

MERIT 長期海外派遣報告書

理学系研究科 物理学専攻 博士3年 MERIT10 期生
小形研究室 遠藤純矢

派遣先: Eidgenössische Technische Hochschule Zürich

受入研究室: Manfred Sigrist's Group

渡航期間: 2024年1月15日から2024年5月15日まで

研究課題: Anomalous Nernst Effect Involving Magnetism and Topology: Toward a Giant Thermoelectric Effect with Magnon Drag and Rashba Effect

概要

スイスにあるスイス連邦工科大学チューリッヒ校 (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, ETH) の Manfred Sigrist 先生の下で、異常 Nernst 効果についての研究を実施した。研究対象の系として、Rashba 型相互作用がある系および Magnon と s-d 相互作用が共存する系の2つを用いた。

Rashba 型相互作用がある系については、磁性パラメータが十分大きくバンドが分裂するような場合に、バンド端近くで大きな Nernst 係数が実現することがわかった。この Nernst 係数は一般の強磁性体より大きい。このように大きな Nernst 係数は、Rashba 型相互作用の運動量依存性から現れるという一般的な証明も行った。

Magnon による異常 Nernst 効果については、MnBi で観測されている大きな異常 Nernst 伝導度が我々のモデルで実現することがわかった。加えて、実験で観測されている異方性と同様の異方性が実現することも確認した。

Rashba 系についての成果

z 軸方向についての強磁性と Rashba 型のスピン軌道相互作用を導入した系を調べた。Hamiltonian は、

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger} (\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 + \alpha(\hat{\sigma} \times \mathbf{v}_{\mathbf{k}}) + h\hat{\sigma}_z + V^{\text{imp}}) \hat{c}_{\mathbf{k}}. \quad (1)$$

これは、従来の自由電子的なエネルギー分散に限定しない、より一般的な設定である。

この設定に対して、以下のように異常ネルンスト効果の数値計算を行った。

- Born 近似を用いて系の自己エネルギーを計算し、Dyson 方程式を自己無撞着に解く。
- 不純物の Vertex 補正を導入し、パウリ行列に比例する電流演算子の補正項を考慮した電流演算子をこれも自己無撞着に導出。
- これらの自己エネルギーと演算子を用いて、数値積分により各エネルギーに対する伝導度スペクトルを計算。

これらの計算を、tight-binding モデルに対応するバンドに適用した。その結果、強磁性によるバンド分裂が大きな異常 Nernst 係数の主要因となることが示された。一般的な強磁性体の係数の数倍程度まで得られる見込みである。

この振る舞いは、以下のように理解できる。Sommerfeld-Bethe の縦伝導度スペクトル σ に対応し、横伝導度にもスペクトル η が定義できるとする。すると、Fermi 分布関数 f を用いて、ある一定の仮定のもとで、Nernst 係数は確率密度関数 $(-f')\sigma$ と $(-f')\eta$ の下でのエネルギーの平均の差に比例するといえる。一般の強磁性体の設定ではこの差は小さくなってしまふ。一方、Rashba 型の相互作用による電流演算子が、Bloch 固有エネルギーに対応する電流演算子とは波数依存性が異なるためにこの差が大きくなる。これにより、今回大きな係数が得られたと考えられる。

Magnon 系についての成果

強磁性体中の Magnon による Magnon drag 効果が異常ネルンスト効果にどのような影響を与えるかを計算した。Hamiltonian として、Bloch 固有状態が得られている無摂動 Hamiltonian、Magnon、s-d 相互作用の和を採る。s-d 相互作用を摂動として、最低次の Magnon drag に対応する摂動を考慮し、電流演算子と Magnon 熱流演算子の相関を計算した。

以上の一般的な理論を確立し、これを MnBi に対応したモデルに適用した。描像としては、Bi の遍歴電子が Mn の磁性及び Magnon の相互作用の影響を受けるとする。その描像に対応する Hamiltonian としては、

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \begin{pmatrix} c_{+\downarrow}^\dagger & c_{+\uparrow}^\dagger & c_{-\uparrow}^\dagger & c_{-\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\sigma_0 + h\sigma_z & i\hbar\gamma\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -i\hbar\gamma\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta\sigma_0 + h\sigma_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{+\downarrow} \\ c_{+\uparrow} \\ c_{-\uparrow} \\ c_{-\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

この Hamiltonian の下で、数値計算を実行した。ここで、Magnon と電子の相互作用はスピンについて対角的な形で表現されるため、今回のようにスピンの混合した Bloch 固有状態を持つ場合への適用はやや難しいが、相互作用を適切に変換することで理論の拡張に成功した。

結果として、MnBi で実験的に報告されていた大きな Nernst 伝導度が再現されることを確認した。加えて、その異方性も精度良く再現できることを確認した。

謝辞

Manfred 先生には、今回の滞在を受け入れていただき、様々な手配や熱心な議論など、大変お世話になりました。さらに、Manfred 先生のご家族にも温かいもてなしをいただきましたこと、心より感謝申し上げます。同じフロアの博士課程学生、ポスドク、Guest Researcher の皆様には、研究面のみならず余暇活動においても多くの交流をしていただき、誠にありがとうございました。また、この MERIT 長期海外派遣に関わっていただい

た指導教員の小形先生、副指導教員の木村先生、MERITの先生方、そして事務局の皆様にも深く感謝申し上げます。今回の滞在は、ETH ZurichのYoung Researchers' Exchange Programme Special Call 2023 Japanのご支援により実現いたしました。心より感謝申し上げます。