

# 局所的な非対称性による反対称スピン軌道相互作用がもたらす物理

物理工学科4年 荒木勇介、佐野了也

謝辞 求研究室の皆様には大変お世話になりました。

この場を借りてお礼申し上げます。

## 背景

蜂の巣格子やカイロペンタゴン格子などは、反転中心を持ちつつも、局所的な非対称性をもつ。近年、格子の局所非対称性から生じるこのような反対称スピン軌道相互作用(ASOC)の効果が電気磁気効果をはじめとする非対角応答を示すことで注目され、研究が進められている。

F.D.M.Haldane, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 024423, C.L.Kane and E.J.Mele, Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 226801

## 目的

ASOCに起因するバンド構造の変化と、それと関連した新奇な物性を開拓する。

## モデル

Y.Yamaji and M.Imada, Phys. Rev. B **83** (2011)205211

**armchair**

**zigzag**

次近接サイト間のASOCに加え、armchairでは境界の鏡映対称性の破れから生じる次々近接サイト間のASOCを考慮。

$$H = H_{hop} + H_{ASOC} + H_U$$

$H_{hop}$ : 最近接サイト間ホッピング  $-t c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$

$H_{ASOC}$ : 次近接サイト間ASOC  $+i\lambda_1 v_{i,j} \sigma_{\alpha,\beta}^z c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta}$

次々近接サイト間ASOC  $+i\lambda_2 v_{i,j} \sigma_{\alpha,\beta}^z c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta}$  (armchairのみ)

$v_{i,j}$ : 図の矢印の向きを正とする符号因子

$H_U$ : オンサイトクーロン相互作用  $+U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$

## モデル

Cairo pentagon格子で、最近接のホッピングに加え、ASOCに由来した次近接のホッピングを考慮

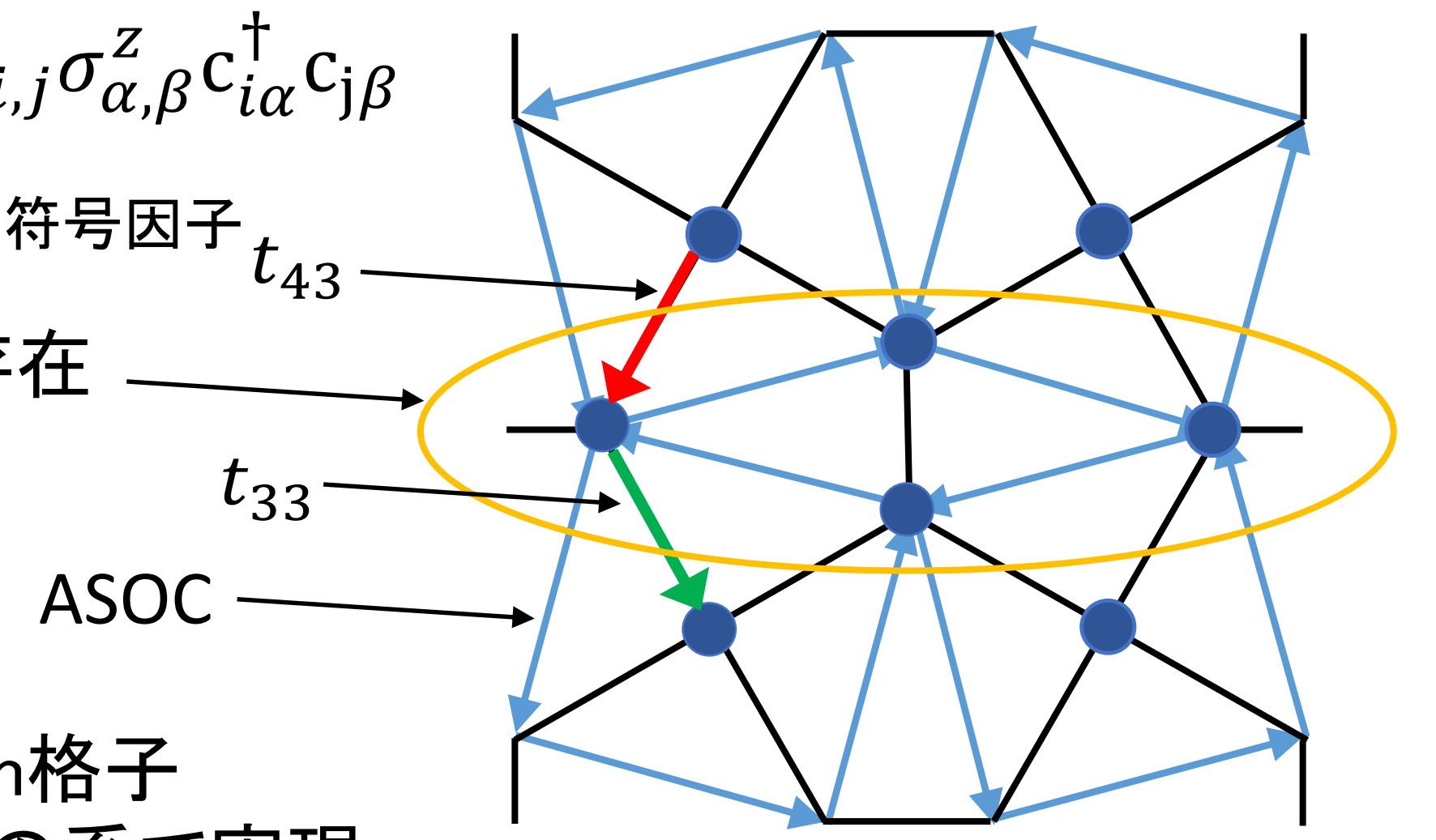
$$H = H_{hop} + H_{ASOC}$$

$$H_{hop} = t_{43} \sum_{i:4\text{-fold}, j:3\text{-fold}} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + t_{33} \sum_{i,j:3\text{-fold}} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$$

$$H_{ASOC} = i\lambda \sum_{i,j:3\text{-fold}} \sum_{\alpha,\beta} v_{i,j} \sigma_{\alpha,\beta}^z c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta}$$

$v_{i,j}$ : 図の矢印の向きを正とする符号因子

有効的なループ磁場の存在



Cairo pentagon格子  
Bi<sub>2</sub>Fe<sub>4</sub>O<sub>7</sub>などの系で実現

## 計算方法

$t = 1$ ・絶対零度・Half-fillingの条件で、 $H_U$ の項をHartree-Fock法で計算し、スピン分極  $m_i = \sum_{\alpha,\beta} \sigma_{\alpha,\beta}^z \langle c_{i\alpha}^\dagger c_{i\beta} \rangle$  と  $U$  の関係を  $\lambda_1, \lambda_2$  の値ごとにグラフ化する。

## 結果

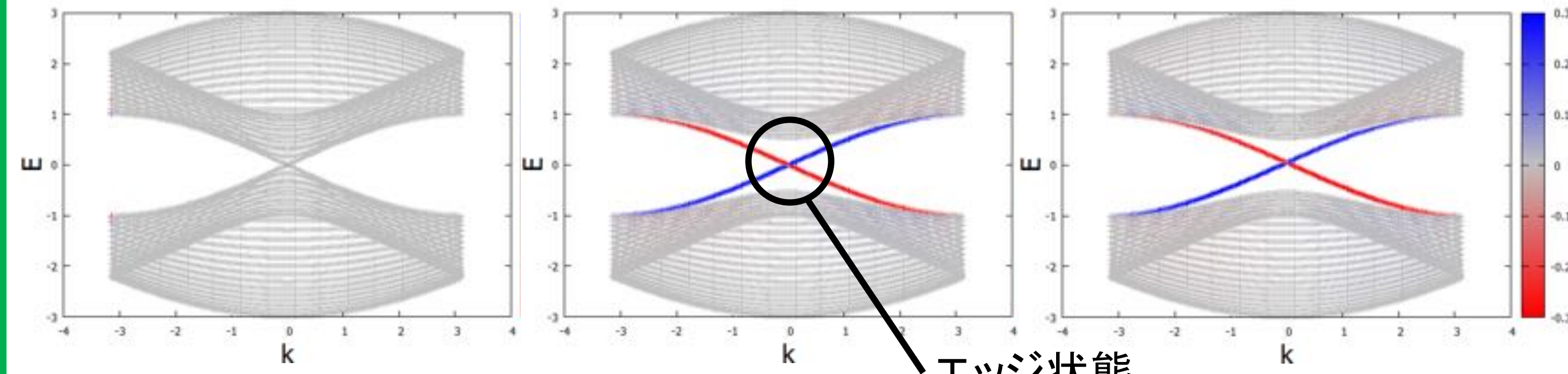
**トポロジカル転移** 色は境界上のサイトにおけるスピン分極を表す

armchair クラスタ数:  $64 \times 200$

$\lambda_1 = 0.0 \lambda_2 = 0.0$

$\lambda_1 = 0.1 \lambda_2 = 0.0$

$\lambda_1 = 0.1 \lambda_2 = 0.1$

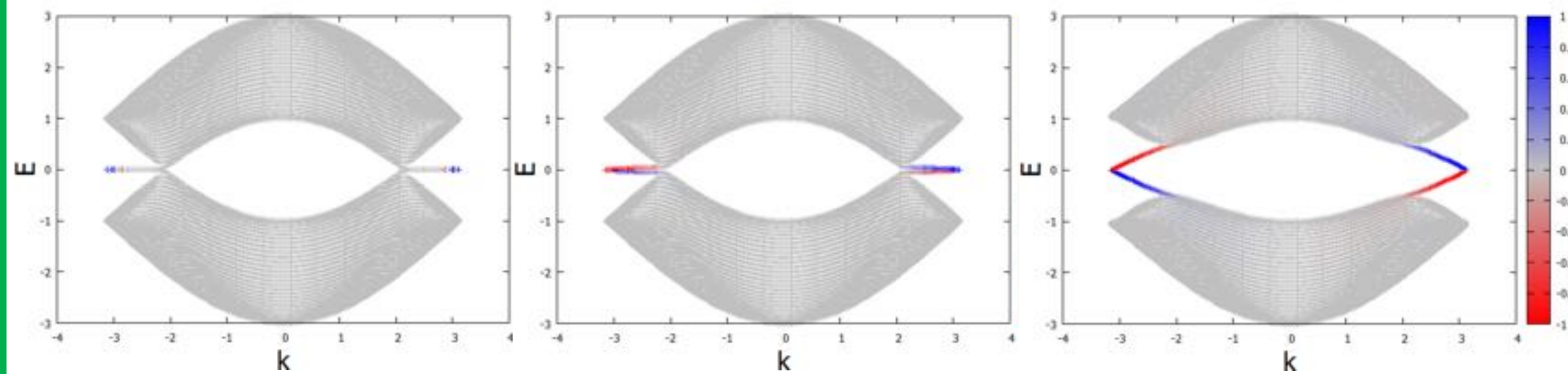


zigzag クラスタ数:  $64 \times 200$

$\lambda_1 = 0.0$

$\lambda_1 = 0.01$

$\lambda_1 = 0.1$



## U-m

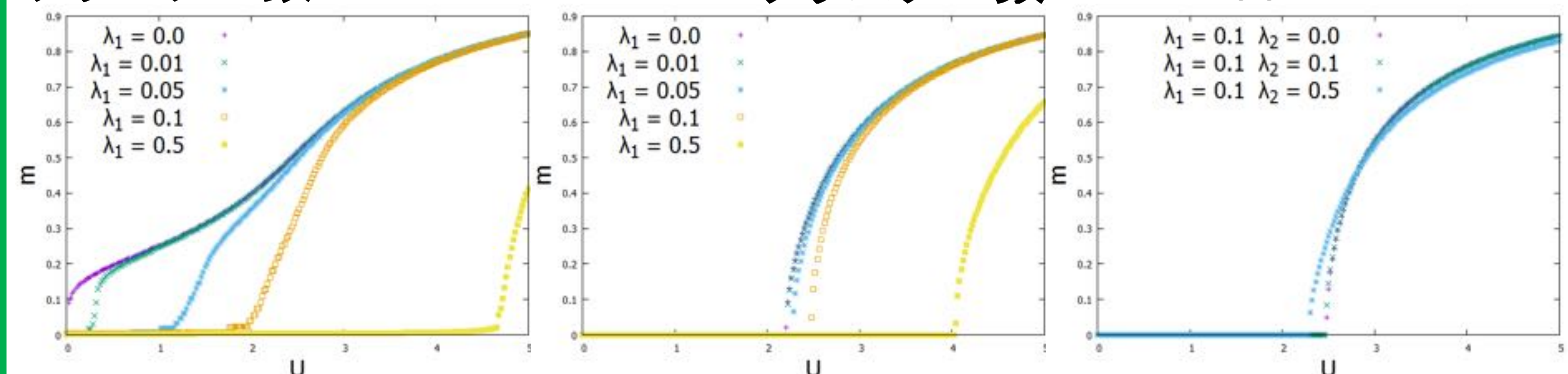
スピン分極  $m$  は境界上のサイトについて計算

zigzag

armchair

クラスタ数:  $10 \times 200$

クラスタ数:  $12 \times 200$



## まとめ

- 次近接サイト間のASOCにより、トポロジカル絶縁体転移を確認できた。
- 次近接サイト間のASOCにより、クーロン相互作用による反強磁性秩序は抑制された。
- 次々近接サイト間のASOCはバンド構造及び磁気秩序に対し、特異的に働かないことがわかった。

## 計算方法

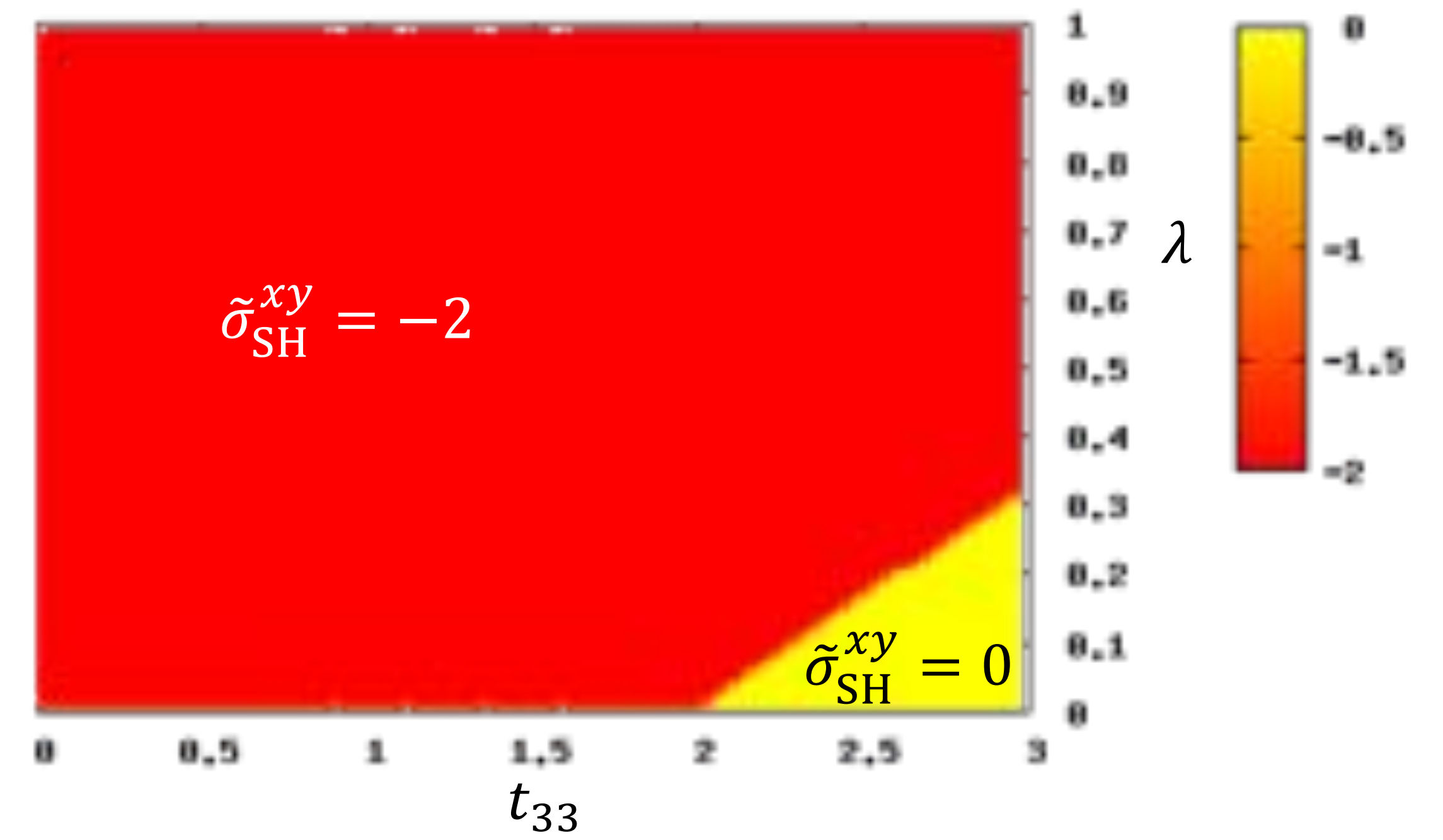
絶対零度で、クラスタ数  $32 \times 32$  で  $1/3$ -filling とし、 $t_{43} = 1$  に固定し  $\lambda, t_{33}$  を変えながらチャーン数を計算  
スピンホール伝導度をチャーン数から計算

$$\sigma_{SH}^{xy} = \frac{e}{4\pi} \sum_{n:\text{filled}} (Ch_{n\uparrow} - Ch_{n\downarrow}) \quad Ch_{n\uparrow,\downarrow}: \text{チャーン数}$$

## 結果

### 量子スピンホール効果

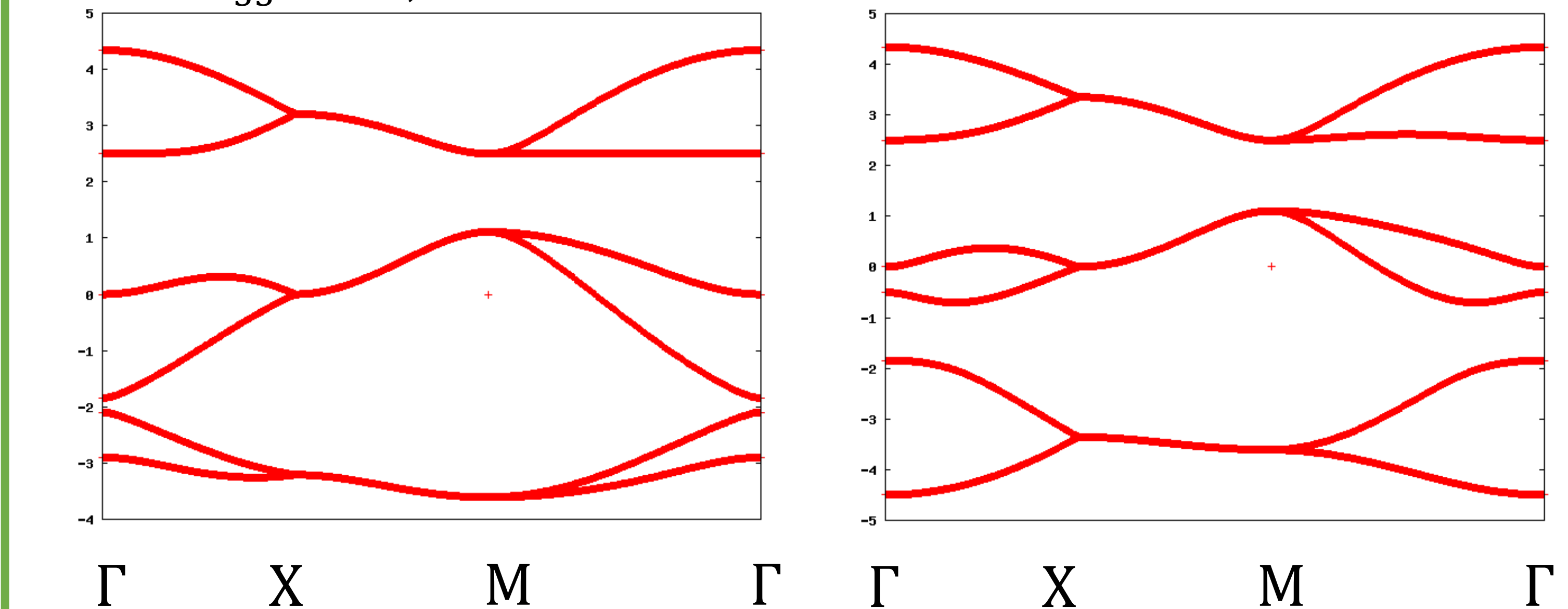
$\tilde{\sigma}_{SH}^{xy} = \sigma_{SH}^{xy} / \frac{e}{4\pi}$  をプロットした



### ASOCによるバンド構造の変化

Energy  $t_{33} = 2.5, \lambda = 0.1$

Energy  $t_{33} = 2.5, \lambda = 0.5$



## まとめ

Cairo pentagon格子の形状から期待されるASOCによるバンド構造の変化、スピンホール伝導度の変化とその量子化を確認できた。