

修士論文

量子モンテカルロ法を用いたスピンホール磁気抵抗効果の理論研究
(Theoretical study of spin Hall magnetoresistance by the quantum
Monte Carlo method)

石川卓門

2022年1月

概要

電子がもつスピンの自由度を制御するスピントロニクスの研究分野が理論・実験ともに盛んに研究されている。スピン流をデバイスに応用することで、記憶装置の高速読み取りや大容量化、エネルギーロスが少ないデバイス制御など、デバイスの高性能化および省エネルギー化が期待される。最近になって、磁性絶縁体と常磁性金属の接合系においてスピン流を介して生じるスピホール磁気抵抗効果が注目を集めている。この現象の解析には、現象論による解析が広く行われているが、温度依存性を詳しく記述をすることができないという欠点を有する。また、最近になってスピホール磁気抵抗の微視的理論が構築されており、動的局所スピン帯磁率とスピホール磁気抵抗が関連付けられている。この先行研究ではスピン波近似による解析が行われているが、スピン波近似の適用範囲外である磁気転移点近傍の温度領域や、磁気転移点より高温側でのスピホール磁気抵抗の温度依存性は詳しく議論されてこなかった。

本研究では、スピホール磁気抵抗を量子モンテカルロ法によって数値的に評価する。まずスピホール磁気抵抗の値を量子モンテカルロデータから精度よく求める新しい手法を提案したのち、スピホール磁気抵抗の温度依存性、膜厚依存性、反強磁性絶縁体の局在スピンの大きさ依存性などを議論する。特に磁気転移点近傍では、 $S = 1/2$ 量子スピン模型と $S = 1$ 量子スピン模型で振る舞いが大きくことなることを明らかにする。さらに膜厚を大きくするについて、磁気転移点が上昇し、低温における負のスピホール磁気抵抗が増強されることも示す。最後に乱れの効果についても簡単に議論する。これらの結果は、スピホール磁気抵抗の物理的描像を与え、今後より精密な理論と実験の比較を行う際の基礎を与えると期待される。

補足

修士論文を提出した後に、今回の論文で使用した計算プログラムパッケージ DSQSS において、出力されているグリーン関数の係数にバグがあったことが発見されました。バグを修正し再度計算を行った結果を preprint サーバーにあげていますので、こちらから確認ください。(https://arxiv.org/abs/2208.08096)

目次

概要		i
第 1 章	序章	1
1.1	研究背景	1
1.2	スピンホール磁気抵抗効果 (SMR)	2
1.3	本研究の目的	2
1.4	本論文の構成	2
第 2 章	スピンホール磁気抵抗	4
2.1	スピンホール効果と逆スピンホール効果	4
2.2	スピンホール磁気抵抗効果の実験	4
2.2.1	強磁性絶縁体を用いた接合でのスピンホール磁気抵抗	5
2.2.2	反強磁性絶縁体を用いたスピンホール磁気抵抗効果の実験結果	6
2.3	スピンホール磁気抵抗効果に対する現象論を用いた解析	7
第 3 章	スピンホール磁気抵抗効果の微視的理論	11
3.1	常磁性金属	11
3.2	反強磁性絶縁体	13
3.3	界面でのスピンコンダクタンスの評価	15
第 4 章	量子モンテカルロ法	19
4.1	モンテカルロ法	19
4.2	経路積分表現とマルコフ連鎖モンテカルロ法	19
4.2.1	経路積分表示	19
4.2.2	マルコフ連鎖モンテカルロ法	20
4.3	ワールドラインとグラフ変数	21
4.3.1	ワールドライン	21
4.3.2	グラフ変数	22
4.4	ループによる状態更新	24
4.4.1	ループアルゴリズム	24
4.4.2	向き付きループアルゴリズム	24
4.4.3	諏訪・藤堂法	25
4.5	プログラムパッケージ DSQSS	27

第 5 章	量子モンテカルロ法によるスピホール磁気抵抗の評価	29
5.1	パデ近似	29
5.2	スピホール磁気抵抗効果の新しい計算方法	31
第 6 章	計算結果	33
6.1	$S = 1/2$ の 2 次元量子ハイゼンベルク模型: 格子サイズ依存性	33
6.2	$S = 1/2$ の有限膜厚の量子ハイゼンベルク模型: 膜厚依存性	34
6.3	$S = 1$ の 2 次元量子ハイゼンベルク模型: 温度依存性	34
6.4	$S = 1$ 有限膜厚の量子ハイゼンベルク模型: 膜厚依存性	35
6.5	$S = 1$ 有限膜厚の量子ハイゼンベルク模型: 格子サイズ依存性	36
6.6	$S = 1$ 有限膜厚の量子ハイゼンベルク模型: 乱れの効果	36
6.7	$S = 1$ 量子ハイゼンベルク模型: 高温領域の振る舞い	36
6.8	スピン波を用いたの解析計算結果との比較	37
6.9	計算結果のまとめ	38
第 7 章	まとめ	40
付録 A	非平衡グリーン関数法	41
付録 B	揺動散逸定理	46
付録 C	静的交替磁化の効果	49
謝辞		51
参考文献		52

第 1 章

序章

本章では、スピントロニクスの研究背景を述べた上で、スピンホール磁気抵抗効果の先行研究に関してまとめ、本研究の動機と目的を述べる。

1.1 研究背景

エレクトロニクスの研究分野では、電子が持つ電荷の自由度に着目し電荷の流れをコントロールすることで様々な機能を持つデバイスが開発され、現代のコンピュータ社会の根底を支えている。近年、電子が持つ電荷の自由度だけでなくスピンの自由度を利用したスピントロニクス分野が基礎物性と産業応用の両側面で盛んに研究されている。スピントロニクス分野の研究は、1988年に巨大磁気抵抗効果 (GMR)[1]の発見が発端となっている。GMRとは磁性金属と非磁性金属を積層させた系で磁場を変えた際、磁化の向きにより電気抵抗が大きく変化する磁気抵抗効果である。この現象は伝導電子と磁化の *sd* 型交換相互作用によって理解される。GMRは磁気記録の読み取りヘッドへの応用に用いられ、容量向上に大きく貢献した。さらに、GMRの非磁性金属を絶縁体に置き換えた系において、トンネル効果により強磁性体の電子の状態密度のスピン依存性が強く反映された磁気抵抗効果を生み出すトンネル磁気抵抗効果 (TMR)も発見され [2, 3, 4]、MRAMと呼ばれる磁気メモリへの応用が行われてきた。

スピン角運動量の流れであるスピン流を制御しようとする研究は、スピン流がスピン拡散長と呼ばれるマイクロメートル以下のスケールで消失してしまうという大きな課題を抱えていた。しかし、微細加工技術の発達によりスピンの自由度が顕著に現れるスケールでの物質を人工的に作り出すことが可能になり、スピン流の制御に関する研究が盛んに行われるようになった。スピン軌道相互作用の大きい金属に電流を流した際、電流と直交する方向にスピン流が流れるスピンホール効果の発見 [5, 6, 7, 8]によって、簡便なスピン流の生成方法が確立された。また、その逆効果である逆スピンホール効果の発見 [9, 10]によって、電流や電圧測定によるスピン流検出が可能になった。これらの発見を基に、スピン流に関連する多くの物理現象が発見されている。スピンゼーバック効果 [11] やスピンペルチェ効果 [12] が発見され、熱流とスピン流の変換が可能になった。また、磁性絶縁体にマイクロ波を照射させることでスピン流を生成するスピンプンピング [13] など、様々なスピン流の生成方法が発見されている。次節で述べるスピンホール磁気抵抗効果も、そのようなスピン流に関係する磁気抵抗効果である。

1.2 スピンホール磁気抵抗効果 (SMR)

スピンホール磁気抵抗 (SMR) 効果は常磁性金属と磁性絶縁体の接合系において金属側に電流を流した際、スピンホール効果によるスピン流生成と、拡散スピン流による逆スピンホール効果が組み合わさって生じる磁気抵抗効果であり、磁化の方向に依存した抵抗の変化によって検出される。スピンホール磁気抵抗は常磁性金属 Pt と磁性絶縁体 YIG を用いた接合系で観測され [14]、その後様々な系で観測が行われた。常磁性金属 Pt と反強磁性絶縁体 NiO の接合系でもスピンホール磁気抵抗 [15] が観測されており、スピンホール磁気抵抗は多くの磁性材料の磁化方位決定に有益であることが知られている。これらの実験結果は、拡散方程式を用いた現象論 [16] によって解析がなされ、多くの系で実験と理論のよい一致が見られる。しかしながら、この現象論では界面でのスピンコンダクタンスが実験で決定されるパラメータとなっているため、その温度依存性について詳しく予言することができない。これを改善するために非平衡グリーン関数法に基づく微視的理論 [17] が提出されている。この理論では、スピンコンダクタンスを微視的に記述する方法が初めて与えられた。さらにスピン波近似を用いて、常磁性金属/反強磁性絶縁体の接合系におけるスピンホール磁気抵抗 [15] との比較も行われた。一方、スピン波近似は低温領域でのみ成り立つため、磁気転移点付近やそれより高温領域での議論に用いることができない。さらに、局在スピンの大きさが小さくなると、スピン波近似の精度が悪くなると予想される。よって、より広い温度領域でスピンホール磁気抵抗の振る舞いを理解することは重要な課題となっている。さらに実際の接合は有限の膜厚をもつ擬2次元スピン系となっており、その膜厚依存性も未解明の課題となっている。

1.3 本研究の目的

以上の背景を踏まえて、本研究ではスピンホール磁気抵抗の量子モンテカルロ法による数値計算を行い、金属-反強磁性絶縁体接合におけるスピンホール磁気抵抗の温度依存性や局在スピンの大きさ依存性、膜厚依存性などを議論する。まずスピンホール磁気抵抗を微視的理論によって記述し、その大きさを局所スピン帯磁率によって表現する。次に局所スピン帯磁率を含む積分量を、その松原振動数上での局所スピン帯磁率およびその周波数微分で表現する方法を提案し、実際に計算精度が大幅に向上することを示す。量子モンテカルロ法は公開されているプログラムパッケージ DSQSS を利用して実行し、その数値データを利用して、スピンホール磁気抵抗の温度依存性を詳しく調べる。特に局在スピンの大きさ S の値により、磁気転移点付近および転移点より高温領域でスピンホール磁気抵抗の振る舞いが大きく異なることを示す。さらに温度依存性の詳しい特徴や、膜厚依存性、乱れの効果などについても議論する。本研究は、スピンホール磁気抵抗の微視的な理解に貢献し、界面における反強磁性体の性質をより精密に議論するための基礎を提供すると期待される。

1.4 本論文の構成

第2章ではスピンホール磁気抵抗効果のこれまでの実験結果をまとめた上で、拡散方程式を用いた現象論による解析に関してまとめる。第3章では先行研究で議論された非平衡グリーン関数を用いたスピンホール磁気抵抗の定式化について説明する。特にスピンホール磁気抵抗は局所スピン帯磁率によって記述されることを述べる。第4章では量子モンテカルロ法の手法について概略をまとめた上で、今回用いるアルゴリズムに関して説明する。第5章では量子モンテカルロ法を用いて、スピンホール磁気抵抗の大きさ

を精度良く計算する手法に関して説明する。第 6 章では得られた数値計算結果とその解析結果をまとめる。最後の第 7 章で本研究で得られた結果をまとめる。

第 2 章

スピンホール磁気抵抗

本章ではスピンホール磁気抵抗効果の理論・実験に関する先行研究をまとめる。まず 2.1 節でスピンホール効果について説明した後、2.2 節でスピンホール磁気抵抗効果の概要および実験結果を簡単にまとめる。最後に 2.3 節で、これまで実験の解析に用いられてきた拡散方程式に基づく現象論をまとめる。

2.1 スピンホール効果と逆スピンホール効果

スピンホール効果 [18, 19] とは、スピン軌道相互作用のある非磁性金属に電流を流したときに、電流に対して垂直方向にスピン流が流れる現象である。スピンホール効果の概略図を図 2.1 の (a) に示す。このとき、電流とスピン流の両方に直交する向きのスピンが金属界面に蓄積する。スピンホール効果は微視的な機構によって、内因性スピンホール効果と外因性スピンホール効果の 2 つに分けられる。本研究では主にプラチナ (Pt) などのスピン軌道相互作用の強い金属でのスピンホール効果を考えるが、このような系では主に外因性スピンホール効果によってスピン流が生じることが知られている。外因性スピンホール効果には、スピンに依存した不純物散乱による skew scattering 機構や side jump 機構などが知られている。

スピンホール効果の逆過程である逆スピンホール効果の概略図を図 2.1 の (b) に示す。逆スピンホール効果はスピン軌道相互作用のある物質に対してスピン流を流した際、スピン流に対して垂直方向に電流が流れる現象である。逆スピンホール効果を用いると、スピン流を電流へと変換できるため、スピン流の検出方法として広く用いられている。

2.2 スピンホール磁気抵抗効果の実験

スピンホール磁気抵抗効果とは、常磁性金属と強磁性絶縁体の接合系において磁化の方位に依存して抵抗が変化する効果であり、2013 年に中山らによって強磁性絶縁体の YIG と常磁性金属の Pt の接合系において初めて観測された [14]。本節では、まずスピンホール磁気抵抗効果の起源について、簡単に概要をまとめる (詳しい理論は 2.3 節を参照)。図 2.2 にスピンホール磁気抵抗効果の模式図を示す。金属に電流を流すと、スピンホール効果により界面と垂直な方向にスピン流が流れ、界面にスピンが蓄積する。蓄積したスピンの一部は、界面を通して磁性絶縁体側に吸収されるが、この吸収レートは磁性絶縁体の磁化の向きに依存する。そのため、最終的に定常状態が実現したとき、スピン蓄積の量は磁化の向きに依存することになる。一方、蓄積されたスピンは拡散によって広がるため、スピンホール効果で生じるスピン流とは逆向きに拡散スピン流が生じる。これをバックフローと呼ぶ。このスピンのバックフローは、逆スピンホール効果によって電流に変換され、もともと流れていた直流電流に補正を加えることになり、最終的に

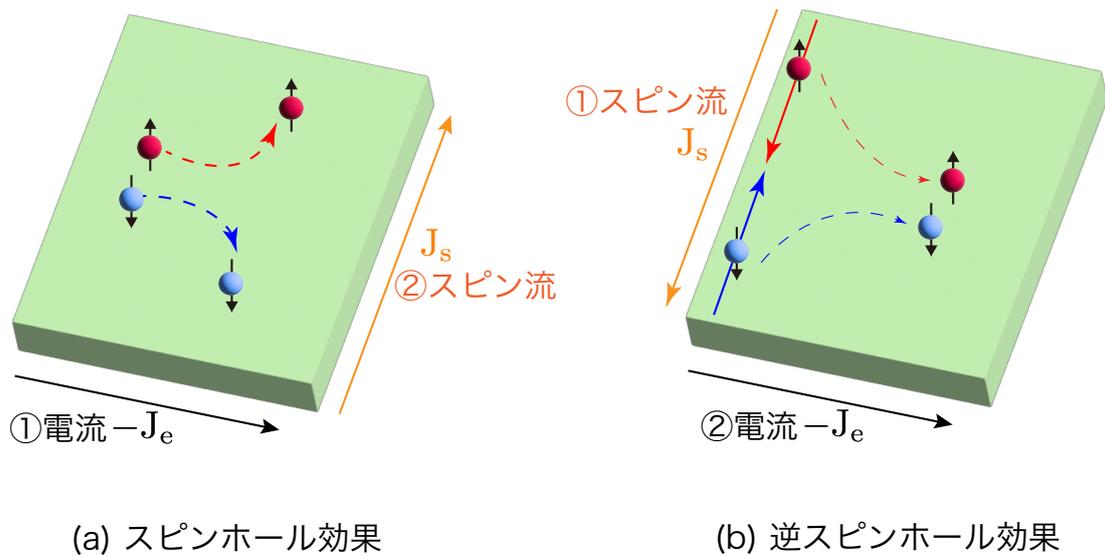


図 2.1: (a) スピンホール効果の概略図。電流 J_e を流すと垂直方向にスピン流 J_s が流れる。(b) 逆スピンホール効果の概略図。スピン流 J_s を流すと、電流 J_e が垂直方向に流れる。

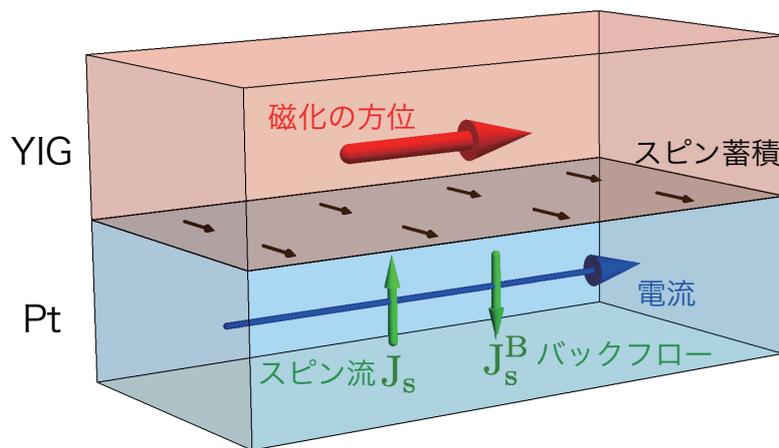


図 2.2: スピンホール磁気抵抗効果の概略図。

磁気抵抗効果として観測される。以下ではスピンホール磁気抵抗効果に関するこれまでの実験結果を、強磁性絶縁体を用いた場合、および、反強磁性絶縁体を用いた場合に分けて、簡単にまとめる。

2.2.1 強磁性絶縁体を用いた接合でのスピンホール磁気抵抗

2013 年の中山らの実験 [14] では、常磁性金属の Pt と強磁性絶縁体の YIG の接合系におけるスピンホール磁気抵抗が観測されている。図 2.3 の左側の上下のパネルは、2 つの異なる試料に対する抵抗の磁化方位依存性を示す。図 2.3 の右側の 3 つのパネルは、磁場の向き (=磁化の向き) の回転のさせかた (α , β , γ と名前が付けられている) を示している。ここでは常磁性金属 (Pt) に対して x 方向に電流が加えられており、スピンホール効果によって強磁性絶縁体/常磁性金属界面に y 方向を向いたスピンの蓄積する。

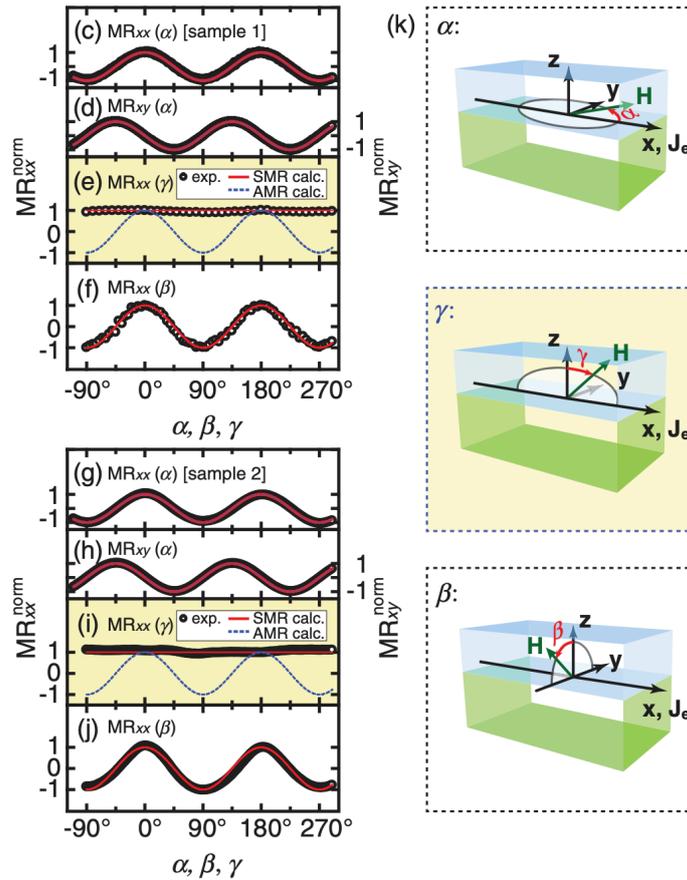


図 2.3: 実験で測定されたスピンホール磁気抵抗効果の実験結果。MR_{xx} は x 軸方向に電圧をかけ x 軸方向の電圧を測定した磁気抵抗の結果であり、MR_{xy} は x 軸方向に電圧をかけ y 軸方向の電圧を測定した磁気抵抗の結果である。左図の結果は得られた SMR の磁気抵抗の方位依存性の結果を -1 から 1 の範囲で規格化している。文献 [14] より引用。

磁気抵抗は、磁化の方位と蓄積したスピンの向き (y 方向) が成す角 θ にのみ依存している (γ 方向に磁化の方位を変化させたときに磁気抵抗が変化しないことから示唆される)。これは、上述したように蓄積したスピンの吸収レートが磁化方位で変わるという直感的な説明と整合する。スピンホール磁気抵抗の大きさは、以下の式で与えられる:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} \equiv \frac{R_{xx}(\theta = \pi/2) - R_{xx}(\theta = 0)}{R_{xx}(\theta = 0)}. \quad (2.1)$$

常磁性金属と強磁性絶縁体を用いた SMR の実験は YIG/Ta の接合での実験 [20] や、YIG/Pt の接合系における膜厚依存性 [21] および温度依存性 [22] が詳細に調べられている。実験により、Pt/YIG 接合でのスピンホール磁気抵抗の温度依存性は弱く、主にスピン拡散長の温度変化に由来すると考えられている [22, 23]。

2.2.2 反強磁性絶縁体を用いたスピンホール磁気抵抗効果の実験結果

スピンホール磁気抵抗効果は、反強磁性絶縁体と常磁性金属の接合系でも観測される。これまでに SrMnO₃/Pt 系 [24]、NiO/Pt 系 [15]、Cr₂O₃/Ta 系 [25] など様々な接合系で実験が行われている。ここ

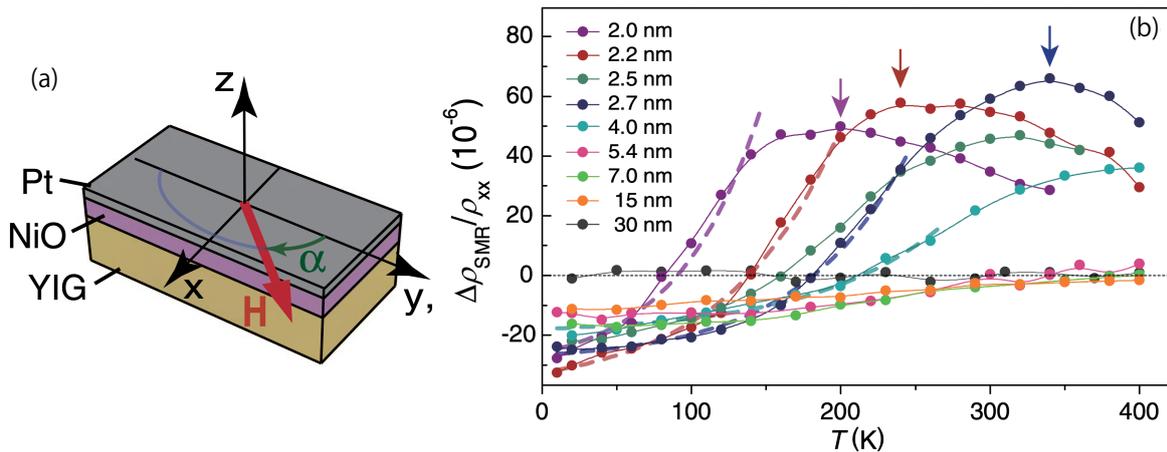


図 2.4: (a) 金属/反強磁性絶縁体/磁性絶縁体の接合系の模式図。(b) 反強磁性絶縁体におけるスピンホール磁気抵抗効果の膜厚、温度依存性。ネールベクトルの向きと蓄積したスピンの角度は $\theta = 90^\circ$ から磁場 0 の時のオフセットの値を引いた結果。文献 [15] より引用。

では NiO/Pt 系でのスピンホール磁気抵抗の温度依存性を詳細に調べた論文 [15] を紹介する。

この実験では、図 2.4 (a) に示すような YIG/NiO/Pt 接合系が用いられており、強磁性絶縁体である YIG と反強磁性絶縁体である NiO の界面における交換バイアスによって、YIG の磁化方向と NiO のネールベクトルが直交することが予測されている [26, 27]。よって、YIG/NiO/Pt の 3 層接合系では、YIG の磁化の方位を外部磁場で変化させることで、NiO のネールベクトルの向きを変えることができると考えられている。このとき、外部磁場の方向とネールベクトルが常に直交するために、外部磁場と蓄積したスピンの向きの成す角を θ とすると、磁気抵抗の符号が強磁性体の場合と逆符号となる。温度と NiO の膜厚を変えた時の磁気抵抗の測定結果を図 2.4 の (b) に示す。膜厚が 30 nm と厚い時はスピンホール抵抗は観測出来ていないが、これは反強磁性ドメインが生じるからと考えられている。膜厚が 15 nm より薄くなると負のスピンホール磁気抵抗が生じるようになる。この負の磁気抵抗は、上述のように YIG の磁化と NiO のネールベクトルが直交すると考えるとよく理解できる。強磁性絶縁体とは異なり、反強磁性絶縁体でのスピンホール磁気抵抗は温度依存性が大きく、特に膜厚が 4.0 nm 以下では温度を上昇させていくとある温度以上で符号反転がおり、さらに高温で磁気抵抗の大きさがピークを持っていることが確認できる。この高温でのピークは磁気転移点と考えられるが、薄膜での磁気転移温度を正確に測ることは難しいため、まだ詳細は明らかになっていない。また、膜厚を薄くしていくと符号反転の温度が低温領域にシフトしていくことも確認できる。これは磁気転移点が界面での乱れや次元性の変化によって低温にシフトするためであると考えられる。

2.3 スピンホール磁気抵抗効果に対する現象論を用いた解析

スピンホール磁気抵抗効果の解析には、拡散方程式をベースとした現象論 [16] が広く用いられており、現象論的パラメータを実験によって決めることで、実験結果をよく説明することができる。本節では、この現象論についてまとめる。

常磁性金属に外部電場 $\mathbf{E} = (E_x, 0, 0)$ を加えると、電気伝導度を σ とし、 $\mathbf{j} = (\sigma E_x, 0, 0)$ の電流が

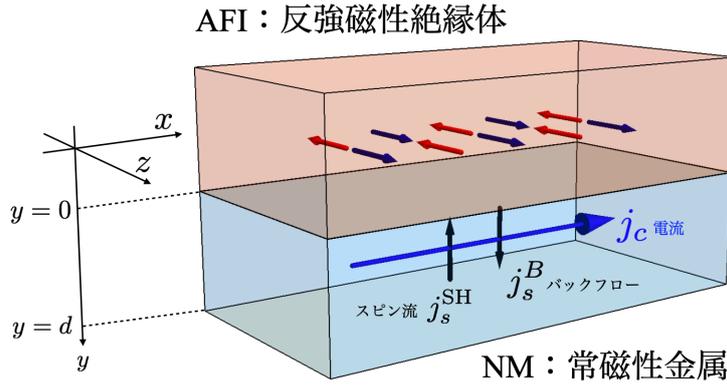


図 2.5: スピンホール磁気抵抗の理論模型のセットアップ。

流れる。このときスピンホール効果によって y 向きに偏極したスピンの z 方向に流れ、大きさ

$$j_s^{\text{SH}} = \theta_{\text{SH}} j_x = \theta_{\text{SH}} \sigma E_x, \quad (2.2)$$

のスピン流が生じる。ここで θ_{SH} はスピンホール角である。このスピン流によって、常磁性金属の界面付近に y 方向に偏極したスピンの蓄積されることになる。スピン蓄積の大きさは、スピン化学ポテンシャル

$$\mu_s(y) = \mu_{\uparrow}(y) - \mu_{\downarrow}(y), \quad (2.3)$$

によって記述される。ここで $\mu_{\uparrow}(y)$ と $\mu_{\downarrow}(y)$ はそれぞれ、2つの異なるスピンの化学ポテンシャルである。一方、この蓄積したスピンは拡散により、スピンホール効果で生じるスピン流と反対向きにスピン拡散流 (バックフロー) が生じる。バックフローは、スピン化学ポテンシャルの勾配に比例し、

$$j_s^{\text{B}} = -\frac{\sigma}{2e} \partial_y \mu_s(y), \quad (2.4)$$

と記述される ($e (> 0)$ は電荷素量)。バックフローまで含めた全スピン流 $j_s(y)$ は以下の形で書くことが出来る。

$$j_s(y) = j_s^{\text{B}}(y) - j_s^{\text{SH}}. \quad (2.5)$$

次にスピン緩和の効果を考える。定常状態のスピン流を考え、金属中のスピン流密度に時間変化が無いとする。このとき、スピン流の発散は連続の式によってスピン緩和と関係付けることができる:

$$\frac{\partial j_s(y)}{\partial y} = -\frac{eD(\epsilon_F)\mu_s(y)}{\tau}. \quad (2.6)$$

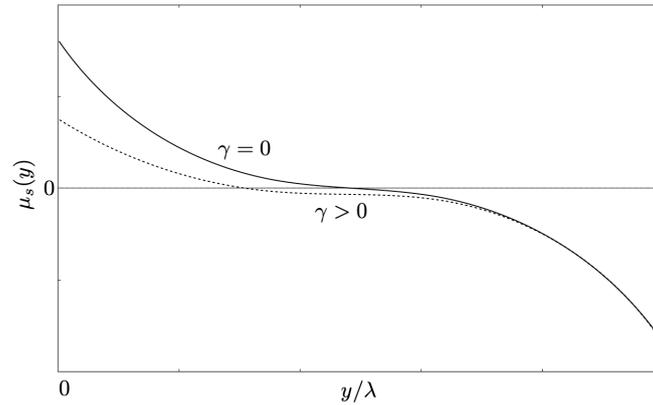
ここで τ はスピン緩和時間、 $D(\epsilon_F)$ はフェルミ面における状態密度である。上式に式 (2.5) と式 (2.4) を代入することで、スピン化学ポテンシャルに対する微分方程式を得ることが出来る。

$$\frac{d^2 \mu_s}{dy^2} = \frac{\mu_s}{\lambda^2}. \quad (2.7)$$

ここで拡散係数を $D = \sigma D(\epsilon_F)/2e^2$ と定義し、 $\lambda = \sqrt{D\tau}$ はスピン拡散長と呼ばれる量である。

式 (2.7) は境界条件の元で簡単に解くことができる。ここでは $y = d$ で真空に接しており、金属と磁性絶縁体の界面 $y = 0$ において金属中の電子が単位時間あたりに失うスピン角運動量 I_S を導入し、磁性絶縁体の磁化方向に依存するものとする。このとき境界条件は以下の2式で与えられる:

$$j_s(x) = \begin{cases} 0, & (x = d), \\ -\frac{e}{\hbar/2} \frac{I_S}{S}, & (x = 0). \end{cases} \quad (2.8)$$

図 2.6: スピン化学ポテンシャルの γ 依存性

ここで S は界面の表面積である。実際にスピン蓄積で生じる化学ポテンシャルの大きさは電子系のフェルミエネルギーより十分小さいので、界面で単位時間あたりに失われるスピン角運動量は、界面でのスピン化学ポテンシャル $\mu_s(0)$ に比例するとしてよい。そこでその線形応答係数として、スピンコンダクタンス G_s を以下のように定義する:

$$G_s \equiv \lim_{\mu_s(0) \rightarrow 0} \frac{I_S}{\mu_s(0)}. \quad (2.9)$$

さらに無次元化したスピンコンダクタンスを以下のように定義する:

$$\gamma \equiv \frac{4e^2}{\hbar} \frac{G_s}{S\sigma/\lambda}. \quad (2.10)$$

この無次元化したスピンコンダクタンスは、現象論で広く用いられているスピンミキシングコンダクタンスに比例した量になっているが、磁化方位依存性について何も仮定していない為、より一般的な物理量となっている。スピンコンダクタンスは境界条件 (2.8) のもとで、微分方程式 (2.7) を解くと、

$$\frac{\mu_s(y)}{\mu_{s0}} = -\frac{\sinh((2y-d)/2\lambda)}{\sinh(d/2\lambda)} - \frac{\gamma}{1 + \gamma \coth(d/\lambda)} \frac{\cosh(y-d)/\lambda}{\sinh(d/\lambda)}, \quad (2.11)$$

が得られる。ここで μ_{s0} はスピン吸収が無い ($\gamma = 0$) の時の金属/磁性体界面 ($y = 0$) でのスピン化学ポテンシャルである。スピン化学ポテンシャルの空間依存性を図 2.6 に示す。実線は界面 ($x = 0$) におけるスピン吸収がない場合 ($\gamma = 0$)、破線はスピン吸収がある場合をそれぞれ示す。スピン吸収があると、金属/強磁性絶縁体界面 ($x = 0$) 付近のスピン蓄積が抑えられ、スピン化学ポテンシャルが 0 に近づくことが読み取れる。無次元量 γ で記述される界面におけるスピン吸収強度が大きいほど、界面付近のスピン蓄積は抑制される。

スピン化学ポテンシャルから式 (2.4) を用いバックフローを計算し、さらに逆スピンホール効果によって電流への変換を計算すると、常磁性金属の電気抵抗率の変化は次のように計算される:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \theta_{\text{SH}}^2 \frac{\gamma \tanh^2(d/2\lambda)}{1 + \gamma \coth(d/\lambda)}. \quad (2.12)$$

ここで ρ は常磁性金属の電気抵抗率である。さらに多くの実験状況では、 $\gamma \ll 1$ となるので、

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \theta_{\text{SH}}^2 \gamma \tanh^2(d/2\lambda). \quad (2.13)$$

となり、磁気抵抗は界面でのスピコンダクタンスに比例することがわかる。つまり磁気抵抗の磁化方位依存性は、界面でのスピコンダクタンスの磁化方位依存性に由来する。

このように強磁性絶縁体の磁化の方位に依存して、無次元化された界面でのスピコンダクタンス γ が変化すると考えることで、スピンホール磁気抵抗が説明される。この理論は多くの実験の解析で利用され、実験結果をよく説明することが知られている。一方、現象論では γ の磁化方位依存性が予め決められてしまっており、磁気抵抗の符号反転を説明することが難しい。また現象論では、 γ の大きさは実験から定める現象論的パラメータとして考えられているため、温度依存性についての予言能力がないことが欠点である。

第 3 章

スピンホール磁気抵抗効果の微視的理論

2.3 節で述べた現象論では、スピンコンダクタンス G_s (もしくは無次元化されたスピンコンダクタンス γ) を実験との比較で決められる現象論的パラメータとして取り扱うため、スピンホール磁気抵抗の温度依存性などについて予言することが困難である。そこで本章では、スピンホール磁気抵抗効果の微視的理論を構築する方法を文献 [17] に従って説明する。3.1 節および 3.2 節でそれぞれ常磁性金属および反強磁性絶縁体のモデルを導入し、熱平衡状態におけるグリーン関数を計算する。さらに 3.3 節で、界面の交換相互作用に関する二次摂動によって界面でのスピンコンダクタンスを評価する。本章で導出したスピンコンダクタンスの表式は、後の章のモンテカルロ計算による評価で用いる。非平衡グリーン関数の一般的な定式化は付録 A にまとめる。

3.1 常磁性金属

本節では、常磁性金属を自由電子ガスモデルによって記述し、後の摂動計算で用いる常磁性金属のグリーン関数を計算する。界面におけるスピン蓄積の効果はスピン化学ポテンシャルによって記述する。

系のハミルトニアンは、自由電子ガスモデルで記述する:

$$H_{NM} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (3.1)$$

ここで $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}\sigma}$ は波数 \mathbf{k} , スピン $\sigma (= \uparrow, \downarrow)$ を持つ電子の生成消滅演算子、 $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ は電子の運動エネルギーである。今、スピンホール効果によって常磁性金属の界面近傍にスピンが蓄積されており、スピンの化学ポテンシャルが図 (3.2) の様に $\delta\mu_s = \mu_\uparrow - \mu_\downarrow$ だけ異なるとする。ただしこのスピン蓄積

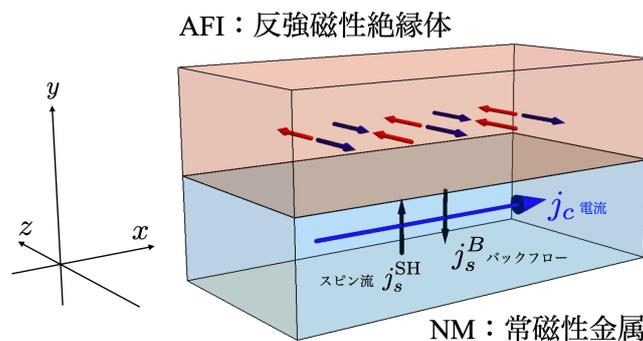


図 3.1: スピンホール磁気抵抗効果のセットアップ

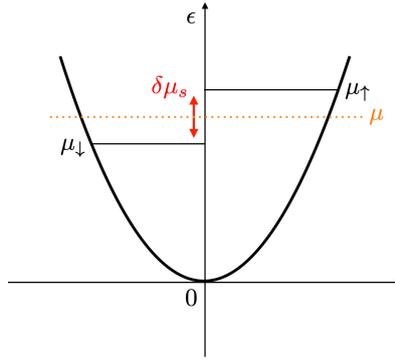


図 3.2: 自由電子模型の分散関係とスピン化学ポテンシャルの模式図。

は非平衡状態で実現している状態であり、熱平衡状態の密度行列 $\rho = Z_{\text{NM}}^{-1} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{NM}}}$ (Z_{NM} : 分配関数) にのみその影響が現れるとする。このときの準熱平衡状態を記述するハミルトニアンは、以下のように与えられる:

$$\mathcal{H}_{\text{NM}} = \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - \delta\mu_s/2) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} + \delta\mu_s/2) c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}. \quad (3.2)$$

ここで $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ は化学ポテンシャルから測った電子の運動エネルギーである。

スピンの昇降演算子は電子の生成消滅演算子を用いて以下のように記述することが出来る:

$$s_{\mathbf{q}}^+ = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}, \quad (3.3)$$

$$s_{\mathbf{q}}^- = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}. \quad (3.4)$$

ハイゼンベルグ描像で、電子の生成消滅演算子の時間発展が、

$$c_{\mathbf{k}\sigma}(t) = e^{iH_{\text{NM}}t/\hbar} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{-iH_{\text{NM}}t/\hbar} = e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}}t/\hbar} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.5)$$

$$c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(t) = e^{iH_{\text{NM}}t/\hbar} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-iH_{\text{NM}}t/\hbar} = e^{i\epsilon_{\mathbf{k}}t/\hbar} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \quad (3.6)$$

と記述されることを用いると、スピンの昇降演算子の時間発展はハイゼンベルグ表示を用いて以下の形で計算することが出来る。

$$s_{\mathbf{q}}^+(t) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger(t) c_{\mathbf{k}\downarrow}(t) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})t/\hbar} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}. \quad (3.7)$$

ここで、 N_{NM} を常磁性金属のユニットセルの数として、スピン帯磁率 (遅延スピン相関関数) を以下の式で定義する。

$$\chi_{+-}^R(\mathbf{q}, t) = \frac{i}{N_{\text{NM}}\hbar} \theta(t) \langle [s_{\mathbf{q}}^+(t), s_{\mathbf{q}}^-(0)] \rangle. \quad (3.8)$$

スピン演算子を場の演算子を用いて書いた上で、交換関係を用いてスピン帯磁率を計算する。

$$\begin{aligned} \chi_{+-}^R(\mathbf{q}, t) &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\hbar} \theta(t) e^{i(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})t/\hbar} \langle [s_{\mathbf{q}}^+, s_{\mathbf{q}}^-] \rangle, \\ &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\hbar} \theta(t) \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})t/\hbar} \langle [c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}, c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}] \rangle, \\ &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\hbar} \theta(t) \sum_{\mathbf{k}} e^{i(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})t/\hbar} [f(\xi_{\mathbf{k}} + \delta\mu_s/2) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \delta\mu_s/2)]. \end{aligned} \quad (3.9)$$

ここで $f(\xi) \equiv 1/(e^{\beta\xi} + 1)$ はフェルミ分布関数である。これをフーリエ変換することで、

$$\begin{aligned}\chi^R(\mathbf{q}, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \chi^R(\mathbf{q}, \omega) e^{i\omega t/\hbar} \\ &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})t/\hbar - \delta t/\hbar} [f(\xi_{\mathbf{k}} + \delta\mu_s/2) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \delta\mu_s/2)] \\ &= \frac{1}{N_{\text{NM}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}} + \delta\mu_s/2) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \delta\mu_s/2)}{\hbar\omega + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}} + i\delta},\end{aligned}\quad (3.10)$$

が得られる。ここで δ は積分を収束させるために導入された収束因子 (正の微小量) である。後の計算で用いる局所スピン帯磁率 $\chi_{\text{loc}}^R(\omega)$ を以下のように定義する:

$$\chi_{\text{loc}}^R(\omega) = \frac{1}{N_{\text{NM}}} \sum_{\mathbf{q}} \chi^R(\mathbf{q}, \omega). \quad (3.11)$$

連続極限において波数の和は状態密度 $N(0)$ を用いてエネルギー積分に書き換えることができる。

$$\frac{1}{N_{\text{NM}}} \sum_{\mathbf{k}} (\dots) \simeq N(0) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi (\dots). \quad (3.12)$$

ここで $N(0)$ はスピンあたり・ユニットセルあたりのフェルミ面近傍での状態密度である。式 (3.11) に式 (3.10) を代入し、エネルギー積分の形に書き換える:

$$\chi_{\text{loc}}^R(\omega) \simeq N(0)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\xi' \frac{f(\xi + \delta\mu_s/2) - f(\xi' - \delta\mu_s/2)}{\hbar\omega + \xi' - \xi + i\delta}. \quad (3.13)$$

スピン帯磁率の遅延成分の虚部は $\text{Im}[1/(x + i\delta)] = -\pi\delta(x)$ を用いて、次のように求めることができる。

$$\begin{aligned}\text{Im} \chi_{\text{loc}}^R(\omega) &= -\pi N(0)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\xi' [f(\xi + \delta\mu_s/2) - f(\xi' - \delta\mu_s/2)] \delta(\hbar\omega + \xi' - \xi), \\ &= -\pi N(0)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi' [f(\xi' + \hbar\omega + \delta\mu_s/2) - f(\xi' - \delta\mu_s/2)], \\ &= \pi N(0)^2 (\hbar\omega + \delta\mu_s).\end{aligned}\quad (3.14)$$

3.2 反強磁性絶縁体

本節では、反強磁性絶縁体を記述する量子ハイゼンベルグ模型を導入し、グリーン関数の表式をまとめた上で、磁化の方位依存性の取り扱いに関して議論する。

模型を導入する前に座標変換について述べる。スピンコンダクタンスの定式化を行うときには、反強磁性絶縁体中のネールベクトルの向きに固定した座標系を用いるのが便利である。図 3.3 のように研究室系の座標系を $O-xyz$ 、磁化に固定した座標系を $O-x'y'z'$ とする。この 2 つの座標系によってスピン演算子を $\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z) = (S^{x'}, S^{y'}, S^{z'})$ と記述する。この 2 つの表示の間には以下の関係式が成り立つ:

$$S^x = \cos\theta S^{x'} - \sin\theta S^{z'}, \quad (3.15)$$

$$S^y = S^{y'}, \quad (3.16)$$

$$S^z = \sin\theta S^{x'} + \cos\theta S^{z'}. \quad (3.17)$$

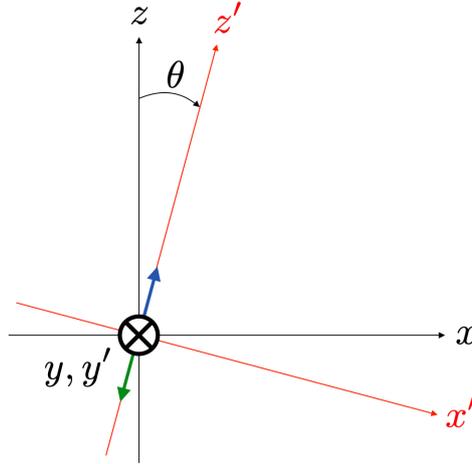


図 3.3: 研究室系 $O-xyz$ から磁化方位に z' 軸を固定した座標系 $O-x'y'z'$ 系への座標変換。

ここで θ はネールベクトルの方位を表す (図 3.3 参照)。このとき、 $O-x'y'z'$ 系ではスピンの期待値は次のように記述される:

$$\langle \mathbf{S}_A \rangle = (0, 0, \tilde{S}_0), \quad (3.18)$$

$$\langle \mathbf{S}_B \rangle = (0, 0, -\tilde{S}_0), \quad (3.19)$$

ここで $\mathbf{S}_A, \mathbf{S}_B$ は副格子 A, B 上にある局在スピン、 \tilde{S}_0 は自発磁化の大きさを表す。

次に、反強磁性量子ハイゼンベルグ模型のハミルトニアンは $O-x'y'z'$ 座標系でみたスピン演算子によって、以下のように与えられる:

$$H_{\text{AFI}} = J \sum_{\langle l, m \rangle} \left[\frac{1}{2} \left(S_{A,l}^{+'} S_{B,m}^{-'} + S_{A,l}^{-'} S_{B,m}^{+'} \right) + S_{A,l}^{z'} S_{B,m}^{z'} \right] + D \sum_l \left[(S_{A,l}^{z'})^2 + (S_{B,l}^{z'})^2 \right] + h \sum_l \left[S_{A,l}^{z'} - S_{B,l}^{z'} \right], \quad (3.20)$$

ここでスピンは立方格子の上に置かれており、A 副格子と B 副格子に分けて考える。 $\mathbf{S}_l = (S_{\nu,l}^x, S_{\nu,l}^y, S_{\nu,l}^z)$ は大きさ S_0 の副格子 ν ($=A, B$) におかれたスピン角運動量演算子、 $S_{\nu,l}^{\pm} = S_{\nu,l}^x \pm S_{\nu,l}^y$ はスピン昇降演算子、 $\langle l, m \rangle$ を最近接格子の組を表す。 J は交換相互作用の大きさであり、以後、エネルギーの大きさの表す基準とする。また後述する量子モンテカルロ法の計算でネールベクトルを固定するために、小さな磁化の異方性および交代磁場を考え、それぞれの大きさを D, h によって記述しておく。

スピン帯磁率 (スピン相関関数) の遅延成分をそれぞれ以下の式で定義する。

$$G_{\nu\nu'}^{R+-}(\mathbf{q}, t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [S_{\nu,\mathbf{q}}^{+'}(t), S_{\nu,\mathbf{q}}^{-'}(0)] \rangle, \quad (3.21)$$

$$G_{\nu\nu'}^{R-+}(\mathbf{q}, t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [S_{\nu,\mathbf{q}}^{-'}(t), S_{\nu,\mathbf{q}}^{+'}(0)] \rangle, \quad (3.22)$$

$$G_{\nu\nu'}^{Rzz}(\mathbf{q}, t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'}(t), S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'}(0)] \rangle. \quad (3.23)$$

ここで $S_{\nu,\mathbf{q}}^{+'}$, $S_{\nu,\mathbf{q}}^{-'}$, $S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'}$ はスピン演算子のフーリエ変換である:

$$S_{\nu,\mathbf{q}}^{+'} = \sum_l e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_l} S_{\nu,l}^{+'}, \quad (3.24)$$

$$S_{\nu,\mathbf{q}}^{-'} = (S_{\nu,\mathbf{q}}^{+'})^\dagger = \sum_l e^{+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_l} S_{\nu,l}^{+'}, \quad (3.25)$$

$$S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'} = \sum_l e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_l} S_{\nu,l}^{z'}. \quad (3.26)$$

ここで \mathbf{R}_l はサイト l の位置ベクトルである。さらに、局所スピン帯磁率を以下のように定義する:

$$G_{\nu\nu',\text{loc}}^{R+-}(\omega) = \frac{1}{N_{\text{AFI}}} \sum_{\mathbf{q}} G_{\nu\nu'}^{R+-}(\mathbf{q}, \omega), \quad (3.27)$$

$$G_{\nu\nu',\text{loc}}^{R-+}(\omega) = \frac{1}{N_{\text{AFI}}} \sum_{\mathbf{q}} G_{\nu\nu'}^{R-+}(\mathbf{q}, \omega), \quad (3.28)$$

$$G_{\nu\nu',\text{loc}}^{Rzz}(\omega) = \frac{1}{N_{\text{AFI}}} \sum_{\mathbf{q}} G_{\nu\nu'}^{Rzz}(\mathbf{q}, \omega). \quad (3.29)$$

ここで N_{AFI} は反強磁性絶縁体のユニットセルの数である。

3.3 界面でのスピンコンダクタンスの評価

本節では文献 [17, 28, 29] に従って常磁性金属と反強磁性絶縁体の界面のハミルトニアンを交換相互作用によって記述する。さらに非平衡グリーン関数法を用いて2次摂動の計算を行い、界面でのコンダクタンスの表式を導出する。

界面での相互作用ハミルトニアンを交換相互作用で記述する。

$$H_{\text{ex}} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} [T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^\nu S_{\nu\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{q}}^- + (T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^\nu)^* S_{\nu\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{q}}^+]. \quad (3.30)$$

ここで $T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^\nu$ は界面での交換相互作用の大きさを表す。 $S_{\nu\mathbf{k}}^\pm = S_{\nu\mathbf{k}}^x \pm iS_{\nu\mathbf{k}}^y$ は、実験室座標系 $O-xyz$ におけるスピンの昇降演算子であり、変換式 (3.15)-(3.17) を用いて磁化に固定された座標系 $O-x'y'z'$ で表示したスピン演算子によって、

$$S_{\nu\mathbf{k}}^+ = \cos^2(\theta/2) S_{\nu\mathbf{k}}^{+'} - \sin^2(\theta/2) S_{\nu\mathbf{k}}^{-'} - \sin\theta S_{\nu\mathbf{k}}^{z'}, \quad (3.31)$$

$$S_{\nu\mathbf{k}}^- = \cos^2(\theta/2) S_{\nu\mathbf{k}}^{-'} - \sin^2(\theta/2) S_{\nu\mathbf{k}}^{+'} - \sin\theta S_{\nu\mathbf{k}}^{z'}. \quad (3.32)$$

と書き表される。これを用いて、界面での相互作用を記述するハミルトニアンは、以下のように書き換えられる:

$$H_{\text{ex}}^{(a)} = g_a(\theta) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} [T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^\nu S_{\nu\mathbf{k}}^{(a)} s_{\mathbf{q}}^- + (T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^\nu)^* S_{\nu\mathbf{k}}^{(a)} s_{\mathbf{q}}^+], \quad (a = 1, 2, 3) \quad (3.33)$$

ここで $S_{\nu\mathbf{k}}^{(a)}$, $g_a(\theta)$ ($a = 1, 2, 3$) は、

$$S_{\nu\mathbf{k}}^{(1)} = S_{\nu\mathbf{k}}^{z'}, \quad g_1(\theta) = -\sin\theta, \quad (3.34)$$

$$S_{\nu\mathbf{k}}^{(2)} = S_{\nu\mathbf{k}}^{+'}, \quad g_2(\theta) = \cos^2(\theta/2), \quad (3.35)$$

$$S_{\nu\mathbf{k}}^{(3)} = S_{\nu\mathbf{k}}^{-'}, \quad g_3(\theta) = -\sin^2(\theta/2). \quad (3.36)$$

である。

次にスピン流演算子 \hat{I}_S を常磁性金属側で失われるスピンとして以下のように定義する:

$$\hat{I}_S = -\hbar\partial_t s_{\text{tot}}^z = i[s_{\text{tot}}^z, H_{\text{ex}}], \quad (3.37)$$

$$s_{\text{tot}}^z = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}). \quad (3.38)$$

金属のスピン交換関係を用いて、スピン流演算子は以下のように計算することができる。

$$\hat{I}_S = \hat{I}_S^{(1)} + \hat{I}_S^{(2)} + \hat{I}_S^{(3)}, \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \hat{I}_S^{(a)} &= i[s_{\text{tot}}^z, H_{\text{ex}}^{(a)}] \\ &= -ig_a(\theta) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} [T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^\nu S_{\mathbf{k}}^{(a)} s_{\mathbf{q}}^- - (T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^\nu)^* (S_{\mathbf{k}}^{(a)})^\dagger s_{\mathbf{q}}^+]. \end{aligned} \quad (3.40)$$

さらにスピン流演算子の期待値は以下の様に計算することが出来る:

$$\langle \hat{I}_S^{(a)} \rangle = \text{Re} \left[-2ig_a(\theta) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{k}}^{(a)}(0) s_{\mathbf{q}}^-(0) \rangle \right]. \quad (3.41)$$

界面における相互作用ハミルトニアンに対して二次摂動の計算を行うことで、スピン流を以下のように計算することができる (詳しい計算は付録 A を参照):

$$\langle \hat{I}_S^{(a)} \rangle = 4\hbar g_a(\theta)^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 N_{\text{NM}} \text{Im} \chi^R(\mathbf{q}, \omega) (-\text{Im} G_{\nu\nu'}^{R,(a)}(\mathbf{k}, \omega)) [f(\hbar\omega) - f(\hbar\omega + \delta\mu_s)]. \quad (3.42)$$

この式は、トンネル接合における電流公式の導出方法 (トンネルハミルトニアンの方法) と類似した導出方法・結果になっている [30]。

以下では、界面での交換相互作用が波数に依らないとして計算を進める ($T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \equiv \mathcal{T}$)。このとき、式 (3.11), (3.27), (3.28), (3.29) で導入した局所スピン帯磁率を用いて記述し直し、スピン化学ポテンシャル $\delta\mu_s$ の一次近似を用いると、スピン流の期待値は以下のように計算することが出来る:

$$\langle \hat{I}_S^{(a)} \rangle = Ag_a(\theta)^2 \delta\mu_s \int \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi} \text{Im} \chi_{\text{loc}}^R(\omega) (-\text{Im} G_{\nu\nu', \text{loc}}^{R,(a)}(\omega)) \left[-\frac{\partial f(\hbar\omega)}{\partial(\hbar\omega)} \right], \quad (3.43)$$

$$A = 4|\mathcal{T}|^2 N_{\text{NM}}^2 N_{\text{AFI}}. \quad (3.44)$$

ボーズ分布関数の微分を実行し、(3.14) で求めた金属の局所スピン帯磁率を代入すると、

$$\langle \hat{I}_S^{(a)} \rangle = A' g_a(\theta)^2 \delta\mu_s \int \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi} (\hbar\omega + \delta\mu_s) (-\text{Im} G_{\nu\nu', \text{loc}}^{R,(a)}(\omega)) \frac{\beta}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)}, \quad (3.45)$$

$$A' = 4\pi |\mathcal{T}|^2 N_{\text{NM}}^2 N_{\text{AFI}} N(0)^2, \quad (3.46)$$

が得られる。最後にコンダクタンスの定義式

$$G_S = \lim_{\delta\mu_s \rightarrow 0} \frac{\langle \hat{I}_S \rangle}{\delta\mu_s}, \quad (3.47)$$

よりコンダクタンスを求めると、

$$G_S = \sum_{a=1}^3 A' g_a(\theta)^2 \int \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi} (-\text{Im} G_{\nu\nu', \text{loc}}^{R,(a)}(\omega)) \frac{\beta\hbar\omega}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)}, \quad (3.48)$$

となる。前章の式 (2.13) からわかるようにスピンホール磁気抵抗の大きさは界面でのスピンコンダクタンスに比例する。磁気抵抗の大きさを表す無次元量として

$$\gamma \equiv \frac{4e^2}{\hbar} \frac{G_s}{S\sigma/\lambda}. \quad (3.49)$$

を導入し、スピンの静的交替磁化の効果によるコンダクタンスの変化 $\gamma_{\text{SMR},(0)} = -\frac{A''}{2}\tilde{S}_0^2$ (\tilde{S}_0 はスタガード磁化の大きさ) を付録 C に従って導入すると、スピンホール磁気抵抗は以下の形で書くことが出来る:

$$\begin{aligned} \gamma_{\text{SMR}} &= \gamma_{\text{SMR}}(\theta = \pi/2) - \gamma_{\text{SMR}}(\theta = 0) + \gamma_{\text{SMR},(0)} \\ &= \sum_{a=1}^3 A'' (g_a^2(\pi/2) - g_a^2(0)) \int \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi} \left[(-\text{Im}G_{\nu\nu',\text{loc}}^{R,(a)}(\omega)) \frac{\beta\hbar\omega}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)} \right] + \gamma_{\text{SMR},(0)} \quad (3.50) \\ &= A'' \int \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi} (-\text{Im}G_{\nu\nu',\text{loc}}^{R,(1)}(\omega)) \frac{\beta\hbar\omega}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)} \\ &\quad - \frac{3}{4} A'' \int \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi} (-\text{Im}G_{\nu\nu',\text{loc}}^{R,(2)}(\omega)) \frac{\beta\hbar\omega}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)} \\ &\quad + \frac{1}{4} A'' \int \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi} (-\text{Im}G_{\nu\nu',\text{loc}}^{R,(3)}(\omega)) \frac{\beta\hbar\omega}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)}, \\ &\quad - \frac{A''}{2} \tilde{S}_0^2, \quad (3.51) \end{aligned}$$

$$A'' = \frac{16e^2\pi\lambda|\mathcal{T}^2|N_{\text{NM}}^2N_{\text{AFI}}N(0)^2}{\hbar S\sigma}, \quad (3.52)$$

を定義することができる。ここで A'' は界面での相互作用の大きさを表す無次元量である。先行研究 [17] では、スピン波近似を用いてスピンホール磁気抵抗の低温領域での温度依存性が議論されている。図 3.4 にスピン波近似を用いたスピンホール磁気抵抗の温度依存性の解析結果と反強磁性体を用いたスピンホール磁気抵抗の温度依存性の実験結果 [15] を比較した図を乗せた。このスピン波理論では、十分低温における負のスピンホール磁気抵抗をよく再現し、ある温度以上で磁気抵抗の符号が反転していることもよく説明する。しかしながら、スピン波近似は局在スピンの大きさ S_0 が 1 に比べて十分大きいときによく成り立つ近似であり、 $S_0 = 1/2$ もしくは $S_0 = 1$ のときには近似があまり良くないと期待される。さらにスピン波近似は低温領域でのみよく成り立つため、磁気転移温度付近における振る舞いを記述することができない。そこで本研究では、次節で説明する量子モンテカルロ法を用いて、上述の γ_{SMR} をより広い温度領域で数値的に評価する。

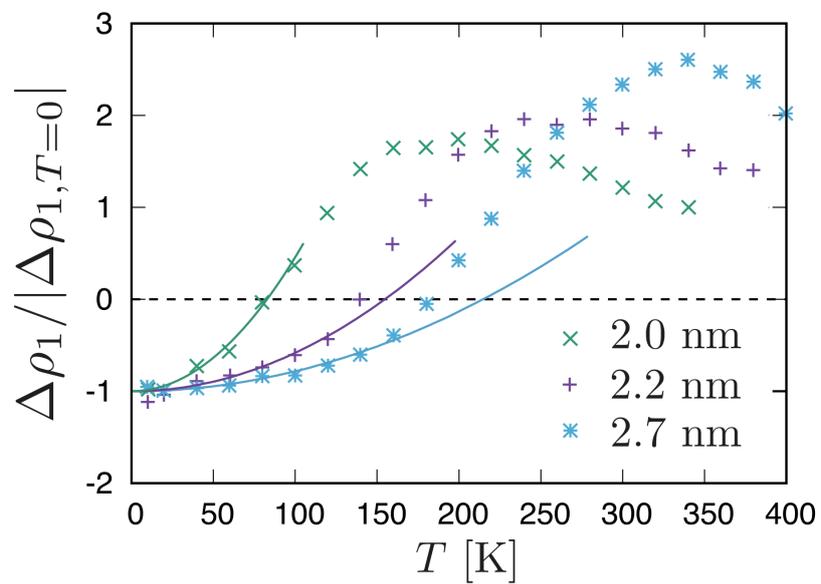


図 3.4: スピン波を用いた解析計算結果実線と Hou らの実験 [15] を比較した図。文献 [17] より引用。

第 4 章

量子モンテカルロ法

本研究では量子モンテカルロ法を用いて局所スピン帯磁率を計算し、スピンホール磁気抵抗効果の温度依存性や膜厚依存性を議論する。本章では、文献 [31, 32] を参考に今回数値計算で用いる量子モンテカルロ法に関して説明する。

4.1 モンテカルロ法

状態 ψ がエネルギー $E(\psi)$ を持つ古典系を考えると、物理量 A の期待値は分配関数を Z として、

$$\langle A \rangle = \sum_{\psi} A(\psi) \exp(-\beta E(\psi)) / Z \quad (4.1)$$

とカノニカルアンサンブルを用いて計算することが出来る。しかし、系が大きくなると取れる状態の数がシステムサイズに対して指数関数的に大きくなってしまい全ての状態の平均を取ることが困難になる。そこで、確率 $\exp(-\beta E(\psi)) / Z$ でランダムに作成される状態 ψ についてサンプリング平均を求めることで、数値的に物理量の期待値を早く求める方法がよく用いられる。このような手法はモンテカルロ法と呼ばれる。

量子系では、ハミルトニアン \mathcal{H} の固有状態 ψ_E が固有値 E を持つとすると、分配関数を Z として、物理量 A の期待値は以下の形で書くことが出来る。

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} [A \exp(-\beta \mathcal{H})] \quad (4.2)$$

次節以降、式 (4.2) のカノニカルアンサンブルをサンプリング平均として計算する量子モンテカルロ法の詳細について説明する。

4.2 経路積分表現とマルコフ連鎖モンテカルロ法

4.2.1 経路積分表示

量子スピン系を考え、ハミルトニアンが局所的なサイト間の相互作用である局所ハミルトニアンの和のみで定義されている状況を考えると、分配関数を以下の形で書くことが出来る。

$$H = \sum_{b=1}^m H_b, \quad (4.3)$$

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \text{Tr}(e^{-\beta \sum_{b=1}^m H_b}). \quad (4.4)$$

局所ハミルトニアンは互いに非可換であるため、直接計算することは非常に困難である。そこで、分配関数を計算するために β を N 個で分割することを考える。 $\Delta\tau = \beta/N$ として鈴木 Trotter 分解により以下の式が成り立つ。

$$e^{-\Delta\tau(A+B)} = e^{-\Delta\tau(A)}e^{-\Delta\tau(B)} + \mathcal{O}((\Delta\tau)^2). \quad (4.5)$$

よって $N \rightarrow \infty$ の時、分配関数は以下の形で書くことができる。

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \text{Tr}(e^{-\beta \sum_{b=1}^m H_b}) \simeq \text{Tr} \prod_{k=1}^N \prod_{b=1}^m e^{-\Delta\tau H_b}. \quad (4.6)$$

ここで、基底として各サイト上の量子スピンの S_i^z の固有状態の直積を用いる。

$$|\psi\rangle = |s_1\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes \cdots |s_m\rangle. \quad (4.7)$$

分配関数のそれぞれの演算子の間に完全系を入れると経路積分表現を得ることが出来る [33]。

$$Z = \sum_{\{\psi(k,b)\}} \prod_{k=1}^N \prod_{b=1}^m \langle \psi(k, b+1) | e^{-\Delta\tau H_b} | \psi(k, b) \rangle, \quad (4.8)$$

$$\psi(N+1, b) \equiv \psi(1, b), \quad (4.9)$$

$$\psi(k, m+1) \equiv \psi(k+1, 1). \quad (4.10)$$

下の2つの式は境界条件を表す。経路積分表現の状態の一つは図4.1の様にワールドラインと呼ばれる表式で表現される。ここで状態 $S \equiv \{\psi(k, b)\}$ として、重み $W(S)$ を

$$W(S) = \prod_{k=1}^N \prod_{b=1}^m \langle \psi(k, b+1) | e^{-\Delta\tau H_b} | \psi(k, b) \rangle, \quad (4.11)$$

と定義すると、カノニカルアンサンブル平均は以下の形で計算出来る：

$$\langle A \rangle = \sum_S A(S) W(S) / Z. \quad (4.12)$$

つまり、状態 S を確率 $W(S)/Z$ でサンプリングすることで、観測量を統計的に計算することが出来る。

4.2.2 マルコフ連鎖モンテカルロ法

式(4.12)に従い、ランダムに作成した状態に対して確率 $W(S)/Z$ でサンプリングする際、平衡状態における状態の出現確率がボルツマン重みに比例するようなマルコフ過程を用いる。一度、平衡状態に達した後にマルコフ過程によって状態を更新し全ての状態をサンプリングしていけば、重み $W(S)$ に比例したサンプリングを効率的に行うことが出来る。

マルコフ過程を用いるためには、どのような初期分布に対してもボルツマン重みに比例する定常分布に収束し、かつ任意の状態から任意の状態へ移ることが可能であることが必要であり、十分条件である詳細釣り合い条件は、状態 Σ から Σ' に遷移する確率を $T(\Sigma|\Sigma')$ 、状態のボルツマン重みを $W(\Sigma)$ とした時に以下の形で書くことが出来る。

$$T(\Sigma|\Sigma')W(\Sigma') = T(\Sigma'|\Sigma)W(\Sigma). \quad (4.13)$$

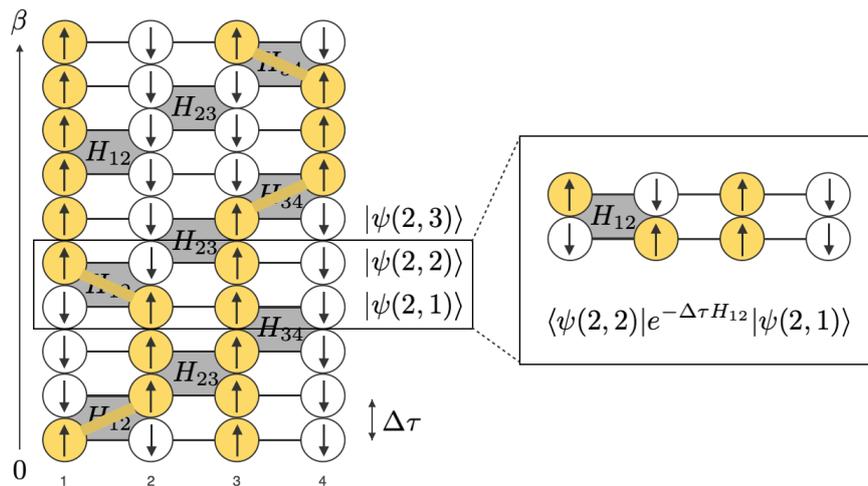


図 4.1: 1 次元 $S=1/2$ の反強磁性ハイゼンベルグ模型の世界ライン。スピンドを黄色でスピンドを白で色分けしている。灰色に塗られている箇所が式 (4.8) でサイト間の局所的なハミルトニアンを計算している箇所に対応している。

4.3 ワールドラインとグラフ変数

式 (4.8) で導入した経路積分表現は、ワールドラインと呼ばれるグラフで描くことが出来る。本節ではワールドラインを説明した上で、効率的にサンプリングを行うためのグラフ変数を導入する。

4.3.1 ワールドライン

例としてスピン $S = 1/2$ 、1 次元 4 サイトの反強磁性ハイゼンベルグ模型を考える：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{2,3} + \mathcal{H}_{3,4}, \tag{4.14}$$

$$\mathcal{H}_{l,l+1} = \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+1} = \left[\frac{1}{2} (S_l^+ S_{l+1}^- + S_l^- S_{l+1}^+) + S_l^z S_{l+1}^z \right]. \tag{4.15}$$

各サイトの S_z の固有値の直積を基底とし、式 (4.8) に従い、分解数を 3 にした場合の世界ラインのグラフが図 4.1 である。

まず図 4.2 のような経路の場合は赤い枠内で 4 番目のスピン状態が保存していないため、重みが 0 になる。逆に重みが 0 でないダイアグラムでは、スピンドアップの状態を線でつなげていったときに、途中で切れることがない。このような線をワールドラインという。よって、反強磁性ハイゼンベルグ模型のような全スピンドが保存する系では、図 4.1 のようなワールドラインの配置のみをサンプリングすれば良い。

マルコフ過程により状態を更新し、サンプリングする際に重みが 0 にならないような状態を効率よくサンプリングするためには、図 4.3 のようなローカルな状態更新方法が長らく用いられてきた。しかし相転移付近において、サンプリングにおける相関時間が長くなる問題があった。この問題を解決するために新たにクラスター更新の方法を導入する。

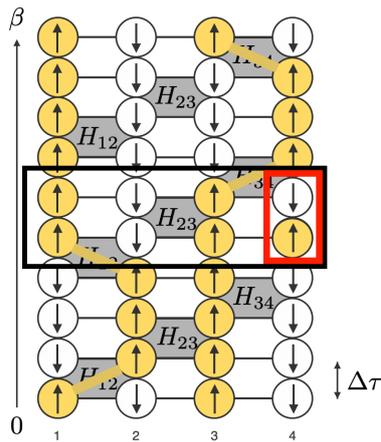


図 4.2: 重みが 0 になるようなワールドライン。赤い枠内のスピンの配置が保存していないため、重みがゼロになる。

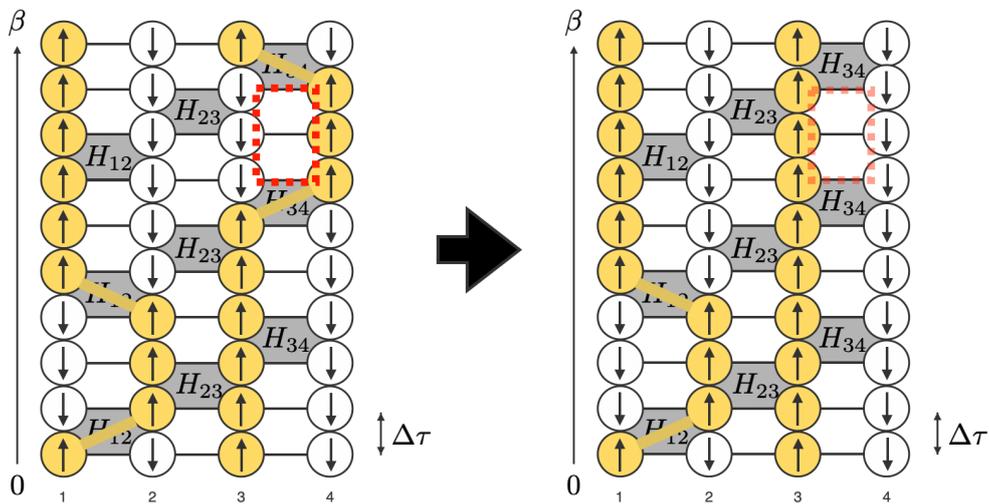


図 4.3: 局所的なループによりスピン配置を更新する様子。赤い四角の範囲のスピン配置を全て反転させることでスピン配置を更新する。

4.3.2 グラフ変数

クラスター更新の説明を行う前に、グラフ変数 (Fortuin-Kasteleyn 表現) についてまず説明する。 $\Delta\tau \ll 1$ の時、確率重みは、

$$e^{-\Delta\tau H_b} \simeq 1 - (\Delta\tau)H_b = \sum_{g_b=0,1} (-\Delta\tau)H_b^{g_b}, \tag{4.16}$$

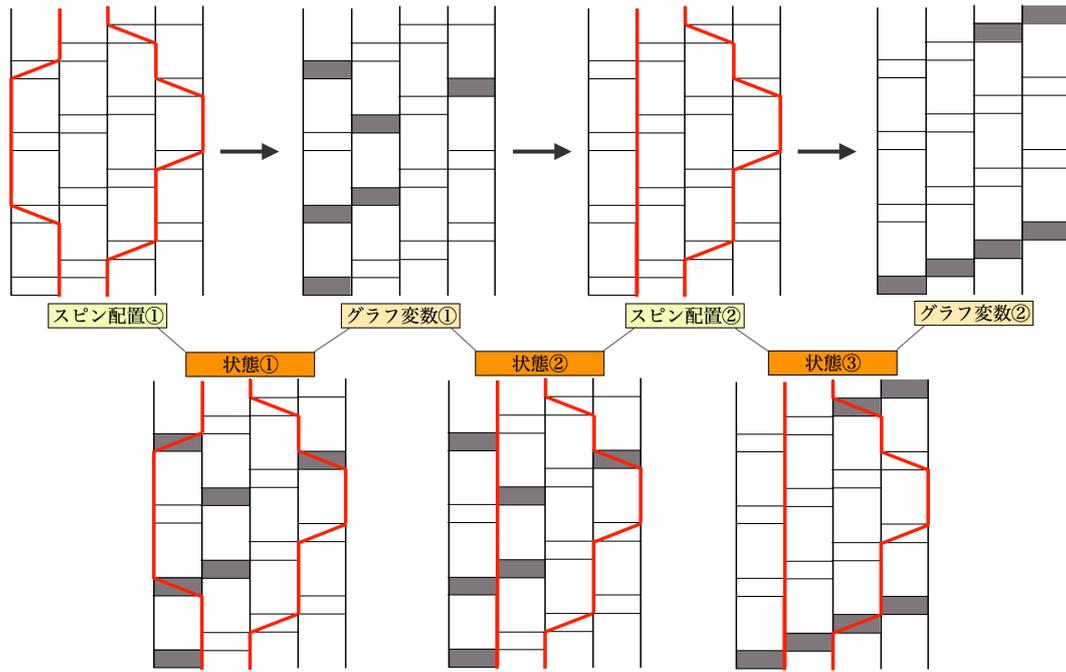


図 4.4: グラフ変数を用いたサンプリング。赤い線がスピン↑の箇所を示しており、灰色で塗られている箇所がグラフ変数 $g = 1$ の箇所に対応している。

と表現される。ここで g_b は 0 か 1 を取るグラフ変数である。グラフ変数を用いて、分配関数は以下のように書き直すことができる:

$$\begin{aligned}
 Z &\equiv \sum_{\{\psi(k,b)\}} \prod_{k=1}^N \prod_{b=1}^m \langle \psi(k, b+1) | e^{-\Delta\tau H_b} | \psi(k, b) \rangle \\
 &= \sum_{\{\psi(k,b)\}} \sum_G \prod_{k=1}^N \prod_{b=1}^m \langle \psi(k, b+1) | (-\Delta\tau H_b)^{g_b} | \psi(k, b) \rangle. \tag{4.17}
 \end{aligned}$$

ここまでスピン配置でサンプリングを行うことを考えてきたが、以降スピン配置とグラフ変数をそれぞれ更新していき、図 4.4 の様にスピン配置とグラフ変数の 2 つの情報を合わせてサンプリングを行う。グラフ変数を用いることで、サンプリング空間は大きくなるが、次節で説明するように非局所的な状態の更新 (クラスター更新) が出来るようになる。

式 (4.17) で $g_b = 1$ と指定された時の具体的な成分を考える。1 次元反強磁性ハイゼンベルグ模型において、 i 番目のサイトと j 番目のサイトの相互作用項を考える。式 (4.15) を元に、基底を (i, j) のスピン空間における基底を $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ の順番で取るとハミルトニアンは以下の形で書ける。

$$\mathcal{H}_{ij} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.18}$$

今、奇数番目のサイトに z 軸を中心に 180 度回転させるようなユニタリー変換を行い、定数を引くことで図 4.5 の g_h で定義したデルタ演算子を用いて記述することが出来る。

$$\mathcal{H}_{ij} = -\frac{1}{2} \Delta_{ij} g_h. \tag{4.19}$$

g_d	g_h	g_b	g_{ab}
			
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

図 4.5: デルタ演算子を用いたグラフ表現と行列要素。破線はお互いにスピンの異なる状態を表しており、実線はスピンの同じ状態という制限を表している。

このデルタ演算子はスピン状態の制限を表すことが出来る。図 4.5 にスピン配置に制限を与えるデルタ演算子をまとめた。ハミルトニアンがデルタ演算子で記述出来る場合は、グラフ変数を元にスピン配置が制限されるため、スピン配置とグラフ変数を元に次のスピン配置を効率的に更新することが出来る。

4.4 ループによる状態更新

本節ではグラフ変数を用いることで、相関長程度の大きなサイズのスピン配置を 1 回で更新することが出来るループアルゴリズム [34] と向き付きループアルゴリズム [35, 36, 37] に関して紹介する。

4.4.1 ループアルゴリズム

グラフ変数を元に、図 4.5 の表に与えられる重みによってグラフ表現を配置することで、重みが 0 でないワールドラインの配置のみを効率よく記述することができる。はじめのワールドラインの配置からグラフ変数を決め、グラフ変数から許容されるループを構成し、ループ上のスピン状態を $1/2$ の確率で反転させることで、効率よい状態更新が実行できる。これをループ更新という。またこのような状態更新のアルゴリズムを、ループアルゴリズムという。ループアルゴリズムを用いることで、相関長程度の範囲のスピン配置を 1 回の更新で変更することが出来るため、効率的なサンプリングを行うことが出来る。一方、一様磁場が加わった反強磁性ハイゼンベルグ模型などのように、ハミルトニアンがデルタ演算子で記述できない場合は、ループアルゴリズムをこのままの形で適用することはできない。

4.4.2 向き付きループアルゴリズム

ループアルゴリズムでの問題点を解決するために開発されたのが、ワームによるループ更新である。図 4.7 に、ワームによってスピン配置が更新されていく様子を示す。ワームアルゴリズムでは、スピンのフリップはグラフ変数 $g_b = 1$ の箇所における散乱確率によって支配されているので、磁場のようなループアルゴリズムでは取り扱うことが出来なかつた重みを反映させることが出来る。実際に一様磁場中の反強磁性ハイゼンベルグ模型に対して、向き付きループアルゴリズムを用いた計算が行われている [37, 38]。

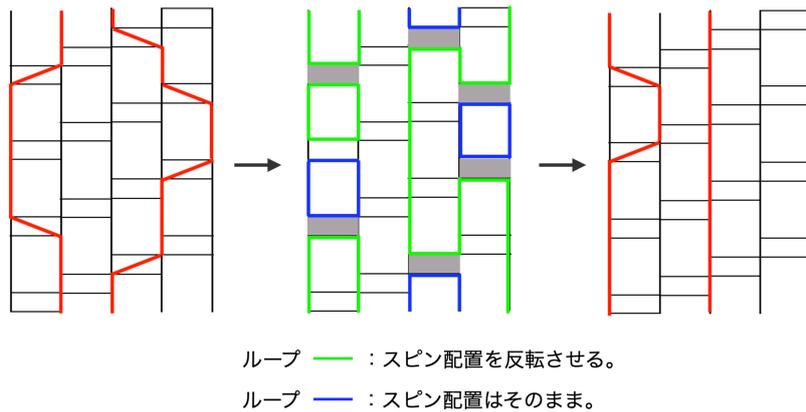


図 4.6: ループアルゴリズムによるループ更新。

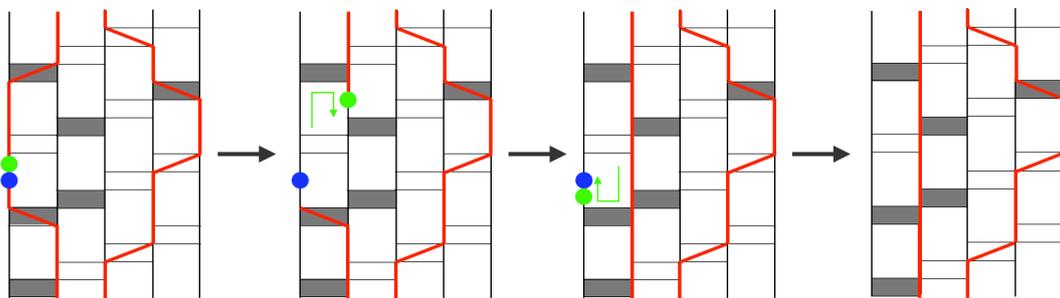


図 4.7: ワームによる更新。スピン配置を反転させるワームのヘッドとテールを作成し、グラフ変数 $g = 1$ の箇所まで直進し、重みを考慮した散乱を行いワームのヘッドを進め、ワームのヘッドとテールが再度あった時に消滅させる。

4.4.3 諏訪・藤堂法

重みに比例したワームの散乱確率を決めるためには、マルコフ連鎖の構成方法を決める必要がある。これまで、詳細釣り合い条件を満たす熱浴法やメトロポリス法などの更新アルゴリズムが広く用いられてきた。しかし、詳細釣り合い条件は必要条件ではなく、必ずしも満たされている必要はない。ここでは詳細釣り合い条件を破ることである条件下で棄却率を 0 にすることが出来る諏訪・藤堂法 [39] を紹介する。

今取ることの出来る状態数を n とすると、重みを w_n 、状態 i から状態 j への遷移確率 $p_{i \rightarrow j}$ とし、状態 i から状態 j への確率流に相当する量として $v_{i \rightarrow j} \equiv w_i p_{i \rightarrow j}$ を定義しておく。このとき、満たすべき確率の保存則とつりあい条件は以下ようになる:

$$w_i = \sum_{j=1}^n v_{i \rightarrow j} \quad \forall_i, \tag{4.20}$$

$$w_j = \sum_{i=1}^n v_{i \rightarrow j} \quad \forall_j. \tag{4.21}$$

平均の棄却率は $\sum_i v_{i \rightarrow i} / \sum_i w_i$ で与えられるので、条件式 (4.20), (4.21) を満たした上でこの平均棄却

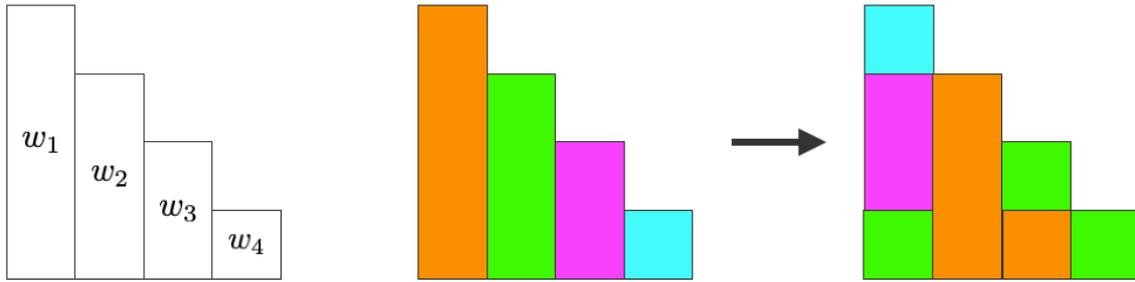


図 4.8: 釣り合いの条件を満たしながら棄却率を 0 にする問題と同等の幾何学的埋め立て問題。

諏訪・藤堂アルゴリズム

- (i) 遷移状態候補の中から最大の重みを選ぶ。その重みを w_1 とする。
- (ii) 最大重み w_1 を次の箱 ($i = 2$) に埋め、あまりが生じた場合にはその次の箱 ($i = 3$) に埋め、余りが無くなるまで埋めていく。
- (iii) 埋め立てられた箱 ($i = 2$) の重み w_2 を、ステップ(ii)の続きで空いている箱に埋め、余りが無くなるまで埋めていく。
- (iv) 残りの重み w_3, w_4, \dots, w_n についても(iii)と同様に埋めていき、 $i \geq 2$ の全ての箱が埋め立てられたら、その後は最初の箱 ($i = 1$) に埋める。

図 4.9: 諏訪・藤堂アルゴリズム

率を最小化するような $\{p_{i \rightarrow j}\}$ を見つけることを考える。図 4.8 の左のパネルのようにボルツマン確率重み w_i が与えられたとする。これを図 4.8 の中央のパネルのように色分けしておく。このとき条件式 (4.20), (4.21) で棄却率を 0 にする方法は、色分けした面積を高さ $p_{i \rightarrow j}$ で分割して組み替え、はじめの色を持つ長方形を他の場所にすべて移動させる方法と同じである (図 4.8 の右のパネル)。

実際にこの問題を解く方法は諏訪・藤堂によって与えられた [39]。アルゴリズムの詳細を図 4.9 に示す。このアルゴリズムに基づくと、 $v_{i \rightarrow j}$ は以下ようになる:

$$v_{i \rightarrow j} = \max(0, \min(\Delta_{ij}, w_i + w_j - \Delta_{ij}, w_i, w_j)), \quad (4.22)$$

$$\Delta_{ij} \equiv S_i - S_j + w_1 \quad 1 \leq i, j \leq n, \quad (4.23)$$

$$S_i \equiv \sum_{k=1}^i w_k \quad 1 \leq i \leq n, \quad (4.24)$$

$$S_0 \equiv S_n. \quad (4.25)$$

この方法で遷移確率を決めると、 $w_1 \leq \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n w_k$ の時、平均棄却率が 0 になることが分かる。

熱浴法やメトロポリス法での棄却率と諏訪・藤堂のアルゴリズムにおける棄却率を比較した結果を図 4.10 に示す。幾何学的埋め立てにおいて棄却率は自分自身への割当量で表され、熱浴法とメトロポリス法

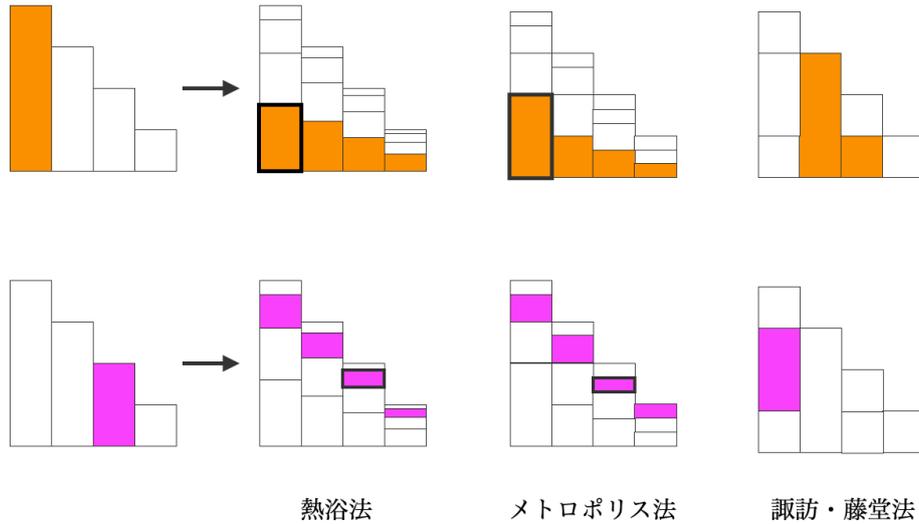


図 4.10: 諏訪・藤堂法と他手法における棄却率の違い

を用いた際には、黒い太線で囲まれた重みの分の棄却率があることが分かる。一方、諏訪・藤堂のアルゴリズムでは、棄却率が0となっていることがわかる。

4.5 プログラムパッケージ DSQSS

本研究では2次元、もしくは、有限の膜厚を持つ擬2次元反強磁性量子ハイゼンベルグ模型に、ネールベクトルを固定するために小さな磁化の異方性や交代磁場を加えたハミルトニアンを考え、この模型における温度グリーン関数を量子モンテカルロ法によって計算する。本研究では、公開されているプログラムパッケージ DSQSS [40] を用いた。DSQSS は量子多体模型を量子モンテカルロ法を用いて計算を行うプログラムであり、向き付きループアルゴリズムが採用されている。また、並列計算の実行やハミルトニアン、格子ファイル、波数ファイルなどを入力することが出来る。入力ファイルの作成および出力ファイルからのデータ抽出を行うことで、本研究のモンテカルロデータを収集した。なお、交代磁場を反映したハミルトニアンや $S_z S_z$ 相関関数の出力などコードが対応していない部分、および、一般の相関関数を出力すると膨大な出力データが生成されてしまう問題を解決するために、DSQSS の開発者と議論を進めながら、適宜自分でコードを書き換えて計算を行った。プログラムを書き換えた箇所に関しては厳密対角化との比較を行い、正しくコーディングが行われていることを確認した。

今回計算で用いるハミルトニアンは、

$$\begin{aligned}
 H_{\text{AFI}} = J \sum_{\langle l,m \rangle} & \left[\frac{1}{2} \left(S_{A,l}^+ S_{B,m}^- + S_{A,l}^- S_{B,m}^+ \right) + S_{A,l}^z S_{B,m}^z \right] \\
 & + D \sum_l \left[(S_{A,l}^z)^2 + (S_{B,l}^z)^2 \right] + h \sum_l \left[S_{A,l}^z - S_{B,l}^z \right], \quad (4.26)
 \end{aligned}$$

で与えられる。スピンは立方格子に置かれており、A 副格子と B 副格子に分けて考える。 $\mathbf{S}_l = (S_{\nu,l}^x, S_{\nu,l}^y, S_{\nu,l}^z)$ は大きさ S_0 の副格子 $\nu (=A,B)$ におかれたスピン角運動量演算子、 $S_{\nu,l}^{\pm} = S_{\nu,l}^x \pm i S_{\nu,l}^y$ はスピン昇降演算子、 $\langle l,m \rangle$ を最近接格子の組を表す。 J は交換相互作用の大きさである。小さな磁化の異方性および交代磁場を考え、それぞれの大きさ D, h で制御する。

計算を行う際の典型的なモンテカルロステップ数は 10000 であり、100 個程度の異なる乱数での並列計算を元に出力された結果を用いて計算を行った。1 回のモンテカルロ計算で得られるエラーバーに関して、スタaggered磁化の情報はエラーバーをつけた状態で評価する。しかし、後述するように得られた温度グリーン関数は離散フーリエ変換を行い松原周波数のグリーン関数に直した後、次の章で説明するパデ近似による補完を用いる。この場合は、エラーバーを評価するのが難しくなるため、同じ模型に対して異なる初期乱数の種を 10 個用意し、そこから得られた結果を用いて磁気抵抗の誤差を評価する。また、パデ近似による補完では、モンテカルロ計算の誤差のために、まれに有理関数による補完がうまく行かない場合がでてくる。得られた結果が松原振動数について減少関数になっているかどうかなどの基準を用いて、そのようなデータは取り除いている。

第5章

量子モンテカルロ法によるスピンホール磁気抵抗の評価

スピンホール磁気抵抗効果を計算するためには、量子モンテカルロ法の数値計算で得られる離散的な温度グリーン関数の情報から、周波数表示のグリーン関数を解析接続によって得る必要がある。しかし、数値的解析接続は一般に僅かなエラーによって結果が敏感に反応するために実行が難しく、特にモンテカルロサンプリングによって生ずる誤差は重大な影響を与えるため、従来手法では事実上実行が不可能である。本章では、パデ近似による解析接続の数値不安定性を確認した後、スピンホール磁気抵抗効果に現れるグリーン関数の振動数積分の値を直接計算する手法を提案する。この手法は本研究で初めて考案されたものである。

5.1 パデ近似

第3章の最後で述べたように、スピンホール磁気抵抗効果の大きさは、無次元化したスピンコンダクタンスの磁化方位依存性によって記述される。式を再掲する:

$$\begin{aligned} \gamma_{\text{SMR}} &= A'' \sum_{a=1}^3 (g_a^2(\pi/2) - g_a^2(0)) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi} \left[(-\text{Im} G_{\text{loc}}^{R,(a)}(\omega)) \frac{\beta\hbar\omega}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)} \right], \\ G_{\text{loc}}^{R,(a)}(\omega) &= \sum_{\nu} G_{\nu\nu',\text{loc}}^{R,(a)}(\omega). \end{aligned} \quad (5.1)$$

反強磁性絶縁体のスピン帯磁率 $G_{\text{loc}}^{R,(a)}(\omega)$ のみが未知の関数となっており、これを量子モンテカルロ法によって計算したい。

まず、一般的な数値的解析接続の手法であるパデ近似について説明する。解析的な関数 $F(\omega)$ の $Z_p = i\omega_p$ での値 $u_p = F(i\omega_p)$ が $p = 1, 2, \dots, N$ について分かっているとき、この値を再現するような有理関数を考える。これは連分数によって、以下のように求められる:

$$G_N(\omega) = \frac{P_N(\omega)}{Q_N(\omega)} = \frac{a_1}{1 + \frac{a_2(\omega - z_1)}{1 + \frac{a_3(\omega - z_2)}{1 + \frac{a_4(\omega - z_3)}{1 + \dots}}}}. \quad (5.2)$$

係数 a_1, a_2, \dots, a_N はティールの逆差法と呼ばれる方法を用いて決定する [41]。

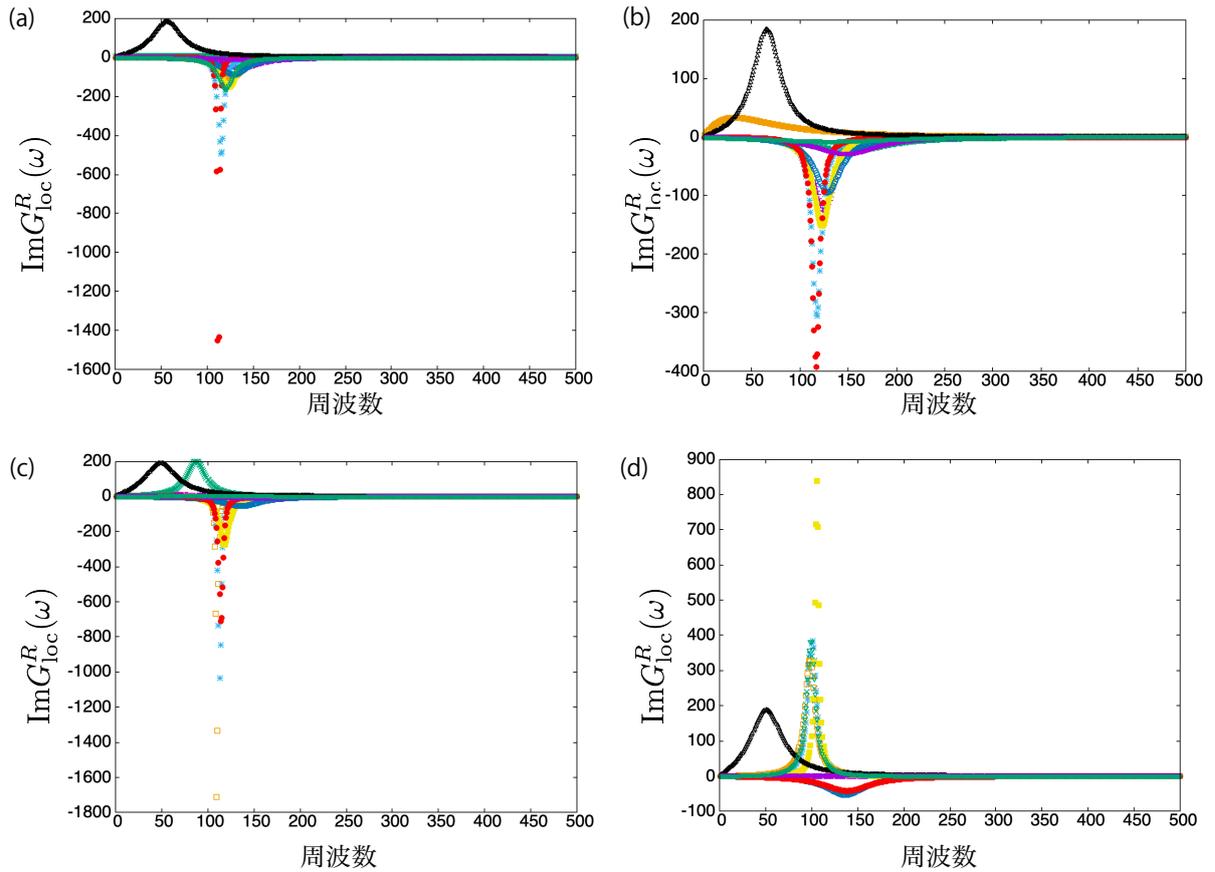


図 5.1: 量子モンテカルロ法と数値的解析接続によって得られた局所スピン帯磁率の虚部の振動数依存性。(a) データ数 31 個で解析接続した結果、(b) データ数 63 個で解析接続した結果、(c) データ数 64 個で解析接続した結果、(d) データ数 127 個で解析接続した結果。異なる色のプロットは初期乱数の種が違う計算を表す。

テスト計算のために、交代磁場が加わった $S = 1/2$ の 2 次元量子ハイゼンベルク模型を考える:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle l,m \rangle} \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_m + \sum_{i \in A} h S_i^z - \sum_{j \in B} h S_j^z. \quad (5.3)$$

$h = 0.01J$, $k_B T/J = 2.5$ として量子モンテカルロ法による数値計算を行い、松原振動数上でのスピン帯磁率の値を求めた。格子のサイズは $16 \times 16 \times 6$ 、モンテカルロステップ数は 10000 回とした。このとき松原振動数上で得られた温度グリーン関数は、相互相関は考慮しないとすると 10^{-7} 程度の相対誤差を有していた。この数値計算結果から、パデ近似を行い解析接続を行った。初期乱数の種が異なる 10 個の数値計算結果から得た温度グリーン関数のデータを元に、パデ近似に使用する松原振動数の数を 4 つ変え (松原振動数の数 = 31, 63, 64, 127)、得られた局所スピン帯磁率の遅延成分 $G_{\text{loc}}^{R,+}(\omega)$ の虚部を図 5.1 に示す。

パデ近似に用いるデータの数や初期乱数の種の違いに依存し符号含め関数系が大きく変化していることが確認できる。そのため、数値的な解析接続によって得られた結果を元に積分をおこなってもコンダクタンスの誤差は非常に大きくなり、事実上数値計算は不可能となる。

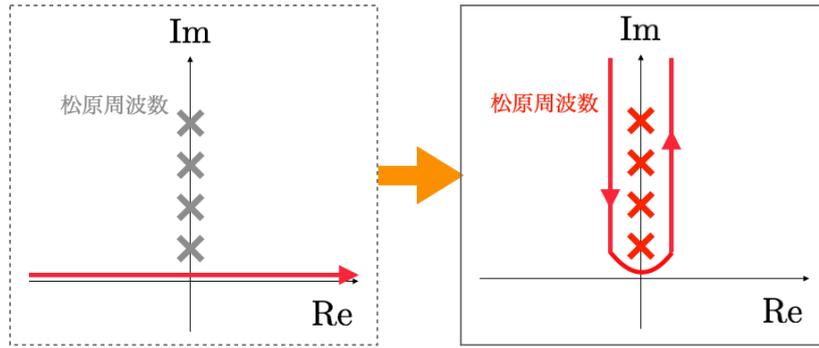


図 5.2: 積分経路の変更

5.2 スピンホール磁気抵抗効果の新しい計算方法

本節では、松原周波数上のグリーン関数とその一階微分の情報のみから、スピンホール磁気抵抗を求める新しい方法を述べる。

スピンホール磁気抵抗効果の大きさ γ_{SMR} に含まれる無次元の積分量

$$I_a = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi} \left[(-\text{Im}G_{\text{loc}}^{R,(a)}(\omega)) \frac{\beta\hbar\omega}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)} \right], \quad (a = 1, 2, 3) \quad (5.4)$$

を考える。関数 $\beta\hbar\omega/\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)$ は ω の虚軸上にのみ特異点を持つ。さらに $\omega = 0$ で $G_{\text{loc}}^{R,(a)}(\omega) = 0$ となることを証明できるので、 $\omega = 0$ で被積分関数は極を持たない。よって積分経路を図 5.2 のように変更することができ、積分 I_a は被積分関数の松原振動数上での留数の和となる。

ボゾンの松原周波数を $\omega_n = 2n\pi/\hbar\beta$ (n : 自然数) 書き表すと、被積分関数は $\omega = i\omega_n$ ($n \neq 0$) で 2 位の極を持つ。 $f(\omega) = G_{\text{loc}}^{R,(a)}(\omega)$ すると、被積分関数は

$$f(\omega) \frac{\beta\hbar\omega}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)} = \frac{\beta\hbar\omega f(\omega) e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2}, \quad (5.5)$$

と書き直せる。ここで $\omega = i\omega_n + \epsilon$ においてローラン展開する。

$$e^{\beta\hbar(i\omega_n + \epsilon)} = 1 + \beta\hbar\epsilon + \frac{(\beta\hbar\epsilon)^2}{2} + \dots \quad (5.6)$$

2 位の極の計算に必要な次数までそれぞれ展開する。

$$\begin{aligned} \frac{\beta\hbar\omega f(\omega) e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} &\simeq \frac{\beta\hbar(i\omega_n + \epsilon)[f(i\omega_n) + \epsilon f'(i\omega_n)](1 + \beta\hbar\epsilon)}{(\beta\hbar\epsilon + (\beta\hbar\epsilon)^2/2)^2}, \\ &\simeq \frac{(i\omega_n + \epsilon)}{\beta\hbar\epsilon^2} [f(i\omega_n) + \epsilon f'(i\omega_n)] (1 - \hbar^2\beta^2\epsilon^2) \\ &= \frac{i\omega_n f(i\omega_n)}{\beta\hbar} \frac{1}{\epsilon^2} + \frac{f(i\omega_n) + i\omega_n f'(i\omega_n)}{\beta\hbar} \frac{1}{\epsilon} + \mathcal{O}(\epsilon^0). \end{aligned} \quad (5.7)$$

途中で $1/(1 + \beta\hbar\epsilon/2)^2 \simeq 1 - \beta\hbar\epsilon$ を用いた。よって 2 位の極の留数を計算することが出来る:

$$\text{Res}_{\omega=i\omega_n} \frac{\beta\hbar\omega f(\omega) e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} = \frac{f(i\omega_n) + i\omega_n f'(i\omega_n)}{\beta\hbar}. \quad (5.8)$$

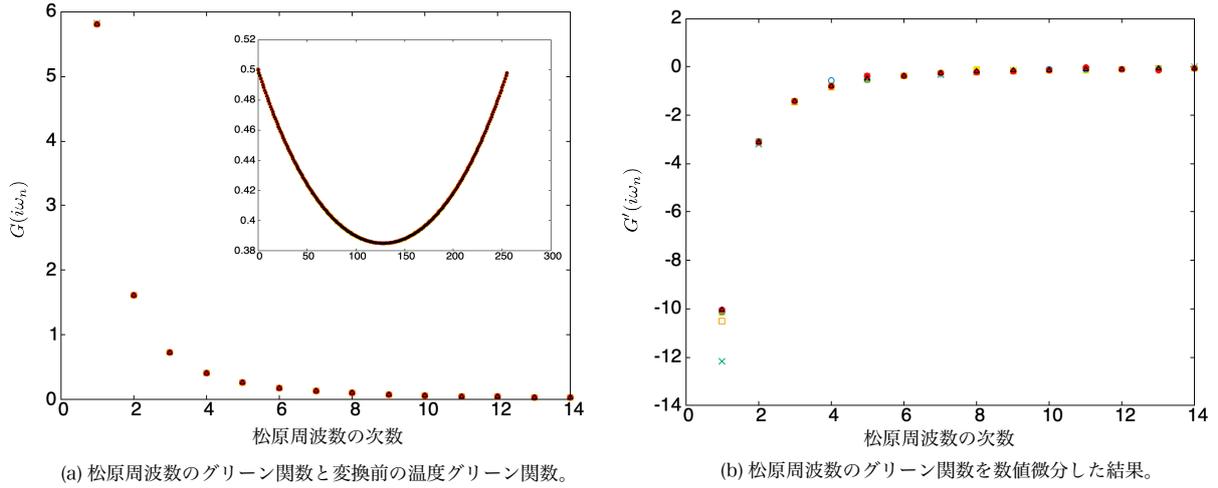


図 5.3: (a) 局所スピン帯磁率 $G^{R,+}(i\omega_n)$ の松原振動数依存性。挿入図は虚時間依存性 $G^{R,+}(\tau)$ を表す。(b) その微分 $G'^{R,+}(i\omega_n)$ の数値計算結果 (パデ近似による補完を利用)。

これを用いると、スピンコンダクタンスは以下のように計算できる:

$$\begin{aligned} \gamma_{\text{SMR}} &= -\sum_{a=1}^3 A''(g_a^2(\pi/2) - g_a^2(0)) \text{Im} \left[i \text{Res}_{\omega=i\omega_n} \left\{ (G_{\text{loc}}^{R,(a)}(\omega)) \frac{\beta\hbar\omega}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)} \right\} \right] + \gamma_{\text{SMR},(0)}, \\ &= \sum_{a=1}^3 A''(g_a^2(\pi/2) - g_a^2(0)) \left[\frac{-G_{\text{loc}}^{R,(a)}(i\omega_n) - i\omega_n G_{\text{loc}}'^{R,(a)}(i\omega_n)}{\beta\hbar} \right] + \gamma_{\text{SMR},(0)}, \\ &= \gamma_{\text{SMR},zz} + \gamma_{\text{SMR},+-} + \gamma_{\text{SMR},-+} + \gamma_{\text{SMR},(0)}, \end{aligned} \quad (5.9)$$

$$\gamma_{\text{SMR},zz} = A'' \left[\frac{-G_{\text{loc}}^{R,zz}(i\omega_n) - i\omega_n G_{\text{loc}}'^{R,zz}(i\omega_n)}{\beta\hbar} \right], \quad (5.10)$$

$$\gamma_{\text{SMR},+-} = -\frac{3A''}{4} \left[\frac{-G_{\text{loc}}^{R,+}(i\omega_n) - i\omega_n G_{\text{loc}}'^{R,+}(i\omega_n)}{\beta\hbar} \right], \quad (5.11)$$

$$\gamma_{\text{SMR},-+} = \frac{A''}{4} \left[\frac{-G_{\text{loc}}^{R,-}(i\omega_n) - i\omega_n G_{\text{loc}}'^{R,-}(i\omega_n)}{\beta\hbar} \right], \quad (5.12)$$

$$\gamma_{\text{SMR},(0)} = -\frac{A''}{2} \tilde{S}_0^2. \quad (5.13)$$

最後の等式では、 $G_{\text{loc}}^{R,(a)}(i\omega_n)$ および $i\omega_n G_{\text{loc}}'^{R,(a)}$ がともに実数となることを用いた。式 (5.9) には、松原周波数に関するスピン帯磁率の微分を求める必要がある。これは松原周波数上で得られた温度グリーン関数のフーリエ変換の値を、パデ近似を用いて虚軸上で補完することで数値微分することができる。ここでのパデ近似は単に虚軸上で補完に用いているので、解析接続にパデ近似を用いる場合に比べて数値計算の精度は大幅に改善される。

例として、2次元、 $S = 1/2$ の反強磁性ハイゼンベルグ模型 (5.3) において、24 サイト \times 24 サイトで $h = 0.01J$ の交代磁場を加えた模型の $k_B T/J = 1$ における量子モンテカルロ計算を考える。松原周波数上でのスピン帯磁率と、パデ近似を用いて数値微分を行った結果を図 5.3 に示す。ここでは初期乱数が異なる 7 個のモンテカルロのデータセットを用いた結果を同時に掲載している。このデータによって評価した SMR の成分は、 $\gamma_{\text{SMR},+-} = -6.095 \pm 0.201$ と相対誤差を 4% 以下に抑えることが出来た。

第 6 章

計算結果

本章では、量子モンテカルロ法による計算結果をまとめる。計算に用いるハミルトニアンを再掲する：

$$H_{\text{AFI}} = J \sum_{\langle l,m \rangle} \left[\frac{1}{2} (S_{A,l}^+ S_{B,m}^- + S_{A,l}^- S_{B,m}^+) + S_{A,l}^z S_{B,m}^z \right] + D \sum_l \left[(S_{A,l}^z)^2 + (S_{B,l}^z)^2 \right] + h \sum_l \left[S_{A,l}^z - S_{B,l}^z \right], \quad (6.1)$$

乱れない系に対しては、交換相互作用は $J = 1$ として計算を行った。乱れの効果を議論する場合は、[42] を参考にして、交換エネルギー J が式 (6.2) の分布を持つとして計算を行った。

$$P(J) = J^{-1+\delta^{-1}} \delta^{-1} \Theta(J) \Theta(1-J) \quad (6.2)$$

$\delta = 3/2$ の場合の分布 $P(J)$ のグラフを図 6.1 に示す。

6.1 $S = 1/2$ の 2 次元量子ハイゼンベルグ模型: 格子サイズ依存性

$S = 1/2$ の 2 次元反強磁性ハイゼンベルグ模型にスタッガードな磁場 $h = 0.01J$ を加えた場合の γ_{SMR} の計算結果を図 6.2 に示す。格子のサイズはそれぞれ 24×24 , 32×32 , 48×48 , 64×64 である。式 (5.9) により $\gamma_{\text{SMR},(0)}$ は zz 成分の寄与なので、 $\gamma_{\text{SMR},zz} = \gamma_{\text{SMR},zz} + \gamma_{\text{SMR},(0)}$ と再度置き直すと、SMR は 3 つの成分の和で書き表される：

$$\gamma_{\text{SMR}} = \gamma_{\text{SMR},zz} + \gamma_{\text{SMR},+-} + \gamma_{\text{SMR},-+}. \quad (6.3)$$

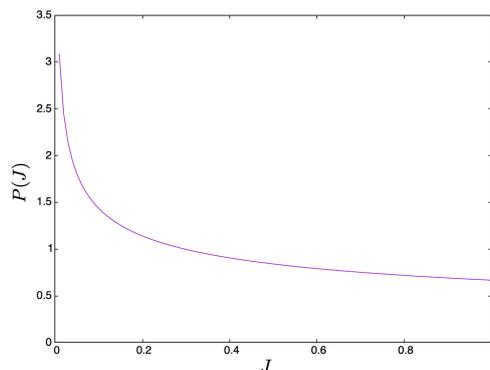


図 6.1: $\delta = 3/2$ の乱れの効果の分布関数。

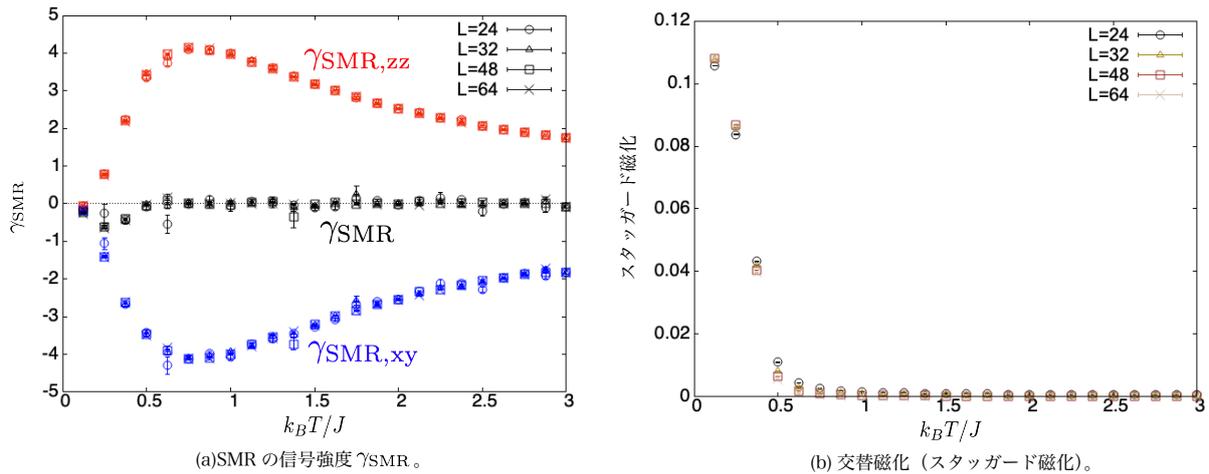


図 6.2: $S = 1/2$ 、2 次元、格子サイズ $l \times l$, $h = 0.01J$ における量子モンテカルロ計算の結果 ($l = 24, 32, 48, 64$)。 (a) SMR の信号強度 γ_{SMR} 。 (b) 交替磁化 (スタaggerド磁化)。横軸は温度を表す。

$\gamma_{\text{SMR},zz}$ を赤色で、 $\gamma_{\text{SMR},xy} \equiv \gamma_{\text{SMR},+-} + \gamma_{\text{SMR},-+}$ を青色でそれぞれプロットした。またすべての寄与を足し合わせた γ_{SMR} を黒色でプロットした。サイズによる違いは記号を変えることで区別した。図 6.2 (b) に示すように、 $k_B T / J \simeq 0.5$ より低温側で反強磁性的にスピン磁化が生じる。ただし、マーミン・ワグナーの定理により 2 次元量子スピン系では相関長は絶対零度に至るまで発散しないため、有限温度では長距離秩序は生じておらず、単にスピン相関長がシステムサイズ程度に成長したことを意味しており、得られている交替磁化も小さい。 $S = 1/2$ のスピン系では、高温側で SMR のシグナルがほとんど生じていないことが最大の特徴である。この SMR の消失は、3 種の局所スピン帯磁率からの寄与が打ち消し合うことによって生じる。一方、低温領域では弱いながら負の SMR のシグナルが生じる。これらの主要な結果は、システムサイズを $24 \times 24, 32 \times 32, 48 \times 48, 64 \times 64$ と変化させてもほとんど変化しないことがわかる。

6.2 $S = 1/2$ の有限膜厚の量子ハイゼンベルグ模型: 膜厚依存性

$S = 1/2$ の有限膜厚の量子ハイゼンベルグ模型にスタaggerドな磁場を $h = 0.01J$ かけた場合の計算結果を図 6.3 に示す。面内の格子のサイズは 16×16 サイトに固定し、膜厚を 2, 4, 6 層と変化させると、図 6.3 (b) に示すように交替磁化は $k_B T \sim 1$ 付近で急速に立ち上がるようになる。膜厚によらずスタaggerド磁化が生じていない高温領域では、前節と同様に SMR が生じない。一方、低温領域ではスタaggerド磁化の強さに依存して SMR が負符号で出ることが確認できる。

6.3 $S = 1$ の 2 次元量子ハイゼンベルグ模型: 温度依存性

$S = 1$ の 2 次元反強磁性ハイゼンベルグ模型に対して、交替磁化を生じさせるために異方性パラメータを $D = -0.1J$ ($h = 0$) とした場合の計算結果を図 6.4 に示す。交替磁化は $k_B T = 1.5J$ 付近で急速に立ち上がる。この温度より高温領域では、 $S = 1/2$ の場合とは異なり、転移点より高温で正の SMR が生じており、転移点付近で SMR がピークを持っていることが確認できる。一方、スタaggerド磁化が出ている転移点より低温領域では、負の SMR が生じている。低温領域の振る舞いは $S = 1/2$ のときと異なり、

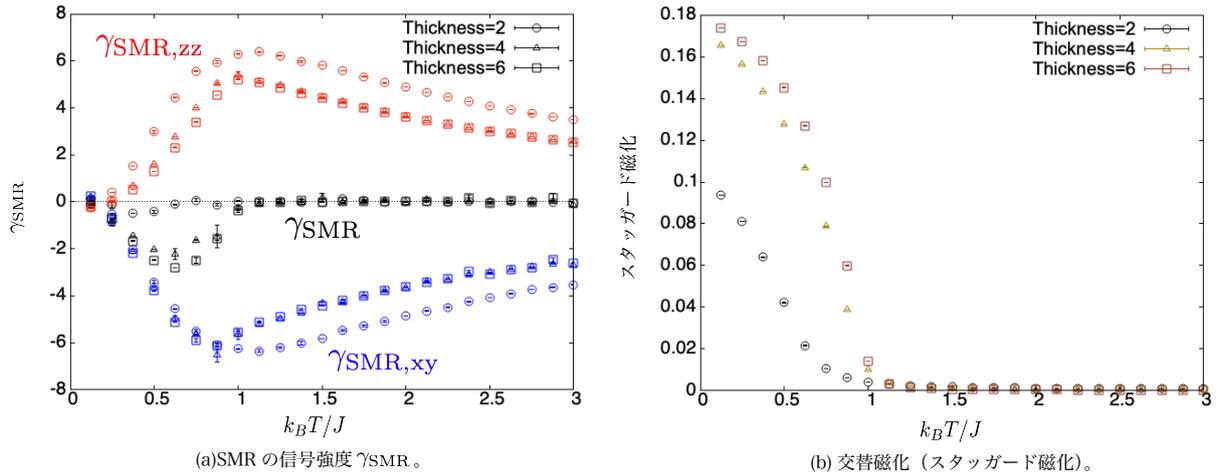


図 6.3: $S = 1/2$, 3次元、格子サイズ $16 \times 16 \times m (m = 2, 4, 6)$, $h = 0.01J$ における量子モンテカルロ計算の結果。(a) SMR の信号強度 γ_{SMR} 。(b) 交替磁化 (スタaggerド磁化)。横軸は温度を表す。

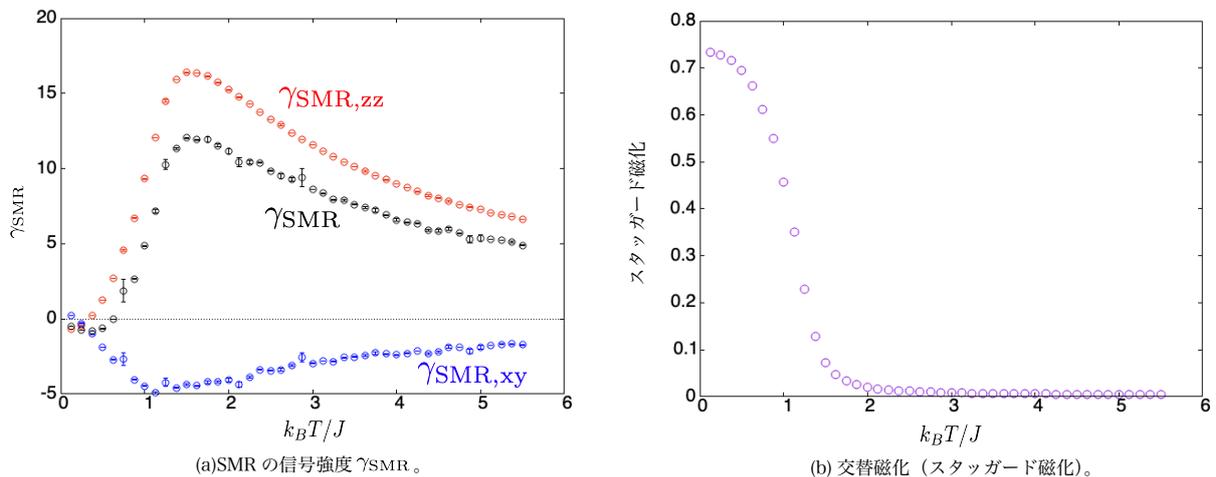


図 6.4: $S = 1$ の 2次元量子ハイゼンベルクに対する計算結果。格子サイズは 16×16 , 異方性パラメータは $D = -0.1J$, 交替磁場は加えていない ($h = 0$)。 (a) SMR の信号強度 γ_{SMR} 。(b) 交替磁化 (スタaggerド磁化)。横軸は温度を表す。

$T = 0$ で SMR は 0 ではなく有限の負の値に収束していくことが確認できる。

6.4 $S = 1$ 有限膜厚の量子ハイゼンベルク模型: 膜厚依存性

$S = 1$ 有限膜厚の反強磁性ハイゼンベルグ模型に対して、交替磁化を生じさせるために異方性パラメータを $D = -0.1J$ ($h = 0$) とした場合の計算結果を図 6.5 に示す。格子サイズは $16 \times 16 \times m$ ($m = 2, 4, 6$) である。膜厚を増やすに従って、交替磁化は $k_B T = 2.7J$ 付近で急速に立ち上がるようになる。前節と同様に、転移点より高温でも正の SMR が生じており、転移点付近で SMR がピークを持っていることが確認できる。一方、スタaggerド磁化が出ている転移点より低温領域では、急速に SMR が減少し、ある温度以下で負の SMR が生じる。

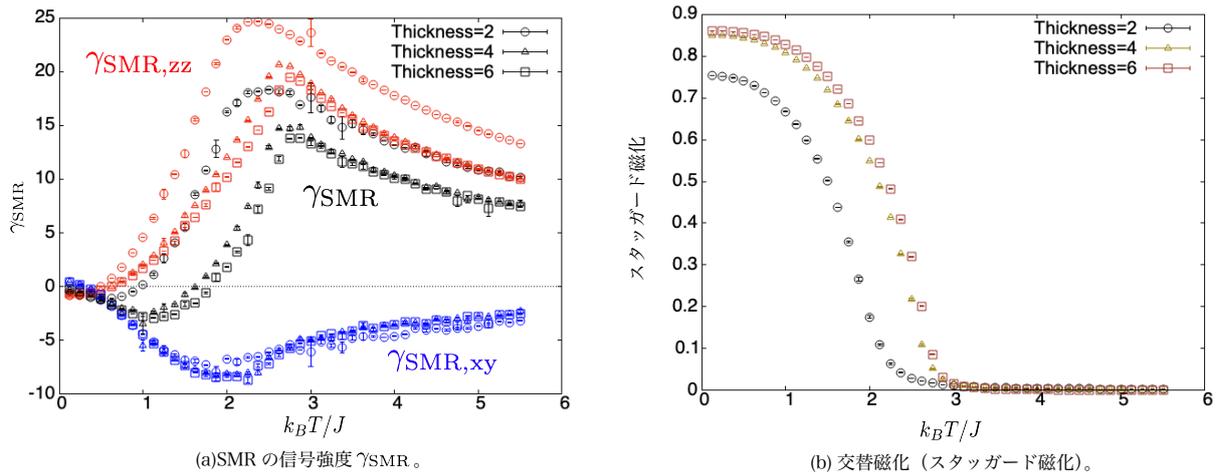


図 6.5: $S = 1$ の 3 次元量子ハイゼンベルクに対する計算結果。格子サイズは $16 \times 16 \times m$ ($m = 2, 4, 6$), 異方性パラメータは $D = -0.1J$, 交替磁場は加えていない ($h = 0$)。 (a) SMR の信号強度 γ_{SMR} 。 (b) 交替磁化 (スタaggerド磁化)。横軸は温度を表す。

6.5 $S = 1$ 有限膜厚の量子ハイゼンベルク模型: 格子サイズ依存性

$S = 1$ 有限膜厚の反強磁性ハイゼンベルグ模型に対して、交替磁化を生じさせるために異方性パラメータを $D = -0.1J$ ($h = 0$) とした場合の計算結果を図 6.6 に示す。格子サイズは $16 \times 16 \times m$ ($m = 2, 4, 6$) である。膜厚を増やすに従って、交替磁化は $k_B T = 2.7J$ 付近で急速に立ち上がるようになる。前節と同様に、転移点より高温でも正の SMR が生じており、転移点付近で SMR がピークを持っていることが確認できる。一方、スタaggerド磁化が出ている転移点より低温領域では、急速に SMR が減少し、ある温度以下で負の SMR が生じる。

$S = 1$ の 3 次元反強磁性ハイゼンベルグ模型 ($D = -0.1J$, $h = 0$) に対して、格子サイズを $L \times L \times 6$ ($L = 8, 12, 16$) とした場合の計算結果を図 6.6 に示す。サイズ依存性は少ないが、 $\gamma_{SMR,zz}$ の寄与に若干のサイズ依存性があり、符号反転する温度が高温側にシフトすることが確認できる。

6.6 $S = 1$ 有限膜厚の量子ハイゼンベルク模型: 乱れの効果

$S = 1$ 有限膜厚の反強磁性ハイゼンベルグ模型にスタaggerドな磁場 $h = 0.1J$ を入れたモデルに対して計算を行った。格子のサイズは 16 サイト膜厚 6 層に固定し、サイト間の交換エネルギーを全て $J = 1$ にした場合と、式 (6.2) の $\delta = 3/2$ の分布に従う場合を比較したものを図 6.7 に示す。乱れの効果を入れると転移点が低温に移動し、SMR の符号反転温度とピーク位置が低温になること、また乱れの効果を入れるとピーク位置が下がることが分かる。

6.7 $S = 1$ 量子ハイゼンベルク模型: 高温領域の振る舞い

$S = 1$ の 2 次元量子ハイゼンベルグ模型 (格子サイズ 16×16 , $D = -0.1J$) に対して、 γ_{SMR} の温度依存性を両対数でプロットしたものを図 6.8 に示す。図からわかるように、十分高温の領域では、スピン

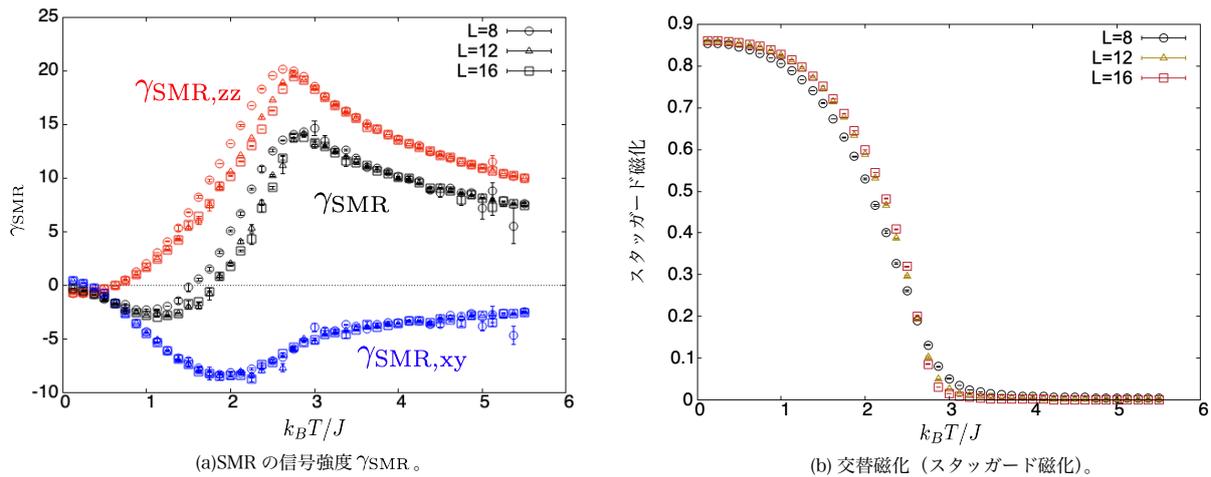


図 6.6: $S = 1$ 有限膜厚の量子ハイゼンベルクに対する計算結果。格子サイズは $l \times l \times 6$ ($l = 8, 12, 16$), 異方性パラメータは $D = -0.1J$, 交替磁場は加えていない ($h = 0$)。 (a) SMR の信号強度 γ_{SMR} 。 (b) 交替磁化 (スタaggerド磁化)。横軸は温度を表す。

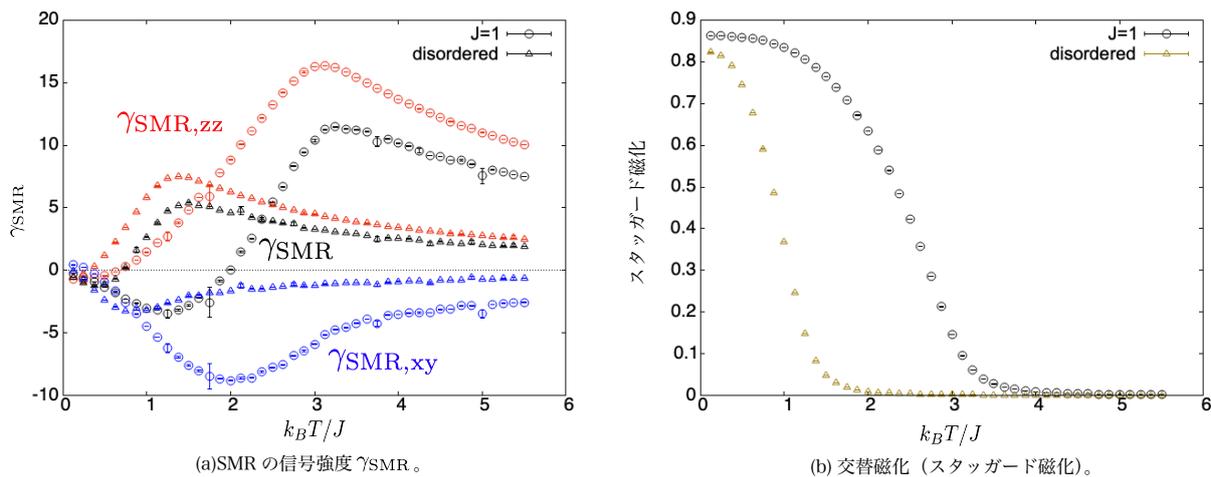


図 6.7: 乱れのある $S = 1$ 有限膜厚の量子ハイゼンベルク模型 (格子サイズ $16 \times 16 \times 6$, $h = 0.1J$) での計算結果 (a) SMR の信号強度 γ_{SMR} 。 (b) 交替磁化 (スタaggerド磁化)。横軸は温度を表す。

ホール磁気抵抗が温度 T に逆比例する振る舞い (キュリー則) が観測される。同様に、 $S = 1$ 有限膜厚の量子ハイゼンベルク模型 (格子サイズ $16 \times 16 \times 6$, $D = -0.1J$) に対して、 γ_{SMR} の温度依存性を両対数でプロットしたものを図 6.9 に示す。ここでも同様に、高温領域で γ_{SMR} がキュリー則に従うことを確認することができる。これらの振る舞いは動的帯磁率の高温展開によって得られると期待されるが、詳しい解析は今後の課題である。

6.8 スピン波を用いたの解析計算結果との比較

$S = 1$ の 2 次元量子ハイゼンベルク模型 (格子サイズ $16 \times 16 \times 6$, $D = -0.1J$) で得られた数値計算結果と、文献 [17] で得られている解析計算結果を比較したものを図 6.10 に示す。図からわかるように

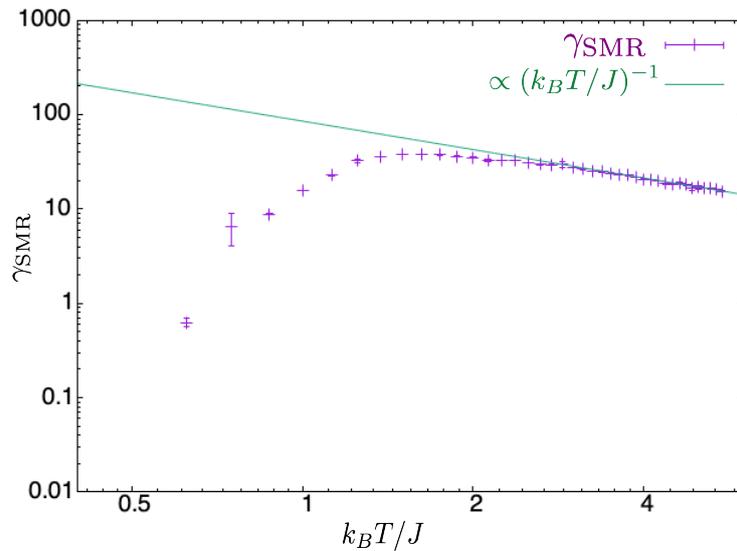


図 6.8: $S = 1$ の 2 次元量子ハイゼンベルク模型 (格子サイズ 16×16 , $D = -0.1J$) に対する SMR の高温領域での温度依存性。

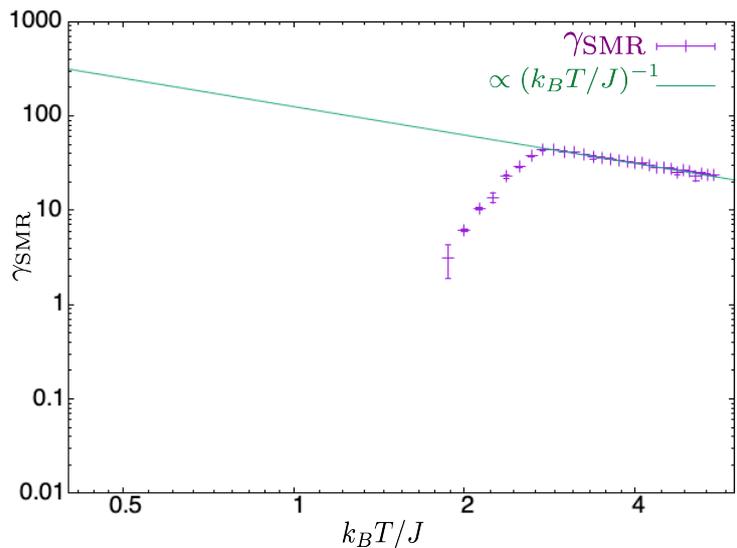


図 6.9: $S = 1$ 有限膜厚の量子ハイゼンベルク模型 (格子サイズ $16 \times 16 \times 6$, $D = -0.1J$) に対する SMR の高温領域での温度依存性。

$S = 1$ では、今回得られた数値計算結果とスピン波を用いた解析計算結果はふるまいが異なることが分かる。

6.9 計算結果のまとめ

スタaggerド磁化が出ていない転移点より高い温度領域においては、磁性絶縁体側の局在スピン S の大きさによってスピンホール磁気抵抗 (SMR) の振る舞いが異なることが確認された。 $S = 1$ の時は高温領域で正の値を持ち、低温領域では負の SMR に転じることがわかった。また $S = 1$ の場合には、高温領

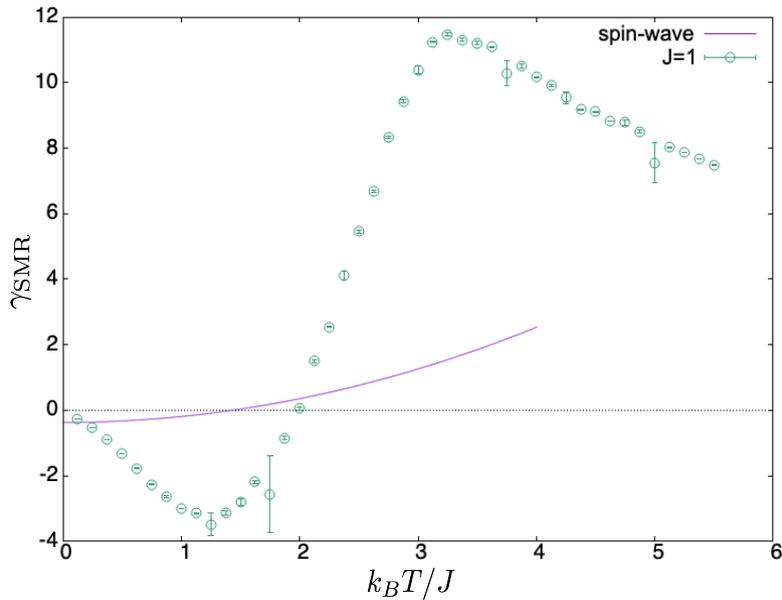


図 6.10: $S = 1$ 有限膜厚の量子ハイゼンベルク模型 (格子サイズ $16 \times 16 \times 6$, $D = -0.1J$) の数値計算結果とスピン波を用いた解析計算 [17] の比較。

域で SMR の大きさ γ_{SMR} がキュリー則に従うことが見いだされた。スタaggered 磁化が生じる磁気転移点以下の温度領域では、局在スピン S の大きさに依存せず SMR が負となり、絶対零度では 0 に近づいていくが $S = 1$ の 2 次元の場合には負の値に近づいていくことが確認された。 $S = 1/2$, $S = 1$ の両方で、膜厚を大きくしていくと転移点が高くなり、スタaggered 磁化の転移点での立ち上がり方が急になる。全体的な傾向として、転移点が高温にシフトするとともに SMR の正のピーク位置も同じくシフトする。これは SMR の正のピークは磁気転移点にあっていることを示唆する。逆に膜厚が小さくなり、スタaggered 磁化の立ち上がり方がゆるやかになると、SMR の負のピーク位置は低温側にシフトしていることが確認できる。負の SMR は交替磁化が十分大きくなったときに出現することが示唆される。転移点付近で正のピークを持つこと、低温領域で負符号の SMR が観測されることは実験で確認されている [15]。本研究の結果において $S = 1$ の 2 次元の場合以外では、 $T = 0$ で SMR のシグナルが 0 に近づいており、反強磁性体を用いた SMR の実験結果 [15] やスピン波を用いた微視的理論の先行研究 [17] と異なる結果となっている (図 6.10 参照)。 $T = 0$ で SMR が負の値に近づくのは、スピンの交替磁化を反映した $\gamma_{\text{SMR},(0)}$ によるものである。この値は交替磁化の大きさの 2 乗に比例しており、比較的小さいスピン ($S = 1/2, 1$) では交替磁化弱くなる傾向があるため、絶対零度でほぼ 0 に近づいているように見えると考えられる。スピン S が更に大きい場合には、スピン波や実験結果の様に $T = 0$ で負の有限の値に近づくと推測されるが、それを確認するためにはさらに大きな S に対する数値計算が必要である。数値計算結果の物理的描像もしくは解釈については、今後さらなる検討が必要である。

第7章

まとめ

本論文ではスピンホール磁気抵抗 (SMR) 効果に着目し、量子モンテカルロ法による数値計算を行うことで SMR の温度依存性を評価した。第2章および第3章で SMR の実験および理論のレビューを行ったあと、第4章で量子モンテカルロ法の基礎理論を説明した。本研究の主要な結果は第5章および第6章で与えられる。まず、非平衡グリーン関数法を基にして、SMR を局所スピン帯磁率によって表現し、この局所スピン帯磁率を量子モンテカルロ法で評価した。通常の解析接続の方法では、SMR を数値的に評価することが困難であるため、解析接続によらない新しい計算手法を提案した (第5章)。この手法を用いて、反強磁性絶縁体と常磁性金属の接合系における SMR の温度依存性に関して、反強磁性絶縁体の局在スピンの大きさ S 、膜厚、格子のサイズおよび温度に関する依存性を評価した。その結果、スタaggerド磁化が確認できる低温領域においては、SMR が負の値を持つことが分かった。また、磁気転移点より高温領域では、反強磁性絶縁体の局在スピンの大きさにより挙動が異なり、 $S = 1/2$ の場合には転移点より高温では SMR がほぼ消失するが、 $S = 1$ の場合は、転移点付近で正のピークを持つことが確認できた。

これらの結果は、広い温度領域で SMR の実験結果と定性的に一致する結果が得られているが、詳しい比較や得られた結果の物理的な解釈については、今後の検討課題となっている。

付録 A

非平衡グリーン関数法

この付録では非平衡グリーン関数法による定常状態の記述方法について、簡単にまとめる。まず非平衡グリーン関数法に基づく摂動展開の一般論を説明し、次に各種非平衡グリーン関数を定義する。

相互作用表示と時間発展演算子

系を記述するハミルトニアンを \mathcal{H} とし、ハミルトニアンは時間に依存しないものとする。シュレーディンガー表示では観測量を記述する演算子 \mathcal{O}_S は時間によらず一定であり、時刻 $t = t_0$ で状態が $|\Psi_S(t_0)\rangle$ であったときの波動関数の時間発展はシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_S(t)\rangle = \mathcal{H} |\Psi_S(t)\rangle, \quad (\text{A.1})$$

によって記述される。このとき、時刻 t での物理量の期待値は $\langle \Psi_S(t) | \mathcal{O}_S | \Psi_S(t) \rangle$ とかける。系のハミルトニアンを

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \quad (\text{A.2})$$

とすでに解がわかっている無摂動ハミルトニアン \mathcal{H}_0 と摂動部分 \mathcal{H}_1 に分割する。このとき、相互作用表示の状態ベクトル $|\Psi_I(t)\rangle$ および演算子 $\mathcal{O}_I(t)$ を

$$|\Psi_I(t)\rangle \equiv e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\Psi_S(t)\rangle, \quad (\text{A.3})$$

$$\mathcal{O}_I(t) \equiv e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \mathcal{O}_S e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar}. \quad (\text{A.4})$$

と定義する。このとき、時刻 t での観測量の時間発展は

$$\langle \Psi_S(t) | \mathcal{O}_S | \Psi_S(t) \rangle = \langle \Psi_I(t) | \mathcal{O}_I(t) | \Psi_I(t) \rangle, \quad (\text{A.5})$$

と相互作用表示によって書き直せる。また定義式 (A.3) とシュレーディンガー方程式 (A.1) を用いると、相互作用表示の状態ベクトル $|\Psi_I(t)\rangle$ の時間発展は、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle &= -\mathcal{H}_0 e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\Psi_S(t)\rangle + e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \mathcal{H} |\Psi_S(t)\rangle \\ &= \mathcal{H}_{1,I}(t) |\Psi_I(t)\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\mathcal{H}_{1,I}(t) = e^{i\mathcal{H}_0(t-t_0)/\hbar} \mathcal{H}_1 e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \quad (\text{A.7})$$

によって記述されることがわかる。相互作用表示において、時刻 t の状態ベクトルと時刻 t_0 の状態ベクトルを結ぶ時間発展演算子 $\mathcal{U}(t, t_0)$ を以下のように導入する:

$$|\Psi_I(t)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle. \quad (\text{A.8})$$

$\mathcal{U}(t, t_0)$ はユニタリー演算子である:

$$\mathcal{U}^{-1}(t, t_0) = \mathcal{U}^\dagger(t, t_0). \quad (\text{A.9})$$

また定義から、時間発展演算子は以下の性質を満たす:

$$\mathcal{U}(t, t) = 1, \quad (\text{A.10})$$

$$\mathcal{U}(t_2, t_1) = \mathcal{U}(t_2, t_3)\mathcal{U}(t_3, t_1). \quad (\text{A.11})$$

式 (A.8) の両辺を時刻 t で微分することで、時間発展演算子が以下の微分方程式を満たすことを示すことができる:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}_{1,I}(t)\mathcal{U}(t, t_0). \quad (\text{A.12})$$

式 (A.12) の両辺を時間 t_0 から t まで積分し、 $\mathcal{U}(t_0, t_0) = 1$ が成り立つことを用いると、以下の式が得られる:

$$\mathcal{U}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}_{1,I}(t')\mathcal{U}(t', t_0). \quad (\text{A.13})$$

$\mathcal{U}(t', t_0)$ に対して $\mathcal{U}(t, t_0)$ を逐次代入することで、時間発展演算子を相互作用項の形式的摂動展開を用いて表すことが出来る。

$$\mathcal{U}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{H}_{1,I}(t_1)\mathcal{H}_{1,I}(t_2) \cdots \mathcal{H}_{1,I}(t_n). \quad (\text{A.14})$$

さらに、時間順序積 T を導入すると、

$$\mathcal{U}(t, t_0) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}_{1,I}(t') \right], \quad (\text{A.15})$$

が得られる。また時間発展演算子 $\mathcal{U}(t_0, t)$ は、

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t_0, t) &= \mathcal{U}^{-1}(t, t_0) = \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \\ &= \bar{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}_{1,I}(t') \right] = \bar{T} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_t^{t_0} dt' \mathcal{H}_{1,I}(t') \right], \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

と書き表される。ここで \bar{T} は反時間順序積である。

Keldysh 経路

十分過去の時刻 $t = t_0$ において、系がハミルトニアン \mathcal{H}_0 の熱平衡状態にあるとし、そのときの密度行列を ρ_0 とする。時刻 t における観測量の期待値は、

$$\langle \mathcal{O}_S \rangle_t = \text{Tr}[\rho_0 \mathcal{U}(t_0, t) \mathcal{O}_I(t) \mathcal{U}(t, t_0)], \quad (\text{A.17})$$

と記述することができる。さらに時間発展演算子の性質を用いることで、時刻 t における観測量の期待値を

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}_S \rangle &= \text{Tr}[\rho_0 \mathcal{U}(t_0, \infty) \mathcal{U}(\infty, t) \mathcal{O}_I(t) \mathcal{U}(t, t_0)] \\ &= \text{Tr}[\rho_0 \mathcal{U}(-\infty, \infty) \mathcal{U}(\infty, t) \mathcal{O}_I(t) \mathcal{U}(t, -\infty)] \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

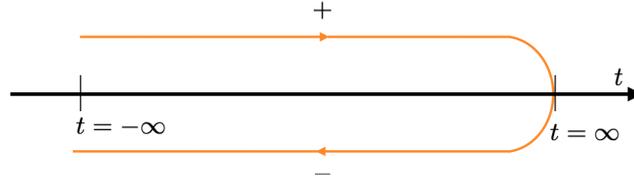


図 A.1: Keldysh 経路。 $t = -\infty$ から $t = \infty$ へ向かう往路を +、 $t = \infty$ から $t = -\infty$ へ向かう往路を - とする。

と書き直すことができる。さらに式 (A.15), (A.16) を用いると、観測量の期待値は、

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}_S \rangle = & \text{Tr} \left[\rho_0 \bar{T} \exp \left(+ \frac{i}{\hbar} \int_{\infty}^{-\infty} dt' \mathcal{H}_{1,I}(t') \right) \right. \\ & \left. \times T \exp \left(- \frac{i}{\hbar} \int_t^{\infty} dt' \mathcal{H}_{1,I}(t') \right) \mathcal{O}_I(t) T \exp \left(- \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \mathcal{H}_{1,I}(t') \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

と書き直すことができる。この式は、図 (A.1) の様に Keldysh 経路を導入することでさらに整理することができる。以後、Keldysh 経路上の時刻を書く際、往路と復路に対応した + と - の添字を付けた時刻を用いる。今、 T_C を図 A.1 の Keldysh 経路上での時間順序積とすると、観測量の期待値は、

$$\langle \mathcal{O}_S \rangle = \text{Tr} \left[\rho_0 T_C \mathcal{O}_I(t^+) \exp \left(- \frac{i}{\hbar} \int_C d\tau \mathcal{H}_{1,I}(\tau) \right) \right], \quad (\text{A.20})$$

と書き表される。ここで $\tau = (t, \pm) \equiv t^\pm$ は Keldysh 経路上の位置を表す変数であり、時刻と往路・復路を同時にしている変数である。このとき観測量を測定する時刻 t は往路上にあると解釈する。なお、観測量の期待値は、

$$\langle \mathcal{O}_S \rangle = \text{Tr} [\rho_0 \mathcal{U}(-\infty, t) \mathcal{O}_I(t) \mathcal{U}(t, \infty) \mathcal{U}(\infty, -\infty)] \quad (\text{A.21})$$

と書き換えることも可能であり、同様の変形によって、

$$\langle \mathcal{O}_S \rangle = \text{Tr} \left[\rho_0 T_C \mathcal{O}_I(t^-) \exp \left(- \frac{i}{\hbar} \int_C d\tau \mathcal{H}_{1,I}(\tau) \right) \right], \quad (\text{A.22})$$

となる。このとき観測量を測定する時刻 t は復路上にあると解釈する。このように観測量を測定する時刻は、往路・復路のどちらにとってもよい。

非平衡グリーン関数の定義

非平衡グリーン関数は、ケルディッシュ経路上で以下のように定義される:

$$G(t_1^\eta, t_2^{\eta'}) = -\frac{i}{\hbar} \langle T_C \psi_H(t_1^\eta) \psi_H^\dagger(t_2^{\eta'}) \rangle. \quad (\text{A.23})$$

時間の添字 $\eta (= \pm)$ は Keldysh 経路における往路・復路を指定する変数であり、

$$\psi_H(t^\eta) = e^{i\mathcal{H}t^\eta/\hbar} \psi e^{i\mathcal{H}t/\hbar} e^{-i\mathcal{H}t^\eta/\hbar}, \quad (\text{A.24})$$

は場の演算子のハイゼンベルク表示である。 η, η' のとり方に依存して、4つのグリーン関数が定義できる:

$$G^>(t_1, t_2) = G(t_1^-, t_2^+) = -\frac{i}{\hbar} \langle \psi_H(t_1) \psi_H^\dagger(t_2) \rangle, \quad (\text{A.25})$$

$$G^<(t_1, t_2) = G(t_1^+, t_2^-) = -\sigma \frac{i}{\hbar} \langle \psi_H^\dagger(t_2) \psi_H(t_1) \rangle, \quad (\text{A.26})$$

$$G^T(t_1, t_2) = G(t_1^+, t_2^+) = -\frac{i}{\hbar} \langle T \psi_H(t_1) \psi_H^\dagger(t_2) \rangle, \quad (\text{A.27})$$

$$G^{\bar{T}}(t_1, t_2) = G(t_1^-, t_2^-) = -\frac{i}{\hbar} \langle \bar{T} \psi_H(t_1) \psi_H^\dagger(t_2) \rangle. \quad (\text{A.28})$$

σ は場の演算子の統計性によって決まる符号である:

$$\sigma = \begin{cases} +1 & : \text{boson} \\ -1 & : \text{fermion} \end{cases}, \quad (\text{A.29})$$

$G^>(t_1, t_2)$ および $G^<(t_1, t_2)$ はそれぞれ greater, lesser グリーン関数と呼ばれる。また $G^T(t_1, t_2)$ および $G^{\bar{T}}(t_1, t_2)$ は時間順序および反時間順序グリーン関数と呼ばれる。 $G^T(t_1, t_2)$, $G^{\bar{T}}(t_1, t_2)$ は以下のよう to greater, lesser グリーン関数と関係付けることができる:

$$G^T(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) G^>(t_1, t_2) + \theta(t_2 - t_1) G^<(t_1, t_2), \quad (\text{A.30})$$

$$G^{\bar{T}}(t_1, t_2) = \theta(t_2 - t_1) G^>(t_1, t_2) + \theta(t_1 - t_2) G^<(t_1, t_2). \quad (\text{A.31})$$

さらに遅延グリーン関数 $G^R(t_1, t_2)$ および 先進グリーン関数 $G^A(t_1, t_2)$ を以下のように定義する:

$$G^R(t_1, t_2) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t_1 - t_2) \langle [\psi_H(t_1), \psi_H^\dagger(t_2)]_\sigma \rangle, \quad (\text{A.32})$$

$$G^A(t_1, t_2) = -\frac{i\sigma}{\hbar} \theta(t_2 - t_1) \langle [\psi_H(t_1), \psi_H^\dagger(t_2)]_\sigma \rangle. \quad (\text{A.33})$$

ここで $\theta(t)$ は階段関数、 $[A, B]_\sigma = AB - \sigma BA$ である。これら 2つのグリーン関数は、他のグリーン関数と以下のような関係式で結ばれる:

$$G^R(t_1, t_2) = G^T(t_1, t_2) - G^<(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) (G^>(t_1, t_2) - G^<(t_1, t_2)), \quad (\text{A.34})$$

$$G^A(t_1, t_2) = -G^{\bar{T}}(t_1, t_2) - G^<(t_1, t_2) = \theta(t_2 - t_1) (G^<(t_1, t_2) - G^>(t_1, t_2)). \quad (\text{A.35})$$

系のハミルトニアンが時間によらず、系が定常状態に達しているときには、これらのグリーン関数は時刻の差 $t_1 - t_2$ のみの関数となる。

スピン流の 2 次摂動による計算

非平衡グリーン関数法を用いて、式 (3.41) で与えられる金属-反強磁性絶縁体の界面でのスピン流を、2次摂動によって計算する。スピン流の式を再掲する:

$$\langle \hat{I}_S^{(a)} \rangle = \text{Re} \left[-2ig_a(\theta) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} \langle S_{\nu \mathbf{k}}^{(a)}(0) s_{\mathbf{q}}^-(0) \rangle \right]. \quad (\text{A.36})$$

これをケルディッシュ経路を用いた形式展開で書き直すと以下ようになる:

$$\langle \hat{I}_S^{(a)} \rangle = \text{Re} \left[-2ig_a(\theta) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \left\langle T_C S_{\nu \mathbf{k}}^{(a)}(\tau_1) s_{\mathbf{q}}^-(\tau_2) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_C d\tau H_{\text{ex}}^{(a)}(\tau) \right) \right\rangle \right]. \quad (\text{A.37})$$

ここで $\tau_1 = t^-$, $\tau_2 = t^+$ である。界面での相互作用がないときにはスピン流はゼロである。スピン流に寄与する最低の摂動次数は 2 次であり、2 次までの摂動展開を行ったのち、スピン流の期待値をスピン帯磁率 (スピン相関) を用いて記述すると、

$$\begin{aligned} \langle \hat{I}_S^{(a)} \rangle &\simeq -\frac{2g_a(\theta)^2}{\hbar} \int_C d\tau \operatorname{Re} \left[\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 \langle T_C s_{\mathbf{q}}^{(+)}(\tau) s_{\mathbf{q}}^{-}(\tau_2) \rangle \langle T_C S_{\nu \mathbf{k}}^{(a)}(\tau_1) (S_{\nu \mathbf{k}}^{(a)}(\tau))^\dagger \rangle \right], \\ &= -\frac{2g_a(\theta)^2}{\hbar} \int_C d\tau \operatorname{Re} \left[\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 N_{\text{NM}} \chi(\mathbf{q}, \tau, \tau_2) G_{\nu\nu}^{(a)}(\mathbf{k}, \tau_1, \tau) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

となる。ここで

$$\chi(\mathbf{q}, \tau_1, \tau_2) = \frac{i}{\hbar N_{\text{NM}}} \langle T_C s_{\mathbf{q}}^{+}(\tau_1) (s_{\mathbf{q}}^{+})^\dagger(\tau_2) \rangle, \quad (\text{A.39})$$

$$G_{\nu\nu'}^{(a)}(\mathbf{k}, \tau_1, \tau_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle T_C S_{\nu \mathbf{k}}^{(a)}(\tau_1) (S_{\nu' \mathbf{k}}^{(a)})^\dagger(\tau_2) \rangle. \quad (\text{A.40})$$

はスピンに対する非平衡グリーン関数である。Keldysh 経路上の τ についての積分を、往路・復路の場合分けして実時刻 t の積分に直すと、

$$\begin{aligned} \langle \hat{I}_S^{(a)} \rangle &= -2\hbar g_a(\theta)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \operatorname{Re} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 N_{\text{NM}} \left[\chi^{<}(\mathbf{q}, t) G_{\nu\nu}^{T, (a)}(\mathbf{k}, -t) - \chi^{\bar{T}}(\mathbf{q}, t) G_{\nu\nu}^{<, (a)}(\mathbf{k}, -t) \right], \\ &= -2\hbar g_a(\theta)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \operatorname{Re} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 N_{\text{NM}} \left[\chi^{<}(\mathbf{q}, t) G_{\nu\nu}^{R, (a)}(\mathbf{k}, -t) - \chi^A(\mathbf{q}, t) G_{\nu\nu}^{<, (a)}(\mathbf{k}, -t) \right], \\ &= -2\hbar g_a(\theta)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \operatorname{Re} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 N_{\text{NM}} \left[\chi^{<}(\mathbf{q}, \omega) G_{\nu\nu}^{R, (a)}(\mathbf{k}, \omega) - \chi^A(\mathbf{q}, \omega) G_{\nu\nu}^{<, (a)}(\mathbf{k}, \omega) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

となる。ここでスピン相関関数の上付き添字は、前節で説明した非平衡グリーン関数の種類を表す。

2 次摂動の計算に現れるスピン相関関数は、すべて熱平衡状態に対して計算される。このとき、揺動散逸定理を用いることで (付録 B 参照)、lesser グリーン関数を遅延グリーン関数に書き換えることができる:

$$\chi^{<}(\mathbf{q}, \omega) = 2if(\hbar\omega + \delta\mu_s) \operatorname{Im} \chi^R(\mathbf{q}, \omega), \quad (\text{A.42})$$

$$G^{<, (a)}(\mathbf{k}, \omega) = 2if(\hbar\omega) \operatorname{Im} G^{R, (a)}(\mathbf{k}, \omega), \quad (\text{A.43})$$

ここで $f(\xi) = 1/(e^{\beta\xi} - 1)$ はボーズ分布関数である。また、先進グリーン関数は遅延グリーン関数の複素共役となることが示せる:

$$\chi^A(\mathbf{q}, \omega) = (\chi^R(\mathbf{q}, \omega))^*. \quad (\text{A.44})$$

これらの式を用いると、最終的にスピン流の期待値は以下のように計算される:

$$\langle \hat{I}_S^{(a)} \rangle = 4\hbar g_a(\theta)^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 N_{\text{NM}} \operatorname{Im} \chi^R(\mathbf{q}, \omega) (-\operatorname{Im} G^{R, (a)}(\mathbf{k}, \omega)) [f(\hbar\omega) - f(\hbar\omega + \delta\mu_s)]. \quad (\text{A.45})$$

これにより、本文の式 (3.42) が導出される。

付録 B

揺動散逸定理

本付録では、揺動散逸定理によりグリーン関数の lesser 成分と retarded 成分の関係式を文献 [43] を参考に導く。スピン蓄積が起こっている準熱平衡状態の常磁性金属のハミルトニアンを再度記載する:

$$\mathcal{H}_{\text{NM}} = H_{\text{NM}} - \mu_{\uparrow} N_{\uparrow} - \mu_{\downarrow} N_{\downarrow}. \quad (\text{B.1})$$

ハミルトニアン H_{NM} の固有状態 $|n\rangle$ と対応する固有値 E_n が求まっているとすると、これらの完全系をはさみこむことで、スピン帯磁率のレーマン表示を得る:

$$\begin{aligned} \chi_{+-}^R(\mathbf{q}, t) &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\hbar} \theta(t) \langle [s_{\mathbf{q}}^+(t), s_{\mathbf{q}}^-(0)] \rangle, \\ &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \theta(t) \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu_{\uparrow} N_{\uparrow, n} - \mu_{\downarrow} N_{\downarrow, n})} \left[\langle n | s_{\mathbf{q}}^+(t) | m \rangle \langle m | s_{\mathbf{q}}^-(0) | n \rangle - \langle n | s_{\mathbf{q}}^-(0) | m \rangle \langle m | s_{\mathbf{q}}^+(t) | n \rangle \right], \\ &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \theta(t) \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu_{\uparrow} N_{\uparrow, n} - \mu_{\downarrow} N_{\downarrow, n})} \left[e^{iE_n t/\hbar - iE_m t/\hbar} \langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle \langle m | s_{\mathbf{q}}^- | n \rangle \right. \\ &\quad \left. - e^{iE_m t/\hbar - iE_n t/\hbar} \langle n | s_{\mathbf{q}}^- | m \rangle \langle m | s_{\mathbf{q}}^+ | n \rangle \right], \\ &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \theta(t) \sum_{n,m} \left[e^{-\beta(E_n - \mu_{\uparrow} N_{\uparrow, n} - \mu_{\downarrow} N_{\downarrow, n})} e^{iE_n t/\hbar - iE_m t/\hbar} \langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle \langle m | s_{\mathbf{q}}^- | n \rangle \right. \\ &\quad \left. - e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow} N_{\uparrow, m} - \mu_{\downarrow} N_{\downarrow, m})} e^{iE_n t/\hbar - iE_m t/\hbar} \langle m | s_{\mathbf{q}}^- | n \rangle \langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle \right], \\ &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \theta(t) \sum_{n,m} \left(e^{-\beta(E_n - \mu_{\uparrow} N_{\uparrow, n} - \mu_{\downarrow} N_{\downarrow, n})} - e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow} N_{\uparrow, m} - \mu_{\downarrow} N_{\downarrow, m})} \right) \\ &\quad \times e^{iE_n t/\hbar - iE_m t/\hbar} |\langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle|^2. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

ここで Ξ は大分配関数である。この表式を元に、 δ を収束因子として、フーリエ変換を行う:

$$\begin{aligned} \chi_{+-}^R(\mathbf{q}, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \chi_{+-}^R(\mathbf{q}, t), \\ &= \int_0^{\infty} dt e^{-i\omega t} \frac{i}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \sum_{n,m} \left(e^{-\beta(E_n - \mu_{\uparrow} N_{\uparrow, n} - \mu_{\downarrow} N_{\downarrow, n})} - e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow} N_{\uparrow, m} - \mu_{\downarrow} N_{\downarrow, m})} \right) \\ &\quad \times \left[e^{iE_n t/\hbar - iE_m t/\hbar} |\langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle|^2 \right], \\ &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \sum_{n,m} \left(e^{-\beta(E_n - \mu_{\uparrow} N_{\uparrow, n} - \mu_{\downarrow} N_{\downarrow, n})} - e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow} N_{\uparrow, m} - \mu_{\downarrow} N_{\downarrow, m})} \right) \frac{|\langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle|^2}{\hbar\omega + E_n - E_m + i\delta}. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

ここで、

$$\frac{1}{x + i\delta} = \mathcal{P}\frac{1}{x} - i\pi\delta(x), \quad (\text{B.5})$$

を用いることで、スピン帯磁率の虚部を計算することが出来る。

$$\begin{aligned} \text{Im}\chi_{+-}^R(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{\pi}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \sum_{n,m} \left(e^{-\beta(E_n - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,n} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,n})} - e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,m} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,m})} \right) \\ &\quad \times |\langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_n - E_m), \\ &= -\frac{\pi}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \sum_{n,m} \left(e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,m} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,m})} - e^{-\beta(E_n - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,n} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,n})} \right) \\ &\quad \times |\langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_n - E_m). \\ &= -\frac{\pi}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,m} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,m})} \left(1 - e^{\beta(E_m - E_n + \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,n} + \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,n} - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,m} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,m})} \right) \\ &\quad \times |\langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_n - E_m). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

今、 s^+ の演算子はダウンスピンの電子 1 つ消し、アップスピンの電子を 1 つ増やす演算子であることに注意すると、

$$N_{\uparrow,n} - N_{\uparrow,m} = N_{\downarrow,m} - N_{\downarrow,n} = 1, \quad (\text{B.7})$$

が成り立つ。上の 2 式を用いることで

$$E_m - E_n - \mu_{\uparrow}(N_{\uparrow,m} - N_{\uparrow,n}) - \mu_{\downarrow}(N_{\downarrow,m} - N_{\downarrow,n}) = E_m - E_n + \delta\mu_s, \quad (\text{B.8})$$

を導くことができる。この関係式を用いて、式 (B.6) の計算を進めることが出来る:

$$\begin{aligned} \text{Im}\chi_{+-}^R(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{\pi}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,m} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,m})} \left(1 - e^{\beta(E_m - E_n + \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,n} + \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,n} - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,m} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,m})} \right) \\ &\quad \times |\langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_n - E_m). \\ &= \frac{\pi}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,m} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,m})} (e^{E_m - E_n + \delta\mu_s} - 1) |\langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_n - E_m). \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

同じく lesser 成分に対するレーマン表示を計算する:

$$\begin{aligned} \chi_{+-}^<(\mathbf{q}, t) &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\hbar} \langle s_{\mathbf{q}}^-(0) s_{\mathbf{q}}^+(t) \rangle, \\ &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,n} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,n})} \left[e^{iE_m t/\hbar - iE_n t/\hbar} \langle n | s_{\mathbf{q}}^- | m \rangle \langle m | s_{\mathbf{q}}^+ | n \rangle \right], \\ &= \frac{i}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,m} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,m})} \left[e^{iE_n t/\hbar - iE_m t/\hbar} \langle m | s_{\mathbf{q}}^- | n \rangle \langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

この表式を元にフーリエ変換を行う。

$$\begin{aligned} \chi_{+-}^<(\mathbf{q}, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \chi_{+-}^<(\mathbf{q}, t), \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \frac{i}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,m} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,m})} (e^{iE_n t/\hbar - iE_m t/\hbar}) |\langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle|^2, \\ &= \frac{2\pi i}{N_{\text{NM}}\Xi\hbar} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_m - \mu_{\uparrow}N_{\uparrow,m} - \mu_{\downarrow}N_{\downarrow,m})} |\langle n | s_{\mathbf{q}}^+ | m \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_n - E_m). \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

よって式 (B.9) と比較することで、ボース分布関数 $f(x) = 1/(e^x - 1)$ を用いて、揺動散逸定理を示すことが出来る:

$$\chi^<(\mathbf{q}, \omega) = 2if(\hbar\omega + \delta\mu_s)\text{Im}\chi^R(\mathbf{q}, \omega). \quad (\text{B.12})$$

熱平衡状態にある反強磁性絶縁体に対しては、スピン化学ポテンシャルが出てこない点のみが異なり、その他の導出方法は全く同じである。

付録 C

静的交替磁化の効果

まず、式 (A.41) によって得られたスピン流の表式を再度示す:

$$\langle \hat{I}_S^{(a)} \rangle = -2\hbar g_a(\theta)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \text{Re} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 N_{\text{NM}} \left[\chi^<(\mathbf{q}, \omega) G_{\nu\nu}^{R,(a)}(\mathbf{k}, \omega) - \chi^A(\mathbf{q}, \omega) G_{\nu\nu}^{<,(a)}(\mathbf{k}, \omega) \right]. \quad (\text{C.1})$$

ここで $S_{\nu\mathbf{k}}^{(a)}(t) = S_{\nu\mathbf{k}}^{(a)}(t) - \langle S_{\nu\mathbf{k}}^{(a)} \rangle_0$ と書き直した時、 z 方向にのみスタagger磁化が立っている為、 zz 成分のグリーン関数のみ変更を受ける。式 (3.23) で定義した retarded グリーン関数、lesser グリーン関数を再度示す:

$$G_{\nu\nu'}^{Rzz}(\mathbf{q}, t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'}(t), S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'}(0)] \rangle, \quad (\text{C.2})$$

$$G_{\nu\nu'}^{<zz}(\mathbf{q}, t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'}(0) S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'}(t) \rangle. \quad (\text{C.3})$$

今、 G^{Rzz} はゆらぎの導入によって変更されない為、lesser 成分のみを計算する。

$$\begin{aligned} G_{\nu\nu'}^{<zz}(\mathbf{q}, t) &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'}(0) S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'}(t) \rangle, \\ &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'}(0) \{ S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'}(t) - \langle S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'} \rangle_0 \} \rangle. \\ &= \frac{i}{\hbar} \theta(t) |\langle S_{\nu,\mathbf{q}}^{z'} \rangle_0|^2. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

今ゆらぎを考慮したことによる、スピン流の新たな項を $\hat{I}_S^{(1,\text{const})}$ と置く。スピン流の計算と同じ様に計算を進めることができる:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{I}_S^{(1,\text{const})} \rangle &= -2\hbar g_1(\theta)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \text{Re} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 N_{\text{NM}} \left[-\chi^A(\mathbf{q}, \omega) G_{\nu\nu}^{<, (1)}(\mathbf{k}, \omega) \right], \\
&= -2\hbar g_1(\theta)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \text{Re} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 N_{\text{NM}} \left[-\chi^A(\mathbf{q}, \omega) \frac{i}{\hbar} |\langle S_{\nu\mathbf{k}}^{(1)} \rangle|^2 2\pi\delta(\omega) \right], \\
&= 2\hbar g_1(\theta)^2 \text{Re} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 N_{\text{NM}} \left[i\chi^A(\mathbf{q}, \omega = 0) \frac{1}{\hbar} |\langle S_{\nu\mathbf{k}}^{(1)} \rangle|^2 \right], \\
&= -2g_1(\theta)^2 |T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}|^2 N_{\text{NM}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} (\text{Im}\chi^R(\mathbf{q}, \omega = 0)) |\langle S_{\nu\mathbf{k}}^{(1)} \rangle|^2, \\
&= -2g_1(\theta)^2 |\mathcal{T}|^2 N_{\text{NM}} \sum_{\mathbf{k}, \nu} (N_{\text{NM}}\pi N(0)^2 \delta\mu_s) |\langle S_{\nu\mathbf{k}}^{(1)} \rangle|^2, \\
&= -2\pi\delta\mu_s g_1(\theta)^2 |\mathcal{T}|^2 N_{\text{NM}}^2 N(0)^2 \sum_{\mathbf{k}, \nu} |\langle S_{\nu\mathbf{k}}^{(1)} \rangle|^2, \\
&= -2\pi\delta\mu_s g_1(\theta)^2 |\mathcal{T}|^2 N_{\text{NM}}^2 N_{\text{AFI}} N(0)^2 \tilde{S}_0^2. \tag{C.5}
\end{aligned}$$

ここで \tilde{S}_0 はスタッガード磁化の大きさ。コンダクタンスの定義式

$$G_S = \lim_{\delta\mu_s \rightarrow 0} \frac{\langle \hat{I}_S \rangle}{\delta\mu_s}. \tag{C.6}$$

よりコンダクタンスを求めると、

$$\begin{aligned}
G_S &= -\frac{A'}{2} g_1(\theta)^2 \tilde{S}_0^2, \\
A' &= 4\pi |\mathcal{T}|^2 N_{\text{NM}}^2 N_{\text{AFI}} N(0)^2. \tag{C.7}
\end{aligned}$$

となる。前章の式 (2.13) からわかるようにスピンホール磁気抵抗の大きさは界面でのスピンコンダクタンスに比例する。磁気抵抗の大きさを表す無次元量として

$$\gamma \equiv \frac{4e^2}{\hbar} \frac{G_s}{S\sigma/\lambda}. \tag{C.8}$$

を導入すると、スピンホール磁気抵抗の影響は

$$\begin{aligned}
\gamma_{\text{SMR}, (0)} &= \gamma_{\text{SMR}, (0)}(\theta = \pi/2) - \gamma_{\text{SMR}, (0)}(\theta = 0) \\
&= -\frac{A''}{2} \tilde{S}_0^2 \\
A'' &= \frac{16e^2\pi\lambda |\mathcal{T}|^2 N_{\text{NM}}^2 N_{\text{AFI}} N^2(0)}{\hbar S\sigma}. \tag{C.9}
\end{aligned}$$

を定義することができる。ここで A'' は界面での相互作用の大きさを表す無次元量である。

謝辞

本研究を行う上で、熱心に指導していただいた加藤岳生准教授に心より感謝申し上げます。スピントロニクスの輪講をはじめとし、解析計算と数値計算の両側面において丁寧に指導をいただき、研究を進めることが出来ました。中国科学院大学の松尾衛准教授にはスピントロニクスに関する議論を行っていただき、感謝しています。

阪野壘助教には分野が異なることもありながら申請書の書き方やスライドの作成方法など色々教わり、さきがけ研究員として赴任している玉谷知裕さんには研究方針や物理的解釈など色々話させていただき感謝しています。

研究室の先輩である山本剛史さんと立野雅大さんには解析計算や数値計算結果の解析手法など色々議論させていただき、研究室の同期である山正樹さんとはスピントロニクスの輪講を行い、お互いの研究テーマに関する議論を通して刺激を受けました。研究室の後輩である佐藤哲也さんと福澤昂汰さんとは物理に関する話をはじめとして色々なことを話させていただき、研究生活を楽しく過ごすことができました、感謝しています。そして、秘書の江口さんには学会の参加手続きや備品の購入などサポートいただき大変感謝しています。

また、知能社会国際卓越大学院プログラムには経済的な支援や、分野の異なる人たちとの接点を設けてくださり感謝しています。

最後になりましたが、物理の研究に専念することが出来たのは、経済的、精神的に支えてくれた家族のおかげです。本当にありがとうございます。

参考文献

- [1] M. N. Baibich et. al. Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).
- [2] M. Julliere. Phys. Lett. **54A**, 225 (1975).
- [3] S. Maekawa and U. Gafvert. IEEE Trans. Magn. **18**, 707 (1982).
- [4] T. Miyazaki and N. Tezuka. J. Magn. Magn. Mater. **139**, L231-L234 (1995).
- [5] M. I. Dyakonov and V. I. Perel. Physics Letters A Volume 35, Issue 6, (1971).
- [6] J. E. Hirsch. Phys. Rev. Lett. **83**, 1834 (1999).
- [7] A. C. Gossard Y. K. Kato, R. C. Myers and D. D. Awschalom. Science **306**, 1910 (2004).
- [8] J. Sinova J. Wunderlich, B. Kaestner and T. Jungwirth. Phys. Rev. Lett. **94**, 047204 (2005).
- [9] H. Miyajima E. Saitoh, M. Ueda and G. Tatara. Appl. Phys. Lett. **88**, 182509 (2006).
- [10] S. O. Valenzuela and M. Tinkham. Nature **442**, 176 (2006).
- [11] K. Harii W. Koshibae K. Ando S. Maekawa K. Uchida, S. Takahashi and E. Saitoh. Nature **445**, 778 (2008).
- [12] J. Flipse et al. Nature Nanotechnol. **7**, 166 (2012).
- [13] Y. Ando S. Mizukami and T. Miyazaki. Phys. Rev. B **66**, 104413 (2002).
- [14] H. Nakayama et. al. Phys. Rev. Lett. **110**, 206601 (2013).
- [15] D. Hou et. al. Phys. Rev. Lett. **118**, 147202 (2017).
- [16] Y. T. Chen et. al. Phys. Rev. B **87**, 144411 (2013).
- [17] Y. Ohnuma T. Kato and M. Matsuo. 094437 (2020). Phys. Rev. B **102**.
- [18] J. Sinova et. al. Rev. Mod. Phys **87**, 1213 (2015).
- [19] 多々良源. スピントロニクス of 物理. 内田老鶴園, 2019.
- [20] C. Hahn et. al. Phys. Rev. B **87**, 174417 (2013).
- [21] N. Vlietstra et. al. Phys. Rev. B **87**, 184421 (2013).
- [22] S. Meyer et. al. Appl. Phys. Lett **104**, 242411 (2014).
- [23] R. Marmion et. al. Phys. Rev. B **89**, 220404(R) (2014).
- [24] J. H. Han et. al. Phys. Rev. B **90**, 144431 (2014).
- [25] Y. Ji et. al. Appl. Phys. Lett. **112**, 232404 (2018).
- [26] J. Nogués and I. K Schuller. J. Magn. Magn. Mater. **192**, 203 (1999).
- [27] Z. Z. Luan et. al. Appl. Phys. Lett. **113**, 072406 (2018).
- [28] M. Matsuo et. al. Phys. Rev. Lett. **120**, 037201 (2018).
- [29] T. Kato et. al. Phys. Rev. B **99**, 144411 (2019).
- [30] H. Bruus and K. Flensberg. *Many-body Quantum Theory In Condensed Matter Physics: An Introduction*. Oxford Univ Press, 2004.

-
- [31] N. Kawashima J. Gubernatis and P. Werner. *Quantum Monte Carlo methods — Algorithms for Lattice Models*. Cambridge University Press, 2016.
- [32] 原田健自. 応用物理 Vol.15 No.3. 岩波書店, 2005.
- [33] M.Suzuki. Progress of Theoretical Physics, 56 (1976), 1454–1469.
- [34] H. G. Evertz et. al. Phys. Rev. Lett. **70**, 875 (1993).
- [35] N. V. Prokof' eval. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 87 (1998), 310–321.
- [36] A. W. Sandvik. Phys. Rev. B **59**, R14157(R) (1999).
- [37] O. F. Syljuåsen and Anders W. Sandvik. Phys. Rev. E **66**, 046701 (2002).
- [38] K. Harada and N. Kawashima. Phys. Rev. E **66**, 056705 (2002).
- [39] H. Suwa and S. Todo. Phys. Rev. Lett. **105**, 12603 (2010).
- [40] A. Masaki-Kato T. Kato Y. Motoyama, K. Yoshimi and N. Kawashima. Comput. Phys. Commun. **264**, 107944 (2021).
- [41] R. J. Gooding K. S. D. Beach and F. Marsiglio. Phys. Rev. B **61**, 5147 (2000).
- [42] N. Laflorencie et. al. Phys. Rev. B **73**, 060403(R) (2006).
- [43] 小形正男. 物性物理のための場の理論・グリーン関数. サイエンス社, 2018.