

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 5 月 22 日現在

機関番号：11301

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2015～2016

課題番号：15H06023

研究課題名(和文)ディラック電子系における非摂動的量子効果の系統的解明

研究課題名(英文)Nonperturbative quantum effects in Dirac materials

研究代表者

荒木 康史 (Araki, Yasufumi)

東北大学・学際科学フロンティア研究所・助教

研究者番号：10757131

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,100,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題ではトポロジカル絶縁体やディラック・ワイル半金属等、電子が特殊なバンド構造を示す「ディラック電子系」において電子の受ける相互作用が強い場合の効果、場の量子論の観点から明らかにすることを目指した。研究成果として以下の3点が得られた。(1)電子間のクーロン相互作用が強い場合、系は絶縁体となりフェルミ速度の補正があることを示した。(2)電子スピンと局所スピンの交換相互作用の下で、局所スピンの特殊な有効相互作用を現すことを示した。(3)ワイル半金属中に磁壁を構築した場合、磁壁に電荷が局在し磁壁を電場により駆動できることを示した。

研究成果の概要(英文)：The goal of this project was to understand the interaction effects on electrons in "Dirac materials" including topological insulators and Dirac-Weyl semimetals, from the point of view of quantum field theory. I found the following three points: (1) The Coulomb interaction between electrons turns the system into an insulator, and renormalizes the electron Fermi velocity. (2) The exchange interaction between electron spins and local spins leads to a nontrivial effective exchange interaction between the local spins. (3) A magnetic domain wall formed in Weyl semimetals hosts a finite localized charge, and its motion can be driven by an external electric field.

研究分野：物性物理学(理論)

キーワード：物性理論 強相関電子系 スピンエレクトロニクス 半導体物性 トポロジカル物質 ディラック電子  
磁壁

## 1. 研究開始当初の背景

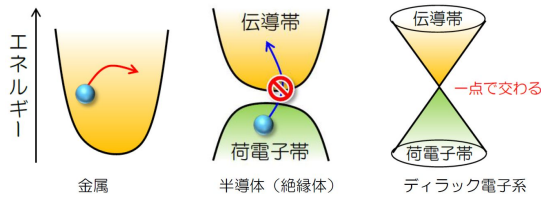


図1：金属・半導体（絶縁体）・ディラック電子系のバンドの模式図。

我々の身近に存在する物質は、電子を励起するのに必要なエネルギー（バンドギャップ）の有無により絶縁体（半導体）と金属に大別される。一方で近年、絶縁体と金属の中間的な特徴を持つ電子系「ディラック電子系」がいくつかの物質で実現され、興味を集めている。ディラック電子系の電子の運動は、宇宙初期や加速器における高エネルギー素粒子を記述する基本方程式である「ディラック方程式」に従い、バンドがただ一点（ディラック点/ワイル点）で交差しギャップがゼロとなることにより特徴づけられる（図1参照）。このようなバンド構造は格子構造、および原子のスピン-軌道相互作用によるバンド反転により実現され、2次元におけるグラフェン（炭素の単原子層膜）はディラック電子系の中でもよく知られている。一方で3次元においても、2010年代に入ってから Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>等の「ディラック半金属」や TaAs等の「ワイル半金属」等が実現され、これら3次元のディラック電子系に特徴的な現象に理解を与えることは、（現在に至るまで）重要な問題である。

このようなディラック電子系において特に重要な問題として、電子およびスピン間の相互作用の効果が挙げられる。電子の間に働く電気的な反発相互作用（クーロン相互作用）および電子のスピンと原子の局在磁気モーメントの間の交換相互作用を考慮すると、元来ギャップを持たなかったバンドにギャップを開いたり、電子やスピンの輸送特性を有意に変化させる可能性がある。このような相互作用の効果は理論的な興味に留まらず、これらの物質の持つ電子・スピンの性質を磁気メモリ等のデバイスに応用することを目的とする「スピントロニクス」の観点からも重要であり、それらに応用可能となる非自明な効果の提言・解明が求められている。

## 2. 研究の目的

前項で述べた背景を踏まえ、本研究課題では「ディラック半金属」や「ワイル半金属」といった3次元ディラック電子系を対象とし、相互作用が系の性質に与える効果を包括的に理解することを目指した。具体的には、以下の2項目を主に扱った。

### (1) 電子間のクーロン相互作用によるトポロジカル相転移の有無

電荷間のクーロン相互作用は電磁場によって媒介される。ディラック半金属等の物質中での電子（準粒子）の伝搬速度は電磁場の伝搬速度に比べて遅いため、電子が感じるクーロン相互作用の強さは真空中に比べてきわめて強くなることが示唆されている。この相互作用は初期宇宙でのクォーク間に働く「強い相互作用」と同様に、ゲージ理論によって記述される。強い相互作用との類似性によれば、電子と正孔（ホール）はエキシトン凝縮とよばれる束縛状態を構成し、系の持つ連続対称性であるカイラル対称性を自発的に破って絶縁体へと相転移する可能性が指摘されている。

本研究課題の第一の研究対象として、このように電子間のクーロン相互作用がディラック電子のバンド構造に及ぼす影響を、ゲージ理論の観点から理解することを目指した。

### (2) 電子スピンと局在磁気モーメントの間の交換相互作用が磁気構造にもたらす効果



図2：遍歴電子によって媒介される磁性元素間の有効相互作用の模式図。

金属や半導体にクロム・マンガン等の磁性元素を導入した場合、磁性不純物のスピン（局在磁気モーメント）と金属・半導体内を動く電子（遍歴電子）のスピンに交換相互作用が働く。遍歴電子は局在していないため、別の場所にある局在スピンとも相互作用することができ、2つの局在スピン間に実効的な相互作用が働いているように見える（図2、これは一般にRKKY相互作用と呼ばれる）。

一方、ディラック半金属ではそのバンド構造により、電子の持つ運動量とスピンの間に相関（スピン-運動量ロッキング）を持つため、上述のRKKY相互作用の描像は自明ではない。そのため、磁性不純物を導入したディラック半金属において、電子によって媒介される相互作用の性質を明らかにする必要がある。本研究では、このような相互作用があることによる磁壁・渦等の磁気構造の安定性への寄与、および磁壁が得る非自明な電気的性質・磁壁の操作手法、に関して理解することを目指した。

## 3. 研究の方法

以下で本課題において用いた研究手法について述べる。なお、各項目に付した番号は、「2. 研究の目的」で用いた番号に対応する。

#### (1) クーロン相互作用の効果

電子間のクーロン相互作用とクォーク間の強い相互作用の間の類似性を踏まえ、クォーク物質の記述の際にしばしば用いられる「格子ゲージ理論」の手法に基づき、電子間相互作用の効果の解明を試みた。すなわち、電子・電磁場をそれぞれ離散化された格子上で定義し、格子間隔より短い波長（高エネルギー）での揺らぎの寄与を無視した。その上で、通常の摂動論とは異なり、相互作用がきわめて強い極限を起点に解析を行う「強結合展開」の手法を用い、電磁場によって媒介される有効相互作用の形を元に系の自由エネルギーを導出した。この自由エネルギーをもとに、基底状態におけるエキシトン凝縮（カイラル対称性の破れを記述する秩序変数）を見積もり、絶縁体へのトポロジカル相転移の有無について議論した。

#### (2) 電子によって媒介される局在スピン間相互作用の効果

ディラック・ワイル半金属に導入した局在磁気モーメントの大局的な振舞いを記述する「有効場の理論」を導出し、磁気モーメント間の有効相互作用を理解することを目指した。ディラック電子の有効理論に局在スピンの交換相互作用を加えたものを出発地点とし、電子の自由度（場）を積分し、スピン感受率を評価することにより局在スピンに関する有効場の理論（自由エネルギー）を構築した。この有効場の理論に基づき、磁化配位がとりうる基底状態・励起状態の構造、および磁化の空間的な揺らぎ（スピン波）の伝播の性質に関して記述を試みた。

#### (2) 交換相互作用によって現れる磁壁の性質

と同様にワイル半金属に局在磁気モーメントを導入したモデルを出発点とし、解析的手法・および計算機による数値計算という2通りの手法に基づき、磁性元素が集団で磁壁を構成する場合の電子の固有状態（波動関数）を、基本となるディラック（ワイル）方程式を解くことにより導出した。これを用いて、系の持つ電気的性質、特に磁壁近傍での電荷と電流の分布について考察した。

### 4. 研究成果

以下で本研究の成果に関して述べる。なお、各項目に付した番号は、「2. 研究の目的」および「3. 研究の方法」で用いたものに対応する。

#### (1) クーロン相互作用によるトポロジカル相転移とフェルミ速度の補正

強結合展開の最低次、すなわち相互作用が強い極限では、長距離のクーロン相互作用は

同一サイト上の反発相互作用に一致することが示された。すなわち、格子上的同一サイトを2個以上の電子が同時に占有することがないという効果である。これにより、電子の占有率をゲート電圧などによりちょうど半分調整した場合、基底状態は反強磁性体（隣り合うサイトで電子のスピンの向きが互いに逆になっている状態）となり、絶縁体へ相転移することが示された。これは各サイトに電子が1個ずつ占有され、隣り合ったサイトへ電子が動けない（反発相互作用により阻まれる）ことによる。これは、クォーク物質における相互作用による質量獲得機構と類似したものである。

相互作用を少し弱くした、強結合展開の1次においては、クーロン相互作用が隣り合ったサイト同士を相関づける。これは電子の隣接サイトへの飛び移りに起因する電子の伝播速度に影響を及ぼし、強結合極限よりも電子の速度を速くする効果（フェルミ速度の繰り込み）が生じることが導かれる。この繰り込み効果は先行研究で扱われた弱結合領域とは逆の振舞いを示しており、繰り込み群の固定点、すなわち相転移が起こる臨界点が存在していることを示唆している。現在実験的に観測されているディラック半金属ではこのような相転移は観測されていないため、臨界点の探索は今後の重要な課題である。

[雑誌論文、学会発表等]

#### (2) 局在スピン間の有効相互作用と励起状態の磁気構造

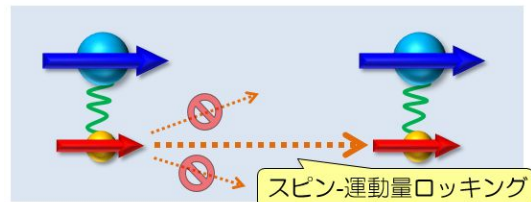


図3：ディラック半金属における、電子によって媒介される局在スピン間の有効相互作用の模式図。

ディラック半金属における電子の自由度を積分することにより導かれた有効場の理論において、磁性不純物のスピンを揃えるような従来知られていた相互作用（ハイゼンベルグ強磁性）だけでなく、磁性不純物の位置関係に依存するような相互作用が存在することが示された。この相互作用はスピンを、2個の磁性不純物の相対的な位置関係に対して平行になるように（縦方向に）揃える働きをする。すなわち、スピン空間だけでなく実空間の自由度にも依存するような相互作用が現れる。この縦方向の相互作用の起源は、ディラック半金属中の電子が持つ「スピン-運動量ロッキング」と呼ばれる性質によるものと解釈できる（図3）。電子の持つスピンはその運動量と同じ向きに固定されるため、その電子によって媒介される有効相互作用も電子の運動の向き、すなわち磁性不純物の

位置関係に依存するためである。このような相互作用は従来のハイゼンベルグ型の相互作用に比べてきわめて強く、その強さはキャリアのドーピング濃度に依存することが示された。

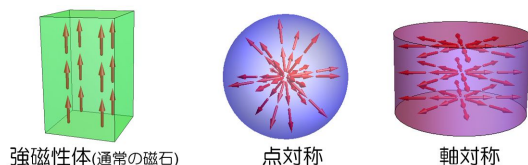


図4：基底状態・励起状態において考えられる磁化構造。

このような新たな有効相互作用は、磁性不純物のもつスピン（局所磁化）の配位に影響を及ぼす。基底状態では磁化が一様に揃った通常の強磁性を示す一方、直近の励起状態は渦が存在しないような、空間内の一点を中心とした点対称なもの（ヘッジホッグ）や一直線を中心とした軸対称なもの（動径方向ポータックス）となる（図4）。このような励起状態の配置は基底状態に比べて大きなエントロピーを持つため、有限温度・有限サイズの系においては励起状態のほうがより安定するようにクロスオーバー現象を示し、熱力学的性質も変化する可能性がある。

[雑誌論文、学会発表 - 等]

## (2)- 磁壁に局在する電荷と新たな磁壁操作手法

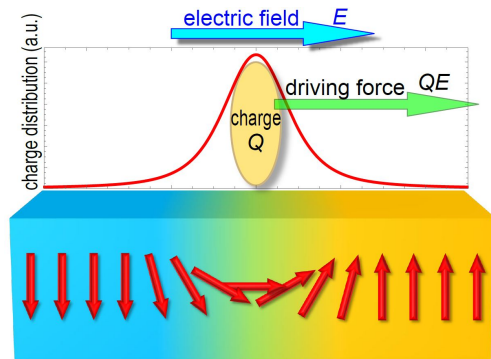


図5：本研究の成果の模式図。ワイル半金属中に磁壁を導入すると、上段のように磁壁近傍に電荷(Q)が局所的に分布する。これに外部から電場(E)をかけることにより、磁壁に駆動力(QE)が働き、磁壁を操作できることが示唆される。

本項の出発点として、最も単純な磁壁構造である“collinear型磁壁”のもとで、解析的にワイル方程式を解くことにより電子状態を導出した。その結果、通常の金属と同様の系全体に広がった電子状態（遍歴状態）以外に、磁壁周囲に局在した電子状態が、磁壁の厚さに応じていくつか存在することが明らかになった。これらの状態のバンド構造を調べることにより、これらの局在状態は磁場の下で局在した状態（ランダウ状態）に類似したものであり、磁壁の磁化構造が実効的な磁場として振舞うことによるものであることが示された。さらに、このような電子状態の局在の帰結として、系にゲート電圧等をかけてキャリア密度を上げた場合に、磁壁周囲に電荷が局在することが示された（図5）。こ

れはすなわち、外部電場により磁壁を駆動できることを示唆している。現実的な磁性体における Gilbert 緩和パラメータ等を用い、磁壁の運動方程式に基づいて駆動速度を見積もったところ、100V/cmの電場の下ではおよそ10m/sの速度で磁壁を動かすことができ、磁壁の回路素子への応用に新たな道筋を与えると期待される。通常の磁性体において観測されている磁壁の駆動速度が10-100m/s程度であるため、ワイル半金属での電場駆動による速度はこれに近い値であるが、ワイル半金属では電流のジュール熱によるエネルギー損失を抑えられるという利点がある。

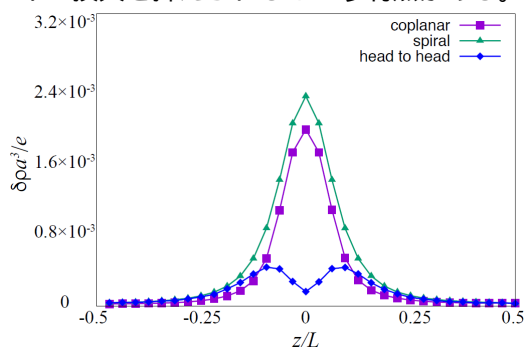


図6：数値計算によって得られた電荷分布。横軸z=0が磁壁の中心、縦軸は位置zでの電荷密度を表す。磁壁構造ごとに電荷分布の違いが見られる。

こまでは単純化した磁壁構造を考えたが、現実の磁性体は系の磁気異方性や相互作用等により様々な磁壁構造を取りうる。本研究の次の段階として、前項で得られた「磁壁に局在した電荷」が磁壁構造の違いにより影響を受けるかどうかを確認するため、様々な磁壁構造の下で数値計算により電荷分布を見積もった。具体的には、立方格子上でワイル半金属のモデルを構築し、磁壁構造を導入したそのモデルを数値対角化することにより、電子の固有エネルギー・固有状態（波動関数）を導出した。これによって得られた固有状態をもとに、系にゲート電圧を加えた場合の電荷分布を計算した。その結果、いずれの磁壁構造においても磁壁近傍に電子状態が局在し、電荷が分布することが明らかになった（図6）。ただし、電荷分布の形状は磁壁構造によって違いが見られる。これは、前述した「磁場下での電子状態の局在（ランダウ状態）」との類推により理解できる。すなわち、spiral型磁壁においては磁化構造による有効磁場が強いため、電子が強く局在する一方、head-to-head型磁壁においては有効磁場が弱く、電子の局在も緩やかとなると理解できる。

ここで得られた電子の局在状態は、高エネルギー物理（特に加速器中や中性子星等を記述する文脈）においては、磁気モノポールに従って現れる「Jackiw-Rebbiモード」として古くから知られており、本研究の成果はこのような特殊な状態が身の回りの物質において実現されうる例としても興味深いと考えられる。

[雑誌論文、学会発表 - 等]

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 3 件)

Yasufumi Araki, Akihide Yoshida, and Kentaro Nomura, “Universal charge and current on magnetic domain walls in Weyl semimetals”, *Physical Review B* **94**, 115312 (2016). [doi: 10.1103/PhysRevB.94.115312] < 査読有 >

Yasufumi Araki and Kentaro Nomura, “Spin textures and spin-wave excitations in doped Dirac-Weyl semimetals”, *Physical Review B* **93**, 094438 (2016). [doi:10.1103/PhysRevB.93.094438] < 査読有 >

Yasufumi Araki, “Lattice gauge theory treatment of strongly correlated Dirac semimetals”, *Proceedings of Science (LATTICE 2015)*, 046 (2015). [https://pos.sissa.it/cgi-bin/reader/contribution.cgi?id=251/046] < 査読無 >

〔学会発表〕(計 20 件)

Yasufumi Araki, “Localized charge and current on magnetic domain walls in Weyl semimetals”, APS March Meeting 2017, 2017/03/13-17, New Orleans (USA)

荒木康史、「ワイル半金属における磁壁配位と局在電荷」、理研 iTHES 神戸量子物性研究会、2017/03/04、理化学研究所(兵庫県神戸市)

Yasufumi Araki, “Bound states and charge transport on magnetic domain walls in Weyl semimetals”, 61st Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, 2016/10/31-11/04, New Orleans (USA)

吉田光秀、「ワイル半金属における磁壁配位と局所電荷密度」、日本物理学会 2016 年秋季大会、2016/09/13-16、金沢大学(石川県金沢市)

Yasufumi Araki, “Spin textures and spin waves in magnetically-doped Dirac/Weyl semimetals”, The 22nd International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, 2016/07/24-29, 定山溪ビューホテル(北海道札幌市)

Yasufumi Araki, “Spin correlations and spin-wave excitations in Dirac-Weyl semimetals”, APS March Meeting 2016, 2016/03/14-18, Baltimore (USA)

荒木康史、「ディラック・ワイル半金属におけるスピン相関とスピン波励起」、第 1 回「トポロジジーが紡ぐ物質科学のフロンティア」領域研究会、2015/12/11-13、京都大学(京都府京都市)

Yasufumi Araki, “Lattice gauge theory

treatment of strongly correlated Dirac semimetals”, The 33rd International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2015), 2015/07/14-18, 神戸国際会議場(兵庫県神戸市)

他 12 件

〔その他〕

荒木康史、第 1 回「トポロジジーが紡ぐ物質科学のフロンティア」領域研究会にてポスター賞(銀賞)受賞、2015/12/11-13、京都大学(京都府京都市)

## 6. 研究組織

(1) 研究代表者

荒木 康史 (ARAKI, Yasufumi)

東北大学・学際科学フロンティア研究所・助教

研究者番号： 10757131

(2) 研究分担者

( )

研究者番号：

(3) 連携研究者

野村 健太郎 (NOMURA, Kentaro)

東北大学・金属材料研究所・准教授

研究者番号： 00455776

(4) 研究協力者

吉田 光秀 (YOSHIDA, Akihide)