0 \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}'}} \langle m_0, \mathbf{k}' | \hat{P}_c \mathbf{s} | n_0, \mathbf{k} \rangle \langle n_0, \mathbf{k} | \rho_c^{(1)} | m_0, \mathbf{k}' \rangle + O(\lambda^2), \end{aligned}$$

であり, 非磁性半導体での偏極密度は

$$\frac{1}{V} \text{Tr}_c \left[(\hat{P}_c \mathbf{s}) \rho_c^{(0)} \right] = \mathbf{0},$$

である. $\hat{P}_c$ を $\hat{P}_v$ にしても同様である.

L.2 密度行列

次に密度行列 $\rho_c^{(1)}$ を方程式

$$[H_0 + \lambda H_{\text{ex},c}, \rho_c^{(0)} + \rho_c^{(1)}] = 0,$$

から導く. 方程式を λ の一次までで止めて, $\lambda = 1$ とすると

$$[H_0, \rho_c^{(1)}] + [H_{\text{ex},c}, \rho_c^{(0)}] = 0,$$

である. 続いて $\{|n_0, \mathbf{k}\rangle\}$ で行列表示した密度行列は

$$\begin{aligned} \langle n_0, \mathbf{k} | \rho_c^{(1)} | m_0, \mathbf{k}' \rangle &= - \frac{\langle n_0, \mathbf{k} | H_{\text{ex},c} \rho_c^{(0)} - \rho_c^{(0)} H_{\text{ex},c} | m_0, \mathbf{k}' \rangle}{E_{n_0 \mathbf{k}} - E_{m_0 \mathbf{k}'}} , \\ &= \langle n_0, \mathbf{k} | H_{\text{ex},c} | m_0, \mathbf{k}' \rangle \frac{f_{\text{FD}}(E_{n_0 \mathbf{k}}) - f_{\text{FD}}(E_{m_0 \mathbf{k}'})}{E_{n_0 \mathbf{k}} - E_{m_0 \mathbf{k}'}} , \end{aligned}$$

である. 分母がゼロに近づくとき

$$\lim_{E_{n_0 \mathbf{k}} \rightarrow E_{m_0 \mathbf{k}'}} \frac{f_{\text{FD}}(E_{n_0 \mathbf{k}}) - f_{\text{FD}}(E_{m_0 \mathbf{k}'})}{E_{n_0 \mathbf{k}} - E_{m_0 \mathbf{k}'}} = \left. \frac{df_{\text{FD}}(E)}{dE} \right|_{E=E_{n_0 \mathbf{k}}},$$

である. 特にフェルミ縮退しているとき

$$\lim_{T/T_F \rightarrow 0} \lim_{E_{n_0 \mathbf{k}} \rightarrow E_{m_0 \mathbf{k}'}} \frac{f_{\text{FD}}(E_{n_0 \mathbf{k}}) - f_{\text{FD}}(E_{m_0 \mathbf{k}'})}{E_{n_0 \mathbf{k}} - E_{m_0 \mathbf{k}'}} \rightarrow -\delta(E_{n_0 \mathbf{k}} - E_F),$$

である.

L.3 帯磁率の定義

キャリアスピンの統計平均は摂動項の一次までで

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_c \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle &= \frac{1}{V} \sum_{\substack{n_0, m_0 \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}'}} \langle m_0, \mathbf{k}' | \hat{P}_c \mathbf{s} | n_0, \mathbf{k} \rangle \langle n_0, \mathbf{k} | \rho_c^{(1)} | m_0, \mathbf{k}' \rangle , \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\substack{n_0, m_0 \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}'}} \langle m_0, \mathbf{k}' | \hat{P}_c \mathbf{s} | n_0, \mathbf{k} \rangle \langle n_0, \mathbf{k} | -\hat{P}_c \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{h}_{\text{eff},c} - \hat{P}_v \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{h}_{\text{eff},v} | m_0, \mathbf{k}' \rangle , \\ &\quad \times \frac{f_{\text{FD}}(E_{n_0 \mathbf{k}}) - f_{\text{FD}}(E_{m_0 \mathbf{k}'})}{E_{n_0 \mathbf{k}} - E_{m_0 \mathbf{k}'}} , \end{aligned}$$

である. ここで 8-バンドで $\hat{P}_c \mathbf{s}$ の行列要素は $|S, \uparrow\rangle, |S, \downarrow\rangle$ のブロックでのみノンゼロとなる. 同様に $\hat{P}_v \mathbf{s}$ の行列要素は HH, LH, SO のブロックでのみノンゼロとなる. よって,

$$\langle m_0, \mathbf{k}' | \hat{P}_c \mathbf{s} | n_0, \mathbf{k} \rangle \langle n_0, \mathbf{k} | \hat{P}_v \hat{\mathbf{s}} | m_0, \mathbf{k}' \rangle = 0, \quad (\text{L.1})$$

である [図 L.1].

$$\langle m_0, \mathbf{k}' | \hat{P}_c \mathbf{s} | n_0, \mathbf{k} \rangle \langle n_0, \mathbf{k} | \hat{P}_v \hat{\mathbf{s}} | m_0, \mathbf{k}' \rangle = 0$$

以上から

である. 帯磁率の定義しやすい形

に直す. $\hat{P}_v$ については上記の c を v に変更するのみである.

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \langle (\hat{P}_{c,v} \hat{\mathbf{s}})_i \rangle &= \sum_{j=x,y,z} \chi_{ij}^{c,v} h_{\text{eff},c,v,j}, \\ \chi_{ij}^{c,v} &= \frac{-1}{V} \sum_{n_0, \mathbf{k}} \frac{f_{\text{FD}}(E_{n_0 \mathbf{k}}) - f_{\text{FD}}(E_{m_0 \mathbf{k}})}{E_{n_0 \mathbf{k}} - E_{m_0 \mathbf{k}}} \langle m_0, \mathbf{k} | (\hat{P}_{c,v} \hat{\mathbf{s}})_i | n_0, \mathbf{k} \rangle \langle n_0, \mathbf{k} | (\hat{P}_{c,v} \hat{\mathbf{s}})_j | m_0, \mathbf{k} \rangle, \\ f_{\text{FD}} &= f_{\text{FD}}(T = T_c), \end{aligned}$$

である.

L.4 T_c の解析式

$T \simeq T_c$ なので Brillouin 関数 [式 (3.20)] を引数について一次まで展開して

$$|\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle| = \frac{S(S+1)}{3k_B T_c} H_{\text{eff}},$$

である. さらに

$$H_{\text{eff}} = \left| J_{s-d} \langle \hat{P}_c \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle + J_{p-d} \langle \hat{P}_v \frac{\hat{\mathbf{s}}}{V} \rangle \right|,$$

$$\frac{1}{V} \langle (\hat{P}_{c,v} \hat{\mathbf{s}})_i \rangle = \sum_{j=x,y,z} \chi_{ij}^{c,v} h_{\text{eff},c,v,j}, \quad h_{\text{eff},n} = x N_0 J_{n-d} \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle,$$

である.

式を簡単にするため, 局在スピンの統計平均が

$$\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle = |\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle| \mathbf{e}_z,$$

というように z 方向に向くとする. すると局在スピン偏極がキャリアスピン偏極密度による Zeeman 相互作用を受けるために, 自己無撞着であるためにはキャリアスピン偏極密度も z 成分のみである. そのために帯磁率は zz 成分のみ残り H_{eff} は

$$H_{\text{eff}} = \left| [x N_0 J_{s-d}^2 \chi_{zz}^c + x N_0 J_{p-d}^2 \chi_{zz}^v] |\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle| \right|,$$

$$= |x N_0 J_{s-d}^2 \chi_{zz}^c + x N_0 J_{p-d}^2 \chi_{zz}^v| \times |\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle|,$$

である.

$|\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle|$ の方程式は

$$|\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle| = \frac{S(S+1)}{3k_B T_c} |x N_0 J_{s-d}^2 \chi_{zz}^c + x N_0 J_{p-d}^2 \chi_{zz}^v| \times |\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle|,$$

である. この方程式が成り立つためには右辺の $|\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle|$ の係数が 1 に等しければよい. この意味で自己無撞着に T_c が

$$T_c = \frac{S(S+1)}{3k_B} |x N_0 J_{s-d}^2 \chi_{zz}^c + x N_0 J_{p-d}^2 \chi_{zz}^v| \quad (\text{L.2})$$

と決まる. もし $J_{p-d} \chi_{zz}^v \gg J_{s-d} \chi_{zz}^c$ であれば, $T_c \propto J_{p-d}^2$ である. さらに帯磁率の表式からわかるように, 帯磁率は一般にバンド内とバンド間励起の二種類の項からなる. よく知られた Pauli 帯磁率は Fermi エネルギーが伝導帯を横切ること得られるバンド内励起の項である. 同時に帯磁率はバンド間励起の項を含むため, Fermi エネルギーがエネルギーギャップ中に存在する際, バンド内励起の項がゼロであってもバンド間の項で帯磁率がノンゼロになりえて, バンド絶縁体で T_c がノンゼロになりえる. なおバンド間励起の項は原子の常磁性に現れる van Vleck 常磁性の帯磁率に相当する項であるため, 量子異常 Hall 系の研究 [89] では van Vleck 機構と呼ばれる.

T_c を決定するためには, まず $\chi_{zz}^{c,v}$ を非磁性半導体のバンド構造によって

$$\chi_{zz}^{c,v} = \frac{-1}{V} \sum_{n_0, m_0, \mathbf{k}} \frac{f_{\text{FD}}(E_{n_0 \mathbf{k}}) - f_{\text{FD}}(E_{m_0 \mathbf{k}})}{E_{n_0 \mathbf{k}} - E_{m_0 \mathbf{k}}} \langle m_0, \mathbf{k} | (\hat{P}_{c,v} \hat{\mathbf{s}})_z | n_0, \mathbf{k} \rangle \langle n_0, \mathbf{k} | (\hat{P}_{c,v} \hat{\mathbf{s}})_z | m_0, \mathbf{k} \rangle,$$

$$f_{\text{FD}} = f_{\text{FD}}(T = T_c),$$

に従って決定する. 数値的に T_c を決定する際は T_c の方程式の右辺で $f_{\text{FD}} = f_{\text{FD}}(T)$ として様々な温度に対して計算する. そして, 横軸を温度にして右辺の値をプロットする. 同時に縦軸を y とすると, $y = T$ の直線も引く. 結果, それら曲線と直線の交点が T_c を決める.

参考文献

- [1] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 191 (Springer-Verlag, Berlin, 2003).
- [2] E. I. Rashba, Properties of semiconductors with an extremum loop. 1. cyclotron and combination resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop, *Sov. Phys. Solid State* **2**, 1109 (1960).
- [3] F. J. Ohkawa and Y. Uemura, Quantized Surface States of a Narrow-Gap Semiconductor, *J. Phys. Soc. Jpn.* **37**, 1325 (1974).
- [4] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **17**, 6039 (1984).
- [5] G. Dresselhaus, Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- [6] R. Winkler, Spin orientation and spin precession in inversion-asymmetric quasi-two-dimensional electron systems, *Phys. Rev. B* **69**, 045317 (2004).
- [7] S. Maekawa, S. O. Valenzuela, E. Saitoh, and T. Kimura, *Spin current*, Vol. 22 (Oxford University Press, 2017).
- [8] A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. M. Frolov, and R. A. Duine, New perspectives for Rashba spin-orbit coupling, *Nature Materials* **14**, 871 (2015).
- [9] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, Spintronics: Fundamentals and applications, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [10] T. Dietl and H. Ohno, Dilute ferromagnetic semiconductors: Physics and spintronic structures, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 187 (2014).
- [11] J. Železný, P. Wadley, K. Olejník, A. Hoffmann, and H. Ohno, Spin transport and spin torque in antiferromagnetic devices, *Nature Physics* **14**, 220 (2018).
- [12] T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich, Antiferromagnetic spintronics, *Nature Nanotechnology* **11**, 231 (2016).
- [13] V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, Antiferromagnetic spintronics, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).
- [14] J. Sinova, S. O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back, and T. Jungwirth, Spin Hall effects, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 1213 (2015).

- [15] V. M. Edelstein, Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems, *Solid State Communications* **73**, 233 (1990).
- [16] A. Manchon, J. Železný, I. M. Miron, T. Jungwirth, J. Sinova, A. Thiaville, K. Garello, and P. Gambardella, Current-induced spin-orbit torques in ferromagnetic and antiferromagnetic systems, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 035004 (2019).
- [17] E. O. Kane, Band structure of indium antimonide, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **1**, 249 (1957).
- [18] R. Lassnig, $k \rightarrow p$ theory, effective-mass approach, and spin splitting for two-dimensional electrons in GaAs-GaAlAs heterostructures, *Phys. Rev. B* **31**, 8076 (1985).
- [19] E. Bernardes, J. Schliemann, M. Lee, J. C. Egues, and D. Loss, Spin-Orbit Interaction in Symmetric Wells with Two Subbands, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 076603 (2007).
- [20] R. S. Calsaverini, E. Bernardes, J. C. Egues, and D. Loss, Intersubband-induced spin-orbit interaction in quantum wells, *Phys. Rev. B* **78**, 155313 (2008).
- [21] H. Akera, H. Suzuura, and Y. Egami, Spin relaxation in a quantum well by phonon scatterings, *Phys. Rev. B* **92**, 205311 (2015).
- [22] H. Akera, H. Suzuura, and Y. Egami, Gate-voltage-induced switching of the Rashba spin-orbit interaction in a composition-adjusted quantum well, *Phys. Rev. B* **95**, 045301 (2017).
- [23] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ Heterostructure, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1335 (1997).
- [24] T. Koga, J. Nitta, T. Akazaki, and H. Takayanagi, Rashba Spin-Orbit Coupling Probed by the Weak Antilocalization Analysis in $\text{InAlAs}/\text{InGaAs}/\text{InAlAs}$ Quantum Wells as a Function of Quantum Well Asymmetry, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 046801 (2002).
- [25] K. Hayashida and H. Akera, D'yakonov-Perel' spin relaxation in a bilayer with local structural inversion asymmetry, *Phys. Rev. B* **101**, 035306 (2020).
- [26] T. Iijima, Y. Egami, and H. Akera, Suppressing effective magnetic field and spin-relaxation rate by tuning barrier compositions in a (111) quantum well, *Japanese Journal of Applied Physics* **59**, 100901 (2020).
- [27] T. Iijima and H. Akera, Gate-Voltage-Induced Switching of the Spin-Relaxation Rate in a Triple-Quantum-Well Structure, *Phys. Rev. Applied* **13**, 064075 (2020).
- [28] T. Ishikawa and H. Akera, Antiparallel spin Hall current in a bilayer with skew scattering, *Phys. Rev. B* **100**, 125307 (2019).
- [29] J. Schliemann, Colloquium: Persistent spin textures in semiconductor nanostructures, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 011001 (2017).
- [30] M. Kohda, V. Lechner, Y. Kunihashi, T. Dollinger, P. Olbrich, C. Schönhuber, I. Caspers, V. V. Bel'kov, L. E. Golub, D. Weiss, K. Richter, J. Nitta, and S. D. Ganichev, Gate-controlled persistent spin helix state in $(\text{In}, \text{Ga})\text{As}$ quantum wells, *Phys. Rev. B* **86**, 081306 (2012).
- [31] R. J. Elliott, Theory of the Effect of Spin-Orbit Coupling on Magnetic Resonance in Some Semiconductors, *Phys. Rev.* **96**, 266 (1954).

- [32] Y. Yafet, g Factors and Spin-Lattice Relaxation of Conduction Electrons, in *Solid State Physics*, Vol. 14, edited by F. Seitz and D. Turnbull (Academic Press, 1963) pp. 1–98.
- [33] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, Spin relaxation of conduction electrons in noncentrosymmetric semiconductors, *Sov. Phys. Solid State* **13**, 3023 (1972).
- [34] M. I. Dyakonov and V. Y. Kachorovskii, Spin relaxation of two-dimensional electrons in non-centrosymmetric semiconductors, *Sov. Phys. Semicond.* **20**, 110 (1986).
- [35] M. Naka, S. Hayami, H. Kusunose, Y. Yanagi, Y. Motome, and H. Seo, Spin current generation in organic antiferromagnets, *Nature Communications* **10**, 4305 (2019).
- [36] K.-H. Ahn, A. Hariki, K.-W. Lee, and J. Kuneš, Antiferromagnetism in RuO₂ as *d*-wave Pomeranchuk instability, *Phys. Rev. B* **99**, 184432 (2019).
- [37] H. Bai, L. Han, X. Y. Feng, Y. J. Zhou, R. X. Su, Q. Wang, L. Y. Liao, W. X. Zhu, X. Z. Chen, F. Pan, X. L. Fan, and C. Song, Observation of Spin Splitting Torque in a Collinear Antiferromagnet RuO₂, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 197202 (2022).
- [38] A. Bose, N. J. Schreiber, R. Jain, D.-F. Shao, H. P. Nair, J. Sun, X. S. Zhang, D. A. Muller, E. Y. Tsymbal, D. G. Schlom, *et al.*, Tilted spin current generated by an antiferromagnet, *Nature Electronics* **5**, 263 (2022).
- [39] R. González-Hernández, L. Šmejkal, K. Výborný, Y. Yanagi, J. Sinova, T. Jungwirth, and J. Železný, Efficient Electrical Spin Splitter Based on Nonrelativistic Collinear Antiferromagnetism, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 127701 (2021).
- [40] L. Šmejkal, A. B. Hellenes, R. González-Hernández, J. Sinova, and T. Jungwirth, Giant and Tunneling Magnetoresistance in Unconventional Collinear Antiferromagnets with Nonrelativistic Spin-Momentum Coupling, *Phys. Rev. X* **12**, 011028 (2022).
- [41] M. Naka, Y. Motome, and H. Seo, Perovskite as a spin current generator, *Phys. Rev. B* **103**, 125114 (2021).
- [42] L.-D. Yuan, Z. Wang, J.-W. Luo, and A. Zunger, Strong influence of nonmagnetic ligands on the momentum-dependent spin splitting in antiferromagnets, *Phys. Rev. B* **103**, 224410 (2021).
- [43] L.-D. Yuan, Z. Wang, J.-W. Luo, E. I. Rashba, and A. Zunger, Giant momentum-dependent spin splitting in centrosymmetric low-*z* antiferromagnets, *Phys. Rev. B* **102**, 014422 (2020).
- [44] S. Hayami, Y. Yanagi, and H. Kusunose, Bottom-up design of spin-split and reshaped electronic band structures in antiferromagnets without spin-orbit coupling: Procedure on the basis of augmented multipoles, *Phys. Rev. B* **102**, 144441 (2020).
- [45] S. Karube, T. Tanaka, D. Sugawara, N. Kadoguchi, M. Kohda, and J. Nitta, Observation of Spin-Splitter Torque in Collinear Antiferromagnetic RuO₂, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 137201 (2022).
- [46] L. Šmejkal, J. Sinova, and T. Jungwirth, Emerging Research Landscape of Altermagnetism, *Phys. Rev. X* **12**, 040501 (2022).
- [47] K. Hayashida and H. Akera, Spin splitting of the conduction band by exchange interaction in the valence band through a $k \cdot p$ interband process in ferromagnetic semiconductors, *Phys.*

- Rev. B **105**, 235203 (2022).
- [48] G.-H. Chen and M. E. Raikh, Exchange-induced enhancement of spin-orbit coupling in two-dimensional electronic systems, *Phys. Rev. B* **60**, 4826 (1999).
- [49] M. Tanaka, Recent progress in ferromagnetic semiconductors and spintronics devices, *Japanese Journal of Applied Physics* **60**, 010101 (2020).
- [50] P. Nam Hai, L. Duc Anh, S. Mohan, T. Tamegai, M. Kodzuka, T. Ohkubo, K. Hono, and M. Tanaka, Growth and characterization of n-type electron-induced ferromagnetic semiconductor (In, Fe)As, *Applied Physics Letters* **101**, 182403 (2012).
- [51] P. Nam Hai, L. D. Anh, and M. Tanaka, Electron effective mass in n-type electron-induced ferromagnetic semiconductor (In, Fe)As: Evidence of conduction band transport, *Applied Physics Letters* **101**, 252410 (2012).
- [52] L. Duc Anh, P. Nam Hai, and M. Tanaka, Control of ferromagnetism by manipulating the carrier wavefunction in ferromagnetic semiconductor (In, Fe)As quantum wells, *Applied Physics Letters* **104**, 042404 (2014).
- [53] M. Kobayashi, L. D. Anh, P. N. Hai, Y. Takeda, S. Sakamoto, T. Kadono, T. Okane, Y. Saitoh, H. Yamagami, Y. Harada, M. Oshima, M. Tanaka, and A. Fujimori, Spin and orbital magnetic moments of Fe in the n-type ferromagnetic semiconductor (In, Fe)As, *Applied Physics Letters* **105**, 032403 (2014).
- [54] D. Sasaki, L. D. Anh, P. Nam Hai, and M. Tanaka, Interplay between strain, quantum confinement, and ferromagnetism in strained ferromagnetic semiconductor (In, Fe)As thin films, *Applied Physics Letters* **104**, 142406 (2014).
- [55] L. D. Anh, P. N. Hai, and M. Tanaka, Observation of spontaneous spin-splitting in the band structure of an n-type zinc-blende ferromagnetic semiconductor, *Nature Communications* **7**, 13810 (2016).
- [56] M. Kobayashi, L. D. Anh, J. Minár, W. Khan, S. Borek, P. N. Hai, Y. Harada, T. Schmitt, M. Oshima, A. Fujimori, M. Tanaka, and V. N. Strocov, Minority-spin impurity band in n-type (In, Fe)As: A materials perspective for ferromagnetic semiconductors, *Phys. Rev. B* **103**, 115111 (2021).
- [57] N. T. Tu, P. N. Hai, L. D. Anh, and M. Tanaka, High-temperature ferromagnetism in new n-type Fe-doped ferromagnetic semiconductor (In, Fe)Sb, *Applied Physics Express* **11**, 063005 (2018).
- [58] N. T. Tu, P. N. Hai, L. D. Anh, and M. Tanaka, Heavily Fe-doped ferromagnetic semiconductor (In, Fe)Sb with high Curie temperature and large magnetic anisotropy, *Applied Physics Express* **12**, 103004 (2019).
- [59] K. Nishijima, N. T. Tu, M. Tanaka, and P. N. Hai, Fe delta-doped (In, Fe)Sb ferromagnetic semiconductor thin films for magnetic-field sensors with ultrahigh Hall sensitivity, *Journal of Crystal Growth* **511**, 127 (2019).
- [60] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, and D. Ferrand, Zener Model Description of

- Ferromagnetism in Zinc-Blende Magnetic Semiconductors, *Science* **287**, 1019 (2000).
- [61] T. Dietl, H. Ohno, and F. Matsukura, Hole-mediated ferromagnetism in tetrahedrally coordinated semiconductors, *Phys. Rev. B* **63**, 195205 (2001).
- [62] T. Jungwirth, J. Wunderlich, V. Novák, K. Olejník, B. L. Gallagher, R. P. Campion, K. W. Edmonds, A. W. Rushforth, A. J. Ferguson, and P. Němec, Spin-dependent phenomena and device concepts explored in (Ga,Mn)As, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 855 (2014).
- [63] T. Jungwirth, J. Sinova, J. Mašek, J. Kučera, and A. H. MacDonald, Theory of ferromagnetic (III,Mn)V semiconductors, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 809 (2006).
- [64] L. C. L. Y. Voon and M. Willatzen, *The kp method: electronic properties of semiconductors* (Springer Science & Business Media, 2009).
- [65] M. Cardona and F. H. Pollak, Energy-Band Structure of Germanium and Silicon: The k-p Method, *Phys. Rev.* **142**, 530 (1966).
- [66] S. B. Radhia, N. Fraj, I. Saidi, and K. Boujdaria, The eight-level $k \cdot p$ model for the conduction and valence bands of InAs, InP, InSb, *Semiconductor Science and Technology* **22**, 427 (2007).
- [67] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys, *Journal of Applied Physics* **89**, 5815 (2001).
- [68] C. R. Pidgeon and R. N. Brown, Interband Magneto-Absorption and Faraday Rotation in InSb, *Phys. Rev.* **146**, 575 (1966).
- [69] J. M. Luttinger, Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory, *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956).
- [70] A. A. Abrikosov and L. P. Gor'kov, ON THE NATURE OF IMPURITY FERROMAGNETISM, *Sov. Phys. JETP* **16**, 1575 (1963).
- [71] J. K. Furdyna, Diluted magnetic semiconductors, *Journal of Applied Physics* **64**, R29 (1988).
- [72] S. Sakamoto and A. Fujimori, Chemical trend in the electronic structure of Fe-doped III-V semiconductors and possible origin of ferromagnetism: A first-principles study, *Journal of Applied Physics* **126**, 173910 (2019).
- [73] J.-Y. You, B. Gu, S. Maekawa, and G. Su, Microscopic mechanism of high-temperature ferromagnetism in Fe, Mn, and Cr-doped InSb, InAs, and GaSb magnetic semiconductors, *Phys. Rev. B* **102**, 094432 (2020).
- [74] G. Grosso and G. P. Parravicini, *Solid state physics* (Academic press, 2013).
- [75] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors, *Phys. Rev. B* **14**, 556 (1976).
- [76] P. W. Anderson, Absence of Diffusion in Certain Random Lattices, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [77] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions* (Taylor and Francis, London UK, 1990).
- [78] T. F. Rosenbaum, K. Andres, G. A. Thomas, and R. N. Bhatt, Sharp Metal-Insulator Transition in a Random Solid, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1723 (1980).

- [79] P. W. Anderson, New Approach to the Theory of Superexchange Interactions, *Phys. Rev.* **115**, 2 (1959).
- [80] G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* (Halsted, Les Ulis, France, 1988).
- [81] M. G. Burt, The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures, *Journal of Physics: Condensed Matter* **4**, 6651 (1992).
- [82] B. A. Foreman, Effective-mass Hamiltonian and boundary conditions for the valence bands of semiconductor microstructures, *Phys. Rev. B* **48**, 4964 (1993).
- [83] S. Adachi, Model dielectric constants of GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb, *Phys. Rev. B* **35**, 7454 (1987).
- [84] F. Nichele, M. Kjaergaard, H. J. Suominen, R. Skolasinski, M. Wimmer, B.-M. Nguyen, A. A. Kiselev, W. Yi, M. Sokolich, M. J. Manfra, F. Qu, A. J. A. Beukman, L. P. Kouwenhoven, and C. M. Marcus, Giant Spin-Orbit Splitting in Inverted InAs/GaSb Double Quantum Wells, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 016801 (2017).
- [85] G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, and H. Statz, *Properties of the thirty-two point groups*, Vol. 24 (MIT press, 1963).
- [86] M. Braun and U. Rössler, Magneto-optic transitions and non-parabolicity parameters in the conduction band of semiconductors, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **18**, 3365 (1985).
- [87] T. Jungwirth, W. A. Atkinson, B. H. Lee, and A. H. MacDonald, Interlayer coupling in ferromagnetic semiconductor superlattices, *Phys. Rev. B* **59**, 9818 (1999).
- [88] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong, Anomalous Hall effect, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1539 (2010).
- [89] Q.-Z. Wang, X. Liu, H.-J. Zhang, N. Samarth, S.-C. Zhang, and C.-X. Liu, Quantum Anomalous Hall Effect in Magnetically Doped InAs/GaSb Quantum Wells, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 147201 (2014).
- [90] F. D. M. Haldane, Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly", *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988).
- [91] L. Riney, J. Bermejo-Ortiz, G. Krizman, S.-K. Bac, J. Wang, M. Zhukovskyi, T. Orlova, L. A. de Vaultier, Y. Guldner, R. Winkler, J. K. Furdyna, X. Liu, and B. A. Assaf, Fermi level tuning and band alignment in Mn-doped InAs/GaSb, *Phys. Rev. B* **105**, 125301 (2022).
- [92] N. T. Tu, P. N. Hai, L. D. Anh, and M. Tanaka, (Ga,Fe)Sb: A p-type ferromagnetic semiconductor, *Applied Physics Letters* **105**, 132402 (2014).
- [93] T. Takeda, M. Suzuki, L. D. Anh, N. T. Tu, T. Schmitt, S. Yoshida, M. Sakano, K. Ishizaka, Y. Takeda, S.-i. Fujimori, M. Seki, H. Tabata, A. Fujimori, V. N. Strocov, M. Tanaka, and M. Kobayashi, Hybridization between the ligand p band and Fe- $3d$ orbitals in the p-type ferromagnetic semiconductor (Ga,Fe)Sb, *Phys. Rev. B* **101**, 155142 (2020).
- [94] A. Kormányos, G. Burkard, M. Gmitra, J. Fabian, V. Zólyomi, N. D. Drummond, and V. Fal'ko, Corrigendum: k.p theory for two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconduc-

- tors (2015 2D Mater. 2 022001), [2D Materials](#) **2**, 049501 (2015).
- [95] J. B. S. Mendes, A. Aparecido-Ferreira, J. Holanda, A. Azevedo, and S. M. Rezende, Efficient spin to charge current conversion in the 2D semiconductor MoS2 by spin pumping from yttrium iron garnet, [Applied Physics Letters](#) **112**, 242407 (2018).
- [96] K. Zollner and J. Fabian, Engineering Proximity Exchange by Twisting: Reversal of Ferromagnetic and Emergence of Antiferromagnetic Dirac Bands in Graphene/Cr₂Ge₂Te₆, [Phys. Rev. Lett.](#) **128**, 106401 (2022).
- [97] Z. Wang, C. Tang, R. Sachs, Y. Barlas, and J. Shi, Proximity-Induced Ferromagnetism in Graphene Revealed by the Anomalous Hall Effect, [Phys. Rev. Lett.](#) **114**, 016603 (2015).
- [98] N. Arabchigavkani, R. Somphonsane, H. Ramamoorthy, G. He, J. Nathawat, S. Yin, B. Barut, K. He, M. D. Randle, R. Dixit, K. Sakanashi, N. Aoki, K. Zhang, L. Wang, W.-N. Mei, P. A. Dowben, J. Fransson, and J. P. Bird, Remote Mesoscopic Signatures of Induced Magnetic Texture in Graphene, [Phys. Rev. Lett.](#) **126**, 086802 (2021).
- [99] J. M. Luttinger and W. Kohn, Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields, [Phys. Rev.](#) **97**, 869 (1955).
- [100] P. Löwdin, A Note on the Quantum - Mechanical Perturbation Theory, [The Journal of Chemical Physics](#) **19**, 1396 (1951).
- [101] J. R. Schrieffer and P. A. Wolff, Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians, [Phys. Rev.](#) **149**, 491 (1966).
- [102] G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and strain-induced effects in semiconductors* (Wiley New York, 1974).
- [103] J. H. Van Vleck, On σ -Type Doubling and Electron Spin in the Spectra of Diatomic Molecules, [Phys. Rev.](#) **33**, 467 (1929).
- [104] L. L. Foldy and S. A. Wouthuysen, On the Dirac Theory of Spin 1/2 Particles and Its Non-Relativistic Limit, [Phys. Rev.](#) **78**, 29 (1950).
- [105] P. W. Anderson, Localized Magnetic States in Metals, [Phys. Rev.](#) **124**, 41 (1961).
- [106] M. Wagner, *Unitary transformations in solid state physics* (North-Holland, Amsterdam, 1986).
- [107] Y. Peter and M. Cardona, *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties* (Springer Science & Business Media, 2010).
- [108] K. Suzuki and J. C. Hensel, Quantum resonances in the valence bands of germanium. I. Theoretical considerations, [Phys. Rev. B](#) **9**, 4184 (1974).
- [109] H. R. Trebin, U. Rössler, and R. Ranvaud, Quantum resonances in the valence bands of zinc-blende semiconductors. I. Theoretical aspects, [Phys. Rev. B](#) **20**, 686 (1979).
- [110] A. Raymond, J. L. Robert, and C. Bernard, The electron effective mass in heavily doped GaAs, [Journal of Physics C: Solid State Physics](#) **12**, 2289 (1979).
- [111] D. F. Nelson, R. C. Miller, and D. A. Kleinman, Band nonparabolicity effects in semiconductor quantum wells, [Phys. Rev. B](#) **35**, 7770 (1987).
- [112] U. Ekenberg, Nonparabolicity effects in a quantum well: Sublevel shift, parallel mass, and

- landau levels, *Phys. Rev. B* **40**, 7714 (1989).
- [113] R. Winkler and U. Zülicke, Invariant expansion for the trigonal band structure of graphene, *Phys. Rev. B* **82**, 245313 (2010).
- [114] F. Geissler, J. C. Budich, and B. Trauzettel, Group theoretical and topological analysis of the quantum spin Hall effect in silicene, *New Journal of Physics* **15**, 085030 (2013).