ビスマスにおけるディラック電子の理論

伏屋雄紀[1]，小形正男[2]，福山秀敏[3]
[1] 阪大基礎工，[2] 東大理，[3] 東理大理

平成 24 年 5 月 11 日

1 ディラック電子と反磁性

固体中ディラック電子が示す最も顕著なふるまいの一つは，巨大反磁性である[1)–7)]．そもそも反磁性という概念が発見されたのもディラック電子系の雛形であるビスマスにおいてであった[8)]．ビスマスの巨大反磁性の謎は多くの研究者を刺激し，1930 年のランダウ理論から始まる反磁性理論の発展を大いに促した．謎が最終的に解決に至ったのは 1970 年になってからで，その特異な反磁性は「バンド間磁場効果」によるものであることが明らかとなった[9)]．バンド間磁場効果についてはあとで詳しく述べるが，簡潔に言えば次の様になる．考えている系のブロッホバンドが $E_n(\boldsymbol{k})$ で与えられたとき，しばしば磁場中の有効ハミルトニアンは $\mathscr{H}_{\mathrm{eff}} = E_n(\boldsymbol{k} + e\boldsymbol{A}/c)$ として議論される．これはブロッホ表示に基づいた議論であり，バンド内効果しか含まない．しかし状況によっては，電子はブロッホバンドに閉じ込められることなく，バンド間をまたぐ効果が顕著になり得る．この非自明な効果はブロッホ表示では一切考慮されない．この効果が「バンド間磁場効果」である．

バンド間磁場効果が顕著な場合はどのような場合か．それは例えばゼロ磁場のハミルトニアンにおいて，波数に依存した非対角成分が大きな値をとっている場合である．そうした状況がまさにディラック電子系では実現している．

固体中ディラック電子のハミルトニアンは例えば次の様な形をもつ：

$$\mathscr{H} = \begin{pmatrix} \Delta & \mathrm{i}\gamma\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ -\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{pmatrix}. \qquad (1)$$

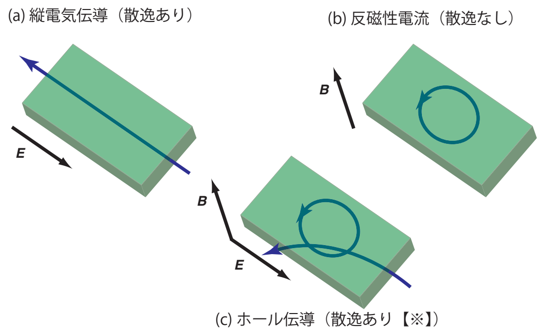

図 1: 各種外場に対する電子の流れ.【※】ホール伝導と反磁性電流の間には“ 何らかの ”関連性がある．

バンドギャップ Δ と速度演算子の行列要素 $\mathrm{i}\gamma$ は，それぞれ元のディラック理論において質量項 mc^2 と光速 c に対応している．非対角成分が対角成分に比して大きな値をとるのは，元のディラック理論においては電子速度が光速に近いことに対応する．すなわち，ディラック電子系の反磁性はまさに相対論的効果が巨視的な物性に現れた一例といえる．

バンド間磁場効果は他の物理量に対しても影響を与えうる．特に磁場中輸送現象，すなわちホール効果に顕著な影響が現れることが予想される．歴史的にみておそらく最初にバンド間効果を通した反磁性とホール効果の関連性を指摘したのは，Kubo-Fukuyama (1970) の論文中である[10)]：

「伝導度テンソルの対称部分は散逸的な応答であるのに対し，反対称部分は分散的な応答である．このことは σ_{yx} の構成要素がある特定のエネルギー

殻に閉じ込められていないことを意味し，それゆえ σ_{yx} は一般的にバンド間効果を内包する．ブロッホ表示に基づくボルツマン方程式から導かれた表式ではバンド内効果しか含んでいない．輸送現象であるホール伝導度は，磁化率に比してより複雑である．更に磁性は本質的に量子力学的であるのに対し，ホール伝導度は必ずしもそうではない．こうした相違点にも関わらず，両物理現象におけるバンド間効果は何らかの形で互いに関連しているに違いない.」（伏屋訳）

もう少し噛み砕いて述べるとすれば次の様になろうか（図 1）．物質に電場をかけて発生する通常の伝導度 σ_{xx} が散逸を生むことは周知の事実である．一方，電場の代わりに磁場をかければ，反磁性電流が流れる．これは熱平衡な電流で，散逸を生まない．さて電場と磁場を同時に印可する場合はどうか．当然よく知られたホール伝導が生じる．これは輸送現象である限り一般的に散逸を伴っているはずである．しかし同時に磁場がかかっている以上，反磁性電流も流れており，これは散逸を生じない．ここで現れる輸送現象も反磁性も，全て同種の電子が生み出す現象であり，それぞれが異なる電子によって生み出されているわけはない．とすると，反磁性とホール伝導度は何らかの関係を持ってしかるべきであろう．そしてその関連性は，理論的には，バンド間効果を通して結びつけられていると考えるのが妥当である．

この様に早い段階で反磁性と輸送現象の関連性が指摘されていたにも関わらず,「反磁性と輸送現象が如何なる繋がりをもつのか」という疑問は長らく謎のままであった．最近，ディラック電子系の輸送現象におけるバンド間効果についてはようやく研究が進み，その理解が深まってきた[3),4),11)]．

本稿ではビスマスにおいて如何にディラック電子が実現しているのかを見た後，反磁性とバンド間効果という視点から輸送現象を眺め，スピンホール効果[12)]と完全スピン偏極電流[13)]に関する最近の話題を紹介する．

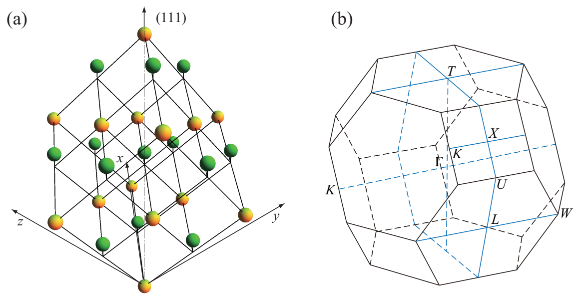

図 2: (a) ビスマスの結晶構造．(b) ブリルアンゾーン．

2　ビスマス有効模型の構築

2.1　結晶構造と電子構造

ビスマス結晶は菱面体（rhombohedral，あるいは三方晶）構造を持つ (図 2)．一見複雑な構造ではあるが，単純立方格子にわずかな変位と変形が加わっただけである．基本的には NaCl 型の二つの面心立方（fcc）副格子のうち，片方の副格子に属する格子点を対角線方向にずらし，全体の格子を対角線方向に引き延ばした構造である．

そのブリルアンゾーンは図 2(b) の様によく知られる fcc のものとほぼ同じ形を持つ．結晶変位の無い fcc であれば T 点は L 点と同じ対称性を持つが，わずかな結晶変位の為，両者は等価でなくなる．L 点は 120° 間隔で 3 つあるのに対し，T 点は 1 つだけである．

様々な実験による解析の結果，今ではビスマスのバンド構造は非常に詳細なところまで明らかにされている[14)–16)]．バンドギャップやフェルミエネルギーが 15meV 程度と非常に小さいエネルギースケールを持っている為，実験と定量的によく合う第一原理計算はまだ得られていないが，低エネルギーの電子構造に関して実験結果を良く再現する様に変数を選んだ強束縛近似計算で得られたバンド構造を図 3 に示す[17)]．

単位胞中には 2 つの原子があり，それぞれの原子あたり 5 つの価電子を持つ ($6s^2 6p^3$)．s 電子の結合・反結合バンドはフェルミ準位より 10 eV ほど深いところにあり，物性に寄与するのはほぼ p 軌

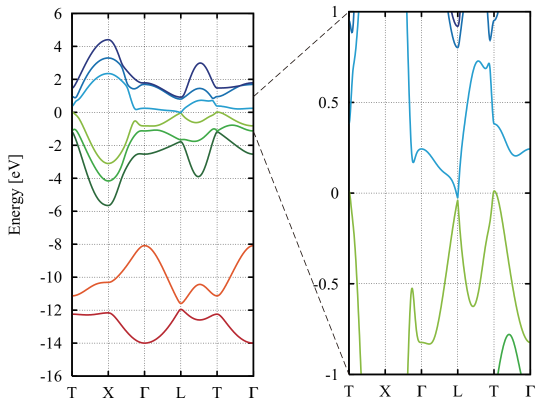

図 3: ビスマスのバンド構造．Liu-Allen (1995) の強束縛近似による[17]．

道である．共有結合性の高い二元素の fcc 構造では，p 軌道の結合バンド全てに電子がつまり，半導体になる．ところがビスマスの場合，単元素ということもあり，結晶構造をわずかに変位させ，バンドに重なりを作って半金属となった方が金属結合エネルギーを稼げて安定となる．このためほとんど充填された p 軌道の結合バンドは T 点でわずかにフェルミ準位より高くなり，ホールフェルミ面を形成する．そのかわり L 点の反結合軌道はわずかにフェルミ面より低くなり，電子が流れ込む．バンド構造の低エネルギー部分を拡大してみれば，L 点で線形性が強く非常に速度の大きい電子フェルミ面があり，T 点には線形性のやや弱いホールフェルミ面があることが分かる（図 3 右）．

2.2　ビスマスの有効模型

現代にも通じるビスマスの有効模型を最初に導入したのは Cohen と Blount である[18]．彼らはスピン軌道相互作用を含むハミルトニアンに $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論を適用した．まずスピン軌道相互作用を含む一般的なハミルトニアン

$$\mathscr{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla}V(\boldsymbol{r})\times\boldsymbol{p} \quad (2)$$

を考える．$V(\boldsymbol{r})$ は結晶の周期ポテンシャルで，第 3 項がスピン軌道相互作用を表す．固有関数は通常，ブロッホ関数 $\psi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ を用いて展開される．完全系を成すブロッホ関数を用いれば，あらゆる波動関数を $\psi_{n\boldsymbol{k}}$ で展開することができる．一方，バンドの底，もしくは頂上（バンド端）におけるブロッホ関数

$$\chi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_{n\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r}) \quad (3)$$

を用いても，波動関数を展開することができる．この展開は $u_{n\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r})$ が完全系を成している限り厳密であり，$u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{n'}\phi_{nn'}(\boldsymbol{k})u_{n'\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r})$ を通して元のブロッホ関数と関連づけられている．$\boldsymbol{k}$ を $\boldsymbol{k}_0$ 近傍に限れば有限個の波動関数で $u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ を適切に記述することができる．これがいわゆる $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論である．

Cohen-Blount の 2 バンド模型ではスピンの依存性も含んだ 4 つのバンド端波動関数の展開で十分な結果を与える．この 4 つのバンド端波動関数を $\phi_{i=1\sim4}$ とすれば，シュレディンガー方程式は

$$\begin{pmatrix} \Delta-\mathscr{E} & 0 & \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t} & \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{u} \\ 0 & \Delta-\mathscr{E} & -\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{u}^* & \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}^* \\ \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}^* & -\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{u} & -\Delta-\mathscr{E} & 0 \\ \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{u}^* & \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t} & 0 & -\Delta-\mathscr{E} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix} = 0 \quad (4)$$

となる．これを L 点付近の有効ハミルトニアンと見なす．ここで時間および結晶の反転対称性から，速度演算子

$$\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{p}}{m} + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{\nabla}V(\boldsymbol{r}) \quad (5)$$

の行列要素

$$\boldsymbol{v}_{nn'} = \int d^3\boldsymbol{r}\, u^*_{n\boldsymbol{k}_0}\boldsymbol{v}u_{n'\boldsymbol{k}_0} \quad (6)$$

の間には $\boldsymbol{t} = \boldsymbol{v}_{13} = \boldsymbol{v}_{42}$, $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}_{14} = -\boldsymbol{v}_{32}$ の関係が成り立っている．また $\mathscr{E} = E - k^2/2m$ であり，ビスマスでは k^2-依存性がほとんど見られないことから，$\mathscr{E} \simeq E$ としてよい．

このハミルトニアンでは 4 つのベクトル — $\mathrm{Re}(\boldsymbol{t}), \mathrm{Im}(\boldsymbol{t}), \mathrm{Re}(\boldsymbol{u}), \mathrm{Im}(\boldsymbol{u})$ が系の性質を特徴づける．しかしこのうち一つの自由度は適切な基底関数を用いて消去することが出来る．例えば $\mathrm{Re}(\boldsymbol{t}) = 0$ となる様に基底関数を選べば，Cohen-Blount のハ

ミルトニアンは

$$\mathscr{H} = \Delta\beta + \mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\left[\sum_{\mu=1}^{3}\boldsymbol{W}(\mu)\beta\alpha_{\mu}\right] \tag{7}$$

$$\alpha_{\mu} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{\mu} \\ \sigma_{\mu} & 0 \end{pmatrix},\ \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \tag{8}$$

と書き換えられ，まさにディラックハミルトニアンと同様の形式で表されることとなる．このことは Wolff によって初めて指摘され，(7) 式を「Wolff ハミルトニアン」と呼ぶ．速度の異方性を反映した $\boldsymbol{W}(\mu)$ なるベクトルが導入されており，本来の等方的なディラック理論よりやや複雑な形をとっているが，単に異方的に拡張しただけで，本質は同じである．

ここまでの議論はスピン軌道相互作用を含んだハミルトニアンを 2 バンド系に適用しただけの一般的議論である．従って Wolff ハミルトニアンはビスマスに限らず，スピン軌道相互作用の強い系に広く適用できる一般的ハミルトニアンである．

ディラック電子としての特徴は等方的な近似を行った場合でも十分とらえることが出来る．そこで以降は話の見通しを良くする為にも，前掲 (1) 式で与えた“ 等方的 ”Wolff ハミルトニアンを考える．γ が等方的な速度演算子の行列要素であり，$\boldsymbol{W}(\mu)$ に対応する．

ここでグラフェン型のディラック電子との比較を行っておく．グラフェンの有効ハミルトニアンは 2×2 行列の

$$\mathscr{H} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma(k_x - \mathrm{i}k_y) \\ \gamma(k_x + \mathrm{i}k_y) & 0 \end{pmatrix} \tag{9}$$

で与えられる[5),6)]．有機導体 α-$(\mathrm{ET})_2\mathrm{I}_3$ に現れる傾いたディラック電子もこの種に属する[7)]．上記グラフェン型ハミルトニアンはしばしば $\mathscr{H} = \gamma\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ とパウリ行列を用いても表され，等方的 Wolff ハミルトニアン (1) と非常によく似た形を持つ．ただし，次に述べる様にいくつかの本質的な相違点がある．

まずビスマス型 (1) 式は 4×4 行列であるのに対し，グラフェン型 (9) 式は 2×2 行列である．(1) 式でディラック表示からワイル表示に基底を取り替え，質量項 Δ をゼロにとると，部分対角化されて 2 つの 2×2 行列に還元される．その二次元版が (9) 式である．(本来はゼロ質量のニュートリノを議論する為にワイル表示が用いられた．) 従ってグラフェン型のディラック模型を特に区別してワイル模型と呼ぶ．

更に大きな違いは，ビスマス型で現れるパウリの “スピン行列”$\boldsymbol{\sigma}$ は本来のスピンを表すのに対し，グラフェン型で現れる “パウリ行列”$\boldsymbol{\sigma}$ は AB 副格子の自由度を擬スピンに見立てたもので，本来のスピンとは関係がない点である．従ってビスマス型では実際のスピンが絡んだ物性が出現するのに対し，グラフェン型では実際のスピンは和をとるだけで表に出てこない．その代わり，擬スピンがからんだ物性が出現する[19),20)]．

こうした相違点がある一方で，やはりグラフェン型とビスマス型のディラック電子は共通したふるまいが多く見られる．それら共通点を通して互いの物質群の研究が相補的に発展していくことが期待される．

3　磁場中のディラック電子

3.1　バンド間磁場効果と Luttinger-Kohn 表示

ディラック電子の特徴は様々あるが，特に磁場中でその特殊性が明確になる．ただし磁場の効果を正しく取り扱わなければ，その特殊性は浮かび上がってこない．そこでは，しばしば無視されるバンド間磁場効果が本質的な役割を演じる．

本稿はじめで述べた様に，磁場の効果は多くの場合ブロッホ関数と有効ハミルトニアン $\mathscr{H}_{\mathrm{eff}} = E_n(\boldsymbol{k}+e\boldsymbol{A}/c)$ を用いて考慮される．この簡便な方法は様々な問題に適用され，成功を収めてきた．例えば磁化率を計算すれば，有名な Landau-Peierls の反磁性公式が導かれ，輸送係数であればよく知られたホール効果の表式を与える．しかしながら，この方法ではバンド間効果を無視してしまっている．

磁場の効果を簡単かつ厳密に取り扱う為に，Luttinger-Kohn はブロッホ関数ではなく，前述の $\chi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ なる関数 (3) を考えた．この関数は $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論で登場するものと同じであるが，もっと深い

意味を持つことが Luttinger-Kohn によって示された[21)].

完全直交系を成すブロッホ関数 $\psi_{n\boldsymbol{k}}$ と同様，$\chi_{n\boldsymbol{k}}$ も完全直交系をなし，この関数を用いて任意の関数を展開することができることは既に述べた．また当然のことながら，$\psi_{n\boldsymbol{k}}$ と $\chi_{n\boldsymbol{k}}$ はユニタリ変換で結びついているので，Luttinger-Kohn の関数 $\chi_{n\boldsymbol{k}}$ を用いてもブロッホ関数を用いた場合と等価な結果を得る．ただし，両者の $\boldsymbol{k}$ 依存性が異なる為，磁場中の計算の複雑さに格段の差が出る．

磁場の効果を考える場合，$\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} + e\boldsymbol{A}/c$ の置き換えを行えばよいのだが，ブロッホ関数を用いた場合，位相部分と周期関数部分 $u_{n\boldsymbol{k}}$ 両方の波数 $\boldsymbol{k}$ に対してこの置換を行う必要がある．一般に，ベクトルポテンシャルは外場であるため，周期関数との相性が悪く，取り扱いが著しく困難になる．そこで $u_{\boldsymbol{k}}$ の中の $\boldsymbol{A}$ の効果を無視したものが $\mathscr{H}_{\rm eff} = E_n(\boldsymbol{k} + e\boldsymbol{A}/c)$ とする近似に相当する．

ところが，Luttinger-Kohn の関数 $\chi_{n\boldsymbol{k}}$ を用いて磁場の効果を考える場合，周期関数部分 $u_{n\boldsymbol{k}_0}$ にははじめから波数依存性が無い為，位相部分にのみ $\boldsymbol{A}$ の効果を考慮するだけで厳密な取り扱いが可能となる．その結果，バンド間の効果も必然的に取り入れられる．繰り返しになるが，$\psi_{n\boldsymbol{k}}$ を用いても $\chi_{n\boldsymbol{k}}$ を用いても両者はユニタリ変換で結ばれており，理論として等価である．よってブロッホ表示に基づいて磁場の効果を厳密に取り扱うことも可能であるが，それには非常な困難が伴う[22)]．一方 Luttinger-Kohn 表示に基づけば圧倒的に簡単で厳密な結果を得ることが出来る．表示の取り方一つでここまで取り扱い易さが劇的に変わるのは驚きであるが，これが Luttinger-Kohn 表示の威力であり，$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論に秘められていた利点である．

3.2 固体中ディラック電子の場合

バンド間磁場効果は Luttinger-Kohn 表示に基づくと厳密に取り扱えることは前節で述べた．Wolff ハミルトニアン (7) はまさに $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論の帰結として得られたわけであるから，自然と Luttinger-Kohn 表示が採られている．従って今の場合，単純に $\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} + e\boldsymbol{A}/c\ (\equiv \boldsymbol{\pi})$ の置き換えをするだけで磁場の効果を厳密に取り扱うことが出来る：

$$\mathscr{H}\psi = \begin{pmatrix} \Delta & \mathrm{i}\gamma\boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ -\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_{\rm c}\\ \psi_{\rm v}\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}\psi_{\rm c}\\ \psi_{\rm v}\end{pmatrix}. \tag{10}$$

この方程式から，次の関係式が導かれる：

$$\left(\frac{\pi^2}{2m_{\rm c}^*} + \frac{g^*\mu_{\rm B}}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right)\psi_{\rm c,v} = \frac{E^2-\Delta^2}{2\Delta}\psi_{\rm c,v} \tag{11}$$

ここで $m_{\rm c}^* = \Delta/\gamma^2$, $g^* = 2m/m_{\rm c}^*$, $\mu_{\rm B} = e/2mc$, 交換関係 $\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\pi} = -\mathrm{i}e\boldsymbol{B}/c$ から $(\boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = \boldsymbol{\pi}^2 + (e/c)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$ となることを用いた．左辺はよく知られた磁場中自由電子のハミルトニアンと全く同じ形をしている．従ってそのエネルギー固有値は直ちに求まり，最終的なエネルギーとして

$$\pm E_{n,\sigma}(k_z) = \pm\sqrt{\Delta^2 + 2\Delta\epsilon_{n,\sigma}(k_z)}, \tag{12}$$

$$\epsilon_{n,\sigma}(k_z) = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2}\right)\omega_{\rm c}^* + \frac{k_z^2}{2m_{\rm c}^*} \tag{13}$$

が求まる．磁場は z 軸方向とし，$\omega_{\rm c}^* = eB/m_{\rm c}^*c$ はサイクロトロン振動数である．

この固有エネルギーの表式は，多くを物語っている．まず第一に，エネルギーは

$$j = n + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2} = 0, 1, 2, \cdots \tag{14}$$

を良い量子数とする．自由電子の磁場中エネルギーはよく知られる様に $(n+1/2)\omega_{\rm c}$ といった半整数の形で与えられる．従って，最低ランダウ準位 $E_{n=0}$ も磁場に比例して上昇する．それがディラック電子の場合，さらに $\sigma/2$ の項が付加され，最低ランダウ準位 $E_{j=0}$ は常にバンド端に固定される（図 10 参照）．この追加のスピン項は (11) 式左辺の第２項に起因する．この第２項は裸の電子スピンから生まれるゼーマン項とは異なり，その g 因子は第１項と共通の $\omega_{\rm c}^*$ を用いて $\sigma\omega_{\rm c}^*/2$ と表すことができる．言い方を変えれば，軌道質量 $m_{\rm c}^*$ とスピン質量 $m_{\rm s} \equiv 2m/g^*$ がディラック電子では厳密に一致していることになる．

軌道質量とスピン質量が等しいという事実はまた，$j \geq 1$ のランダウ準位が常に二重縮退しているという結果に繋がる．ただしこの二重縮退は n が異なる準位どうしの縮退（ $E_{n,\sigma=+1}$ と $E_{n+1,\sigma=-1}$）

であり，最低ランダウ準位 $j=0$ のみは縮退せずに孤立する．この縮退しない特殊な性質を持った最低ランダウ準位が，後述するスピン偏極電流を可能とする．

もう一つディラック電子の特殊な性質が読み取れる．伝導帯と価電子帯で磁気モーメントの符号が異なるのである．本来のディラック理論において真空中の電子スピンを導いたのと同様に，固体中ディラック電子のスピンを導いてみる．今一度 (10) 式に立ち戻り，伝導帯の底，価電子帯の頂上から計り直したエネルギー $E'_{\mathrm{c}}=E-\Delta$, $E'_{\mathrm{v}}=E+\Delta$ が $|E'_{\mathrm{c}}|,|E'_{\mathrm{v}}|\ll\Delta$ として計算を進める．この近似は本来のディラック理論で言えば，非相対論的な場合を考えることに相当する．すると伝導帯と価電子帯のエネルギーはそれぞれ

$$E'_{\mathrm{c}}\simeq+\left(\frac{\pi^2}{2m^*_{\mathrm{c}}}+\frac{g^*\mu_{\mathrm{B}}}{2}\sigma B\right) \tag{15}$$

$$E'_{\mathrm{v}}\simeq-\left(\frac{\pi^2}{2m^*_{\mathrm{c}}}+\frac{g^*\mu_{\mathrm{B}}}{2}\sigma B\right) \tag{16}$$

となる．結果，磁気モーメントの符号 ((15), (16) 式右辺第二項) が伝導帯と価電子帯で反転するということが起こる．これをふまえて固体中ディラック電子の磁気モーメントを定義すれば，

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{e}}=-\frac{g^*\mu_{\mathrm{B}}}{2}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & -\boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix} \tag{17}$$

となる．

4　反磁性

冒頭で触れた様に，固体中ディラック電子の特殊性が最も顕著に現れるのは，反磁性においてである．反磁性理論の歩みはディラック電子とともにあるといってもよい．

ランダウ反磁性の概念を結晶中に拡張したのは Peierls で，エネルギー分散 $\epsilon_l(\boldsymbol{k})$ を持つ固体の反磁性は次の公式（Landau-Peierls 公式と呼ばれる）で与えられる：

$$\frac{\chi_{\mathrm{LP}}}{\chi_0}=\int d\boldsymbol{k}\left\{\frac{\partial^2\epsilon_l}{\partial k_x^2}\frac{\partial^2\epsilon_l}{\partial k_y^2}-\left(\frac{\partial^2\epsilon_l}{\partial k_x\partial k_y}\right)^2\right\}\frac{\partial f(\epsilon_l)}{\partial\epsilon_l}. \tag{18}$$

（バンドが複数あるときは l についての和をとる．$\chi_0=e^2/48\pi^3c^2$）この公式は大変有用で，多くの物質の反磁性を精度よく見積もることが出来る．しかし Peierls 自身がその著書で指摘している様に，この公式は $\mathscr{H}_{\mathrm{eff}}=E_n(\boldsymbol{k}+e\boldsymbol{A}/c)$ の近似によって得られたものであり，正確ではなく，バンド間磁場効果が完全に抜け落ちている[23]．その結果，χ_{LP} はフェルミ準位近傍だけの性質のみを反映する因子 $\partial f/\partial\epsilon_l$ に比例している．このような不十分さにも関わらず，多くの物質の反磁性ではバンド間磁場効果が小さい為，Landau-Peierls 公式はおよそ正確な結果を与えたのであった．

ところが，ビスマスの巨大な反磁性は，Landau-Peierls 理論では全く説明がつかない．ビスマスはキャリア密度が極めて低い ($n\sim10^{17}$ cm^{-3}) にも関わらず，その反磁性はグラファイトと並び非常に大きな値をとる．およそキャリア密度に比例する χ_{LP} では到底ビスマスの巨大反磁性を説明できるものではない．更に詳細な実験の結果，ビスマスの反磁性は化学ポテンシャルがバンドギャップの中に入り，絶縁体となったときに最大値をとることが明らかとなり，謎はいよいよ顕在化した[24),25]．

この謎が解明されるに至るまで長い道のりを経るが，結論だけを述べれば，このビスマス反磁性の謎は，スピン軌道相互作用を通して現れる大きなバンド間磁場効果を取り入れることによって解明された[9]．

Luttinger-Kohn 表示に基づいて軌道磁化率を求めれば，次の厳密な表式を得る[26]：

$$\chi=\frac{e^2}{c^2}T\sum_{n,\boldsymbol{k}}\mathrm{Tr}\left[\mathscr{G}v_x\mathscr{G}v_y\mathscr{G}v_x\mathscr{G}v_y\right]. \tag{19}$$

ここで $\mathscr{G}=[\mathrm{i}\varepsilon_n-\mathscr{H}]^{-1}$ は温度グリーン関数，$\boldsymbol{v}=\partial\mathscr{H}/\partial\boldsymbol{k}$ は速度演算子を表す．この公式 (19) は１行だけの非常に単純な形にも関わらず，ブロッホ表示に基づく Hebborn-Sondheimer の結果（12 行にも及ぶ !$^{27)}$）をはじめとする厳密ではあるが複雑極まりない表式と全く一致するのだから驚きである．この公式を用いれば，如何なる場合も自動的に反磁性の厳密な結果をただちに得ることが出

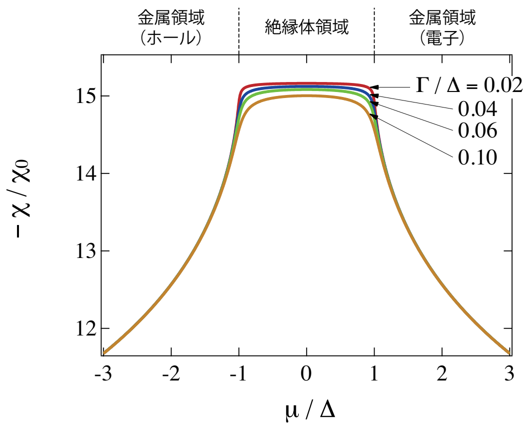

図 4: 軌道磁化率の化学ポテンシャル依存性．($\chi_0 = e^2\gamma/6\pi^2c^2$)

来る．等方的 Wolff ハミルトニアンに適用すれば，

$$\chi = \frac{e^2\gamma}{6\pi^2c^2}\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon f(\varepsilon-\mu) \times\left[\frac{1}{\sqrt{(\varepsilon+\mathrm{i}\Gamma)^2-\Delta^2}}-\frac{1}{\sqrt{(\varepsilon-\mathrm{i}\Gamma)^2-\Delta^2}}\right] \tag{20}$$

となる（正方根の分枝切断は正の実軸）．ここで $\mathrm{i}\tilde{\varepsilon}_n = \mathrm{i}\varepsilon_n + \mathrm{i}\Gamma\mathrm{sgn}(\varepsilon_n)$ として不純物散乱の効果 Γ を導入している．結果には f に比例する項，すなわちバンド間効果のみが現れ，f' に比例する項しか現れない χ_{LP} と大きく異なる．得られた結果の化学ポテンシャル μ 依存性を図 4 に示した．$|\mu| < \Delta$ が絶縁体領域で，$|\mu| > \Delta$ は金属領域，そのキャリアは $\mu > \Delta$ では電子が，$\mu < -\Delta$ ではホールが担っている．ビスマスの場合，アンチモンなどをドープすることで，簡単に μ を制御することができる．例えば 7%のアンチモンドープで半金属から半導体へと転移する[28]．

図 4 は異なる Γ の値についての結果を表示しているが，Γ 依存性はほぼ無いといってよい．このことは反磁性電流が不純物効果を受けない熱平衡量に由来すること思い出せば当然の結果と言える．従って $\Gamma \to 0$ でも有限の値が残り，同じ極限では発散する一般的な伝導度と対照的である．以上よりディラック電子系の反磁性磁化率は，次の特徴を持つ：(1) 金属領域において，キャリア数が減るにつれ対数的に増加する；(2) 絶縁体領域で最大値をとる：(3) その最大値はギャップの大きさに対して対数的に依存する．Landau-Peierls 公式に基づく “常識的” な反磁性の理解とはかけ離れた上記の特殊なふるまいは，全てバンド間磁場効果の帰結であり，ハミルトニアンの非対角成分に現れるスピン軌道相互作用による．こうしてビスマスの巨大反磁性は「スピン軌道相互作用に伴うバンド間磁場効果」が起源であると理解されるに至った[9]．グラファイト，グラフェンや有機導体に見られる他のディラック電子系においても同じくバンド間磁場効果が原因となって大きな反磁性が得られるが[19),29),30]，この場合のバンド間磁場効果は副格子の自由度に伴って現れるもので，スピン軌道相互作用とは関連しないという点で，ビスマスの反磁性とはその起源を異にする．

5 バンド間ホール効果

いよいよ本題の輸送現象に入る．計算することは単純で，久保公式を等方的 Wolff 模型に適用するだけである．ただし反磁性の議論と理論的に同等の枠組みにするべく，磁場の取り扱いに注意して Luttinger-Kohn 表示に基づいた計算を行い，バンド間磁場効果に注目して結果を解析する．久保公式に基づいて等方的 Wolff 模型のホール伝導度を求めると次の様になる[11]：

$$\sigma_{xy} = \frac{e^3\gamma B}{12\pi^2c}\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon\left[K_{xy}^{\mathrm{I}}f'(\varepsilon-\mu)+K_{xy}^{\mathrm{II}}f(\varepsilon-\mu)\right], \tag{21}$$

$$K_{xy}^{\mathrm{I}} = \left[\frac{Z^4+\mathrm{i}\Gamma\varepsilon Z^2-2\Gamma^4-\Gamma^2(\Delta^2-2\mathrm{i}\Gamma\varepsilon)}{2\Gamma^2\varepsilon^2\sqrt{\tilde{\varepsilon}^2-\Delta^2}} + \mathrm{c.c.}\right]\mathrm{sgn}(\varepsilon),$$
$$K_{xy}^{\mathrm{II}} = \left[\frac{\varepsilon+\mathrm{i}\Gamma}{(\tilde{\varepsilon}^2-\Delta^2)^{3/2}}+\mathrm{c.c.}\right]\mathrm{sgn}(\varepsilon), \tag{22}$$
$$Z^2 = \varepsilon^2-\Delta^2, \qquad \tilde{\varepsilon} = \varepsilon+\mathrm{i}\Gamma. \tag{23}$$

詳細はさておき，式の大まかな構造をみていただきたい．フェルミ分布関数の微分 f' に比例する項

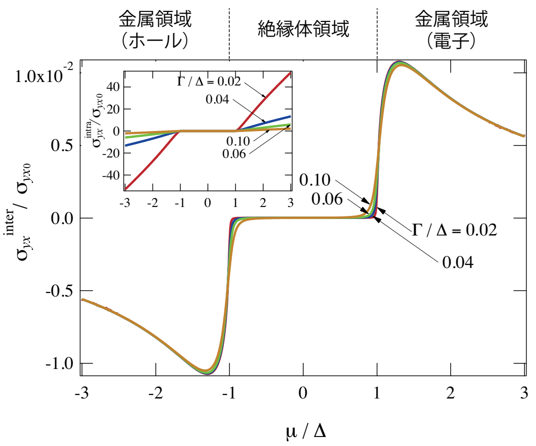

図 5: バンド間ホール伝導度の化学ポテンシャル依存性．挿入図はバンド内ホール伝導度．($\sigma_{yx0} = e^3\gamma B/c$)

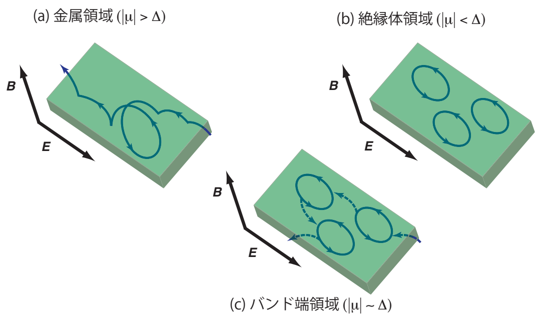

図 6: (a) 通常の（バンド内）ホール伝導，(b) 反磁性電流，(c) バンド間ホール伝導，の概念図．

K^{I}_{xy} と分布関数そのもの f に比例する項 K^{I}_{xy} に分けられる．これが σ_{xx} の場合には，全て $f'(\varepsilon)$ に比例する形で表される．つまり σ_{xx} ではバンド内効果のみが寄与するのに対し，σ_{xy} はバンド間効果も現れる．このことは一般的な σ_{xy} でも同様であるが，そのバンド間効果は非常に小さく，無視されることが多い．しかしディラック電子系では，次に示す様に，それが特殊なふるまいをするという点で刮目に値する．

図 5 はバンド間ホール伝導度の化学ポテンシャル μ 依存性である．(ここではバンド間の寄与をより正確に求める為，(21) 式で厳密に求めたものからブロッホ近似で求めたバンド内の寄与を差し引いてバンド間ホール伝導度としている．) 挿入図はバンド内ホール伝導度に相当する．バンド内とバンド間のホール伝導度を比べると，明らかに両者の性質が異なることが分かる．バンド内の寄与は“常識的” で，およそ $\sigma_{yx}^{\mathrm{intra}} = \mu \pm \Delta$ として与えられる．これは $N(\varepsilon) \propto \varepsilon^2$ の状態密度を考えれば容易に理解される．そして，$\sigma_{yx}^{\mathrm{intra}} \propto \Gamma^{-2}$ の様に不純物散乱によって著しく抑制されるという点も従来の理解と矛盾しない[31]．

ところが，である．図 5 に示した様に，バンド間ホール伝導度はバンド内のそれとは全く異なったふるまいを示す．伝導電子数は $|\mu - \Delta|^3$ に比例して与えられ，バンド端 $|\mu| = \Delta$ でゼロとなるにも関わらず，バンド間ホール伝導度はそのバンド端で最大値をとり，金属領域で $\sigma_{yx} \propto \mu^{-1}$ と減少する．このふるまいは明らかに，バンド間ホール効果が伝導電子によって生み出されているのではないことを示唆する．更に注目すべきは，不純物散乱によって全く影響を受けないことである．これは通常の輸送現象の理解からはかけ離れたふるまいである．こうしたバンド間ホール伝導度の特徴は，反磁性磁化率と多くの共通点を有しており，まさにバンド間効果という視点から両者が結びつけられていることを物語っている．

以上のことから我々は，バンド間ホール伝導度は反磁性電流とその起源を同じうしていると考えている．その直感的解釈は次の様なものである．絶縁体領域では（図 6(b)），電場がかかってはいても伝導電子数はゼロであるため結晶を流れる電子はない．しかし磁場がかかっているので，局所的に（磁気長さ程度の半径をもつ）周回運動している電子は存在し，これが反磁性電流を作っている．ここでわずかに μ を上昇させ，バンド端をよぎったとする（図 6(c)）．反磁性電流を担っている電子は相変わらず局所的な周回運動を続けているが，今の場合，その他に伝導電子も存在する．伝導電子と反磁性電流を担う電子とはもちろん区別することができず，両者は混在する．混在する故それまで局所的にしか周回することがなかった反磁性電流を担う電子が，局所的反磁性電流を生み出しつつも結晶中を伝播することが可能となる．これ

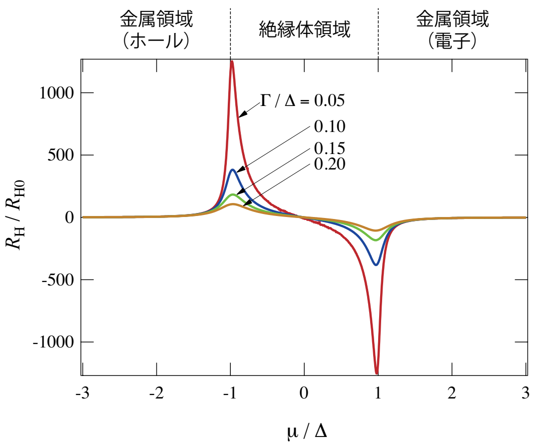

図 7: ホール係数の化学ポテンシャル依存性．($R_{\mathrm{H0}} = \gamma^3/ec$)

がまさにバンド間ホール伝導度として現れているのであろうと考えられる．反磁性電流は伝導電子数の増加とともに減少し，それに応じてバンド間ホール伝導度も減少する．起源のほとんどを反磁性電流が担っている為，バンド間ホール伝導度も不純物散乱の影響をほとんど受けない．

バンド端領域近辺での非自明なふるまいとして，ホール係数のふるまいも挙げておく．ホール係数は通常，キャリア数の逆数として $R_{\mathrm{H}} = (nec)^{-1}$ の様に与えられる．この関係式は多くの場合で成り立ち，非常に強固なものとして知られる．さて今の場合，μ を正の領域からバンド端へと近づけていけば ($\mu \to +\Delta$)，当然 R_{H} は（電子なので）負に発散することが期待される．しかしそのまま $\mu < \Delta$ へと減少を続ければ（実験的にはアンチモンドープ量を増やせば可能）どうなるか．負に発散し続けるのか．更に μ を減少させ，価電子帯のバンド単に達すれば，R_{H} は（ホールなので）正に発散するはずであるから，どこかで符号を反転する必要もある．ということで，バンド端領域でのホール係数のふるまいは少し考えただけでも謎だらけである．

その答えは σ_{xx} と σ_{xy} を久保公式に基づき正しく求めた後，$R_{\mathrm{H}} = \sigma_{xy}/\sigma_{xx}^2 B$ を計算すればすぐに導かれる．図 7 がその結果である．金属領域 $|\mu| \gg \Delta$ では $R_{\mathrm{H}} \propto \mu^{-3}$ で，たしかにキャリア数 $n \propto \mu^3$ の逆数になっている．また Γ にほとんど依存しない．しかしバンド端 $|\mu| = \Delta$ で発散することはなく，ピークをつくり，$|\mu| < \Delta$ で有限の値をとり，$\mu = 0$ で符号を変える．バンド端のピークは Γ によって大きく抑制される．絶縁体領域では R_{H} はもはやキャリア数とは関係が無くなり，不純物散乱に大きく依存する．バンド端でのピーク構造はバンド内伝導度だけに限って計算しても現れるが，バンド間伝導度によって増強される．σ_{xy} 全体の中でのバンド間伝導度の寄与はバンド内に比べて小さいが，R_{H} のピーク構造では，同程度の寄与を生み増強するので，無視できない．

6　スピンホール効果

前節では，ホール効果と反磁性電流の間に確かな関連性があることをみた．スピンホール効果に目を転じると，更に驚くべき反磁性との密接な関連性があることがごく最近分かってきた[12]．

スピンホール効果とは，加えた電場に対して垂直方向にスピン流が発生する現象であり，スピン軌道相互作用に起因する．これまでにも半導体，金属など様々な系で理論・実験ともに研究が進められているが[32)–36)]，スピン軌道相互作用が非放射性元素中最大である[37)]ビスマスにおけるスピンホール効果は，なぜか，理論・実験ともにほとんど調べられていなかった．

スピンホール効果を理論的に調べる上で，第一に重要なことは，スピン流をどう定義するかということである．通常輸送現象は連続の方程式から流れの演算子を定義する．スピン流の場合にもこれを元に定義するべきであるが，今の場合，スピン軌道相互作用がある為に，スピンが保存せず，スピン流は定義できない．そこで一般的には速度 $\boldsymbol{v}$ とスピン s_z の積としてスピン流を定義し，そのままではエルミートにならないので対称化して $\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} = (\boldsymbol{v}s_z + s_z\boldsymbol{v})/2$ なる定義が用いられる．本稿でも $\boldsymbol{v}$ と s_z の積としてのスピン流を導入し，スピンホール効果を議論することとする．

まずはじめにディラック電子系におけるスピンの定義を明確にしておく必要がある．スピンホー

ル効果を議論する場合，着目している“スピン”とは，結局磁気モーメントのことであるので，磁気モーメントの定義を明確にするという目的に還元される．ディラック電子系の磁気モーメントについては，既に議論した通り，(17) 式で定義される．磁気モーメントと速度演算子の積をスピン流演算子（磁気モーメント流演算子と呼ぶべきか）とすれば，

$$v_{\mathrm{s}i} \equiv \frac{\mu_{\mathrm{e}z} v_i}{\mu_{\mathrm{B}}} = -\frac{\mathrm{i}g^*\gamma}{2}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_z\sigma_i \\ \sigma_z\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \tag{24}$$

となる $(i = x, y)$．今の場合はこのままでエルミート演算子となっている．

スピンホール伝導度はこの定義を用いて前節と同じ様に久保公式を用いて

$$\Phi_{syx}(\mathrm{i}\omega_\lambda) = -eT\sum_{n,\boldsymbol{k}} \mathrm{Tr}\left[\mathscr{G}(\mathrm{i}\tilde{\varepsilon}_n) v_{\mathrm{s}y} \mathscr{G}(\mathrm{i}\tilde{\varepsilon}_{n-}) v_x\right], \tag{25}$$

から求まる．最終的な表式は次式で与えられる：

$$\sigma_{syx} = -\frac{em_{\mathrm{e}}|\gamma|}{4\pi^2}\left(K^{\mathrm{I}}_{syx} + K^{\mathrm{II}}_{syx}\right), \tag{26}$$

$$K^{\mathrm{I}}_{syx} = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f'(\varepsilon-\mu) \times \left[\frac{\sqrt{(\varepsilon+\mathrm{i}\Gamma)^2-\Delta^2}}{\varepsilon} - \frac{\sqrt{(\varepsilon-\mathrm{i}\Gamma)^2-\Delta^2}}{\varepsilon}\right], \tag{27}$$

$$K^{\mathrm{II}}_{syx} = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon-\mu) \times \left[\frac{1}{\sqrt{(\varepsilon+\mathrm{i}\Gamma)^2-\Delta^2}} - \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon-\mathrm{i}\Gamma)^2-\Delta^2}}\right]. \tag{28}$$

ここでスピン伝導度の対角成分 $\sigma_{\mathrm{s}xx}$ は今のハミルトニアンの場合厳密にゼロとなることを付記しておく．σ_{syx} の化学ポテンシャル依存性を図 8 に示す．この図から明らかな様に，ビスマス中のディラック電子は期待通り顕著なスピンホール効果を示す．しかも，絶縁体領域で最大の値をとり，キャリアが増えるほどその値は小さくなる．どこかで見覚えのあるふるまいである…

勘のいい読者は既にお気づきの通り，この結果は反磁性のふるまいを思い出させる．思い出させるどころか，改めて反磁性磁化率の表式 (20) を見直してみれば，なんとバンド間効果が生むスピンホール伝導度 K^{II}_{syx} の表式 (28) と（係数を除いて）厳密に一致しているではないか！ はじめの表式 (19) と (25) は全く異なるにも関わらず，得られる最終表式の式 (20) と (28) が一致する — 驚くべき一致である．従って，絶縁体領域のスピンホール伝導度は反磁性磁化率と次の関係によって結びつけられている：

$$\sigma_{\mathrm{s}xy} = \frac{3m_{\mathrm{e}}c^2}{2e}\chi. \tag{29}$$

絶縁体領域では σ_{xx} が抑えられているので，散逸のある電流は流れていない．そのような状況で，スピンホール効果は無散逸となり，同じく散逸の無い反磁性電流と一致する．磁場によって発生する反磁性電流は，電場のかけた場合にスピンホール電流となって現れる．この双対性はおそらく，ディラック電子が持つ相対論的効果に起因する．そして両者はバンド間効果という概念によって結びつけられている．我々がこれまでみてきた「反磁性と輸送現象が如何なる繋がりを持つのか」という長年の疑問を解決する鍵は，スピンホール効果に隠されていたのである．

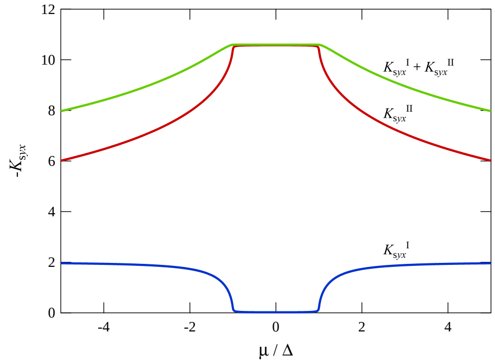

図 8: スピンホール伝導度の化学ポテンシャル依存性．K^{I}, K^{II} はそれぞれバンド内，バンド間の寄与を表す．

7　完全スピン偏極電流

これまでは静的な伝導度 $\omega \to 0$ のみを議論してきたが，動的な伝導度，すなわち光学応答についても興味深い現象を引き出すことが出来る．

磁場中のディラック電子は，前述した通りランダウ準位の分裂の仕方が自由電子のそれとは大きく異なる．特に最低ランダウ準位はスピン縮退しておらず，下向きスピンのみが許される．この最低ランダウ準位のみに電子を励起して電流を流せば，下向きスピンのみの電流，すなわち完全スピン偏極した電流を流せる，というのが我々が見出した完全スピン偏極電流の新しいメカニズムである[13]．本節ではそのメカニズムについて述べる．なお，これから考える輸送現象は電荷を伴ったスピン流であり，スピンホール効果で求めたような，電荷を伴わないスピンのみの流れである「純スピン流」とは異なる．これらを区別する為,「スピン偏極電流」という表現を用いる．

同じく久保公式に基づいて光学伝導度を求めるには,

$$\Phi_{\mu\nu}(\mathrm{i}\omega_\lambda) = -e^2 T \sum_{n,i,j} \langle i|v_\mu|j\rangle\langle j|v_\nu|i\rangle \times \mathscr{G}_i(\mathrm{i}\tilde{\varepsilon}_n)\mathscr{G}_j(\mathrm{i}\tilde{\varepsilon}_n - \mathrm{i}\omega_\lambda), \quad (30)$$

を計算すればよい．計算の詳細は省略するが，$\langle i|v_\mu|j\rangle\langle j|v_\nu|i\rangle$ の部分から 2 種類の選択則: (1) 軌道遷移 ($\Delta n = \pm 1$) と (2) スピン遷移 ($\Delta s = \pm 1$), が得られる．軌道遷移については半導体等で通常よく見かける項である．一方スピン遷移はスピン軌道相互作用から生まれる新たな遷移である．通常の軌道遷移に加えてディラック電子系特有のスピン遷移がからむことで，複雑な遷移状態を生む．ただし式中では軌道遷移，スピン遷移がそれぞれ明確に区別できるが，本質的に両者を区別することは出来ない．言い換えれば，n や σ はもはやよい量子数ではないので，これらを用いて遷移を特徴づけることは出来ない．正確を期するには，j を用いて整理せねばならず，今の場合 $\Delta j = \pm 1$ の遷移がおこると言えば良い．

絶縁体領域 ($\mu = 0$) の $\sigma_{xx}(\omega)$ について計算した結果を図 9 (a) に示す．全てのピークは高エネ

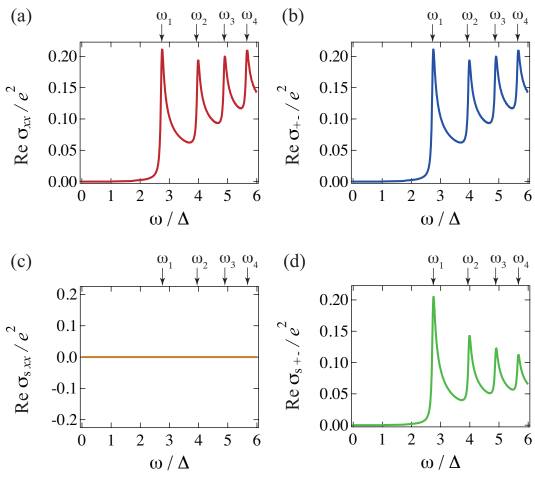

図 9: (a) $\sigma_{xx}(\omega)$, (b)$\sigma_{+-}(\omega)$, (c) $\sigma_{\mathrm{s}xx}(\omega)$, (d) $\sigma_{\mathrm{s}+-}(\omega)$ の絶縁体領域 $\mu/\Delta = 0.0$ におけるふるまい．

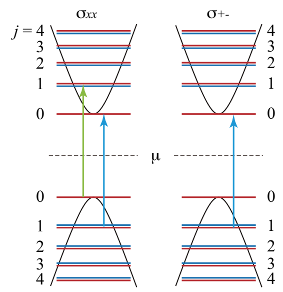

図 10: （左）σ_{xx},（右）σ_{+-} における可能なランダウ準位間遷移（絶縁体領域の場合）．

ルギー側（$\omega > 2\Delta$）に現れ，それらは全てバンド間遷移に依るものである．例えば，ω_1 では $(j = 0_\mathrm{v} \to 1_\mathrm{c})$ と $(j = 1_\mathrm{v} \to 0_\mathrm{c})$ の遷移がおこる．しかし，図 10 に示した様に，励起された状態は両方のスピンを含んでいる為，流れる電流はスピン偏極していない．つまり，$\sigma_{xx}(\omega)$ を見る限り，顕著なスピン偏極は得られないと言える．しかし，円偏光に対する応答を考えると，状況は一変する．

円偏光に対する応答も σ_{xx} の場合と同様にして計算することが出来る．その場合，速度演算子 $v_{x,y}$ に変えて $v_\pm \equiv (v_x \pm \mathrm{i} v_y)/\sqrt{2}$ を考える．Φ_{+-} を計算すれば，可能な遷移は $\Delta n = -1$ と $\Delta s = -1$，すなわち $\Delta j = -1$ の遷移に限られることが分かる．（Φ_{-+} の場合は $\Delta j = +1$.）得られた $\sigma_{+-}(\omega)$ の結果を図 9 (b) に示す．一見した限りでは $\sigma_{xx}(\omega)$ と $\sigma_{+-}(\omega)$ に大きな差異は無い様に見える．しかしそのスピン構造が大きく異なるのである．絶縁体領域で振動数 ω_1 によって励起される最低励起状態を考えると，σ_{xx} の場合は $(j = 0_\mathrm{v} \to 1_\mathrm{c})$ と $(j = 1_\mathrm{v} \to 0_\mathrm{c})$ の遷移が可能だったのに対し，σ_{+-} の場合は $(j = 1_\mathrm{v} \to 0_\mathrm{c})$ の遷移のみが許される（図 10 右）．ω_1 の振動数を持つ円偏光で励起される電子は全て最低ランダウ準位に集中する．その結果，円偏光を用いてスピン偏極した電流を生み出すことが出来る．

$\sigma_{+-}(\omega)$ のスピン偏極度を確かめる為，前章でも定義したスピン流を動的な場合にも拡張してみる．(24) 式で定義した磁気モーメントの速度演算子を用いて，スピン伝導度は (30) 式において $v_\mu \to v_{\mathrm{s}\mu}$ と置き換えれば計算できる．結果は図 9 (c), (d) で示した様に，$\sigma_{\mathrm{s}xx}$ は全く応答が得られないのに対し，円偏光を用いた $\sigma_{\mathrm{s}+-}$ では明確な応答が得られる．つまり，円偏光によって誘起された電流は高いスピン偏極度を持っていることになる．特に，最低励起状態では $|\sigma_{\mathrm{s}+-}(\omega_1)|/\sigma_{+-}(\omega_1) = 1$ となっており，100%スピン偏極した電流が得られる．

スピン軌道相互作用が非常に強い場合，スピン緩和が著しく，その結果スピン偏極はすぐに壊されるのではないかと考えられる読者もおられよう．しかし今の場合，そうしたスピン緩和は起こりにくい．ここで考えているランダウ準位は Wolff ハミルトニアンの純粋な固有状態であり，そこには既に強いスピン軌道相互作用が含まれているので，その固有状態が更にスピン軌道相互作用で乱されることは無い．j で表される量子数は保存しており，異なるランダウ準位が混ざることも無い．特に最低ランダウ準位はスピンがユニークに定まっており，これ以上のスピン緩和は起こりにくく，スピン偏極度は保たれることとなる．

8 まとめ

ビスマスにおけるディラック電子が，スピンホール効果や完全スピン偏極電流など，スピンが絡んだ輸送現象を生み出すことをみた．これらはビスマス型のディラック電子がもつ特殊性 — スピン軌道相互作用に伴うバンド間効果 — による．そしてその背後には，「反磁性と輸送現象が如何なる繋がりを持つのか」という長年の謎の鍵が潜んでいることも明らかとなった．

ここで紹介した新しい輸送現象は，理論的に明らかにされたばかりで，実際の観測はまだこれからである．それどころか，不思議なことに，ビスマスでは基本的輸送現象であるホール効果の測定すら確固たる実験結果に乏しい．一方，これまで精力的に行われてきた磁化率[24),25)]や角度分解ランダウスペクトル（量子振動）[14),16)]の測定結果は，本稿で紹介した簡潔な Wolff 模型に基づく理論結果と定量的に非常によく一致する．本稿では紙数の都合上これらの実験結果を紹介することができなかったが，これほどまでに実験と理論が一致する物質も珍しい．この恵まれた状況ゆえ，理論で得られた結果が直ちに定量的な物性予測となり，実験で得られた結果が直ちに詳細な理論解析を可能とする．実験と理論が強力に連携して研究を前進させることができるのは，ビスマスのもつ大きな強みである．今後も他の物質におけるディラック電子の物理と係りながら，真に新しい物理がビスマスから発信されることが期待される．

ここで紹介した研究は，科学研究費基盤研究 (A)「固体中のディラック電子」，若手研究 (B)「固体中ディラック電子が生む新しい伝導現象の開拓」，

および大阪大学・飛翔３０プログラムと未来研究ラボシステムの援助を受けています．ここに謝意を表します.

参考文献

[1] 福山秀敏: 日本物理學會誌 **24** (1969) 382.

[2] 伏屋雄紀: 物性研究 **90** (2008) 537.

[3] H. Fukuyama, Y. Fuseya, and A. Kobayashi. Transport Currents and Persistent Currents in Solids: Orbital Magnetism and Hall Effect of Dirac Electrons. In A. Aharony and O. Entin-Wohlman (eds), *Perspectives of Mesoscopic Physics*, Chap. 4, p. 69. World Scientific, 2010.

[4] H. Fukuyama, Y. Fuseya, M. Ogata, A. Kobayashi, and Y. Suzumura: Physica B, **407** (2012) 1943.

[5] 安藤恒也: 固体物理 **45** (2010) 567.

[6] 越野幹人: 固体物理 **45** (2010) 611.

[7] 小林晃人, 鈴村順三: 固体物理 **44** (2009) 127.

[8] 反磁性の発見は 1778 年, Brugmans によるとされている．例えば「磁性」(金森順次郎, 培風館) など.

[9] H. Fukuyama and R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. **28** (1970) 570.

[10] R. Kubo and H. Fukuyama: In E. P. Keller, J. C. Hensel, and F. Stern (eds), *Proceedings of the Tenth International Conference on the Physics of Semiconductors*, 1970.

[11] Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama: Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 066601.

[12] Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama: 投稿予定 .

[13] Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn., **81** (2012) 013704.

[14] G. E. Smith, G. A. Baraff, and J. M. Rowell: Phys. Rev. **135** (1964) A1118.

[15] M. P. Vecchi, J. R. Pereira, and M. S. Dresselhaus: Phys. Rev. B **14** (1976) 298.

[16] Z. Zhu, B. Fauqué, Y. Fuseya, and K. Behnia: Phys. Rev. B **84** (2011) 115137.

[17] Y. Liu and R. E. Allen: Phys. Rev. B **52** (1995) 1566.

[18] M. H. Cohen and E. I. Blount: Phil. Mag. **5** (1960) 115.

[19] M. Koshino and T. Ando: Phys. Rev. B **81** (2010) 195431.

[20] M. Koshino and T. Ando: Solid State Comm. **151** (2011) 1054.

[21] J. M. Luttinger and W. Kohn: Phys. Rev. **97** (1955) 869.

[22] J. E. Hebborn and E. H. Sondheimer: J. Phys. Chem. Solids **13** (1960) 105.

[23] R. E. Peierls: *Quantum Theory of Solids* (Oxford University Press, NewYork, 1955).

[24] B. Verkin, L. B. Kuz'micheva, and I. V. Svechkarev: JETP Letters **6** (1967) 225.

[25] L. Wehrli: Phys. Kondens. Materie **8** (1968) 87.

[26] H. Fukuyama: Prog. Theor. Phys. **45** (1971) 704.

[27] J. E. Hebborn and E. H. Sondheimer: Phys. Rev. Lett. **2** (1959) 150.

[28] B. Lenoir, M. Cassart, J.-P. Michenaud, H. Scherrer, and S. Scherrer: J. Phys. Chem. Solids **57** (1996) 89.

[29] H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 043711.

[30] A. Kobayashi, Y. Suzumura, and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 064718.

[31] $\sigma_{xx} \propto \Gamma^{-1}$ なので，$\sigma_{xx}^2/\sigma_{yx}$ で与えられるキャリア数が不純物散乱に依存しないことからただちに $\sigma_{yx} \propto \Gamma^{-2}$ が得られる．

[32] N. Nagaosa: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 031010.

[33] M. I. Dyakonov and A. V. Khaetskii: In M. I. Dyakonov (ed), *Spin Physics in Semiconductors*, 2008.

[34] 村上修一，永長直人: 固体物理 **39** (2004) 27.

[35] 村上修一: 日本物理学会誌 **62** (2007) 2.

[36] 紺谷浩，平島大，井上順一郎: 日本物理学会誌 **65** (2010) 239.

[37] 柳瀬陽一，播磨尚朝: 固体物理 **46** (2011) 229.