熱電効果におけるベリー曲率の寄与

金沢大　水田耀ピエール、石井史之

①クリーンなエネルギー源として熱電変換システムの普及が期待されているが、そのためには変換効率のより良い材料が必要である。効率を左右する量の 1 つに Seebeck 係数 S がある。一方、②固体中電子が外場の摂動を受けるとき、その速度 $\mathbf{v}$ には従来から知られるバンド群速度に加えて、Berry 曲率と呼ばれる波数空間に生じた仮想磁場 $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k}) \equiv i\langle\partial_{\mathbf{k}}u| \times |\partial_{\mathbf{k}}u\rangle$ を伴う補正項がつく（$|u(\mathbf{k})\rangle$ は Bloch 状態の周期部分）[1]。また、電流 $\mathbf{j}$ の半古典的表式にもやはり Ω を伴う項が付加する [2]。

②の結果は異常 Hall 効果（伝導度 σ_{xy})、異常 Nernst 効果 (伝導度 α_{xy}) の内因性機構を説明してきたが、$\mathbf{v}$,$\mathbf{j}$ を用いて計算される S に異常効果がどの程度寄与するかは①の観点からも興味深い。Boltzmann の半古典輸送理論に基づき、また Berry 曲率を考慮した場合、無磁場下の xy 面内に置かれた 2 次元系の Seebeck 係数は以下のように表される。

$$S \equiv \frac{E_y}{(-\partial_y T)} = \frac{1}{eT}\frac{1}{1+\beta^2}(\alpha - \beta\gamma) \tag{1}$$

（ただし $\alpha,\ \beta,\ \gamma$ は定数因子を除き、それぞれ $\alpha_{xx},\ \sigma_{xy}, \alpha_{xy}$ を縦伝導度 σ_{xx} で割ったものである。）一方、Berry 曲率を考慮しない扱いから見積もられるのは、$S_0 \equiv S|_{\beta=0=\gamma} = \alpha/(eT)$ である。S と S_0 の値がどの程度違い得るのかを知るべく、以下の磁化した Rashba 型 2 次元電子ガス (R2DEG) モデルで計算を行った。

$$H(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m^*} + \lambda(\mathbf{e_z} \times \mathbf{k}) \cdot \sigma - \Delta\sigma_z \tag{2}$$

図 1 および、$T = 1\text{K},\ \Delta = 10^{-5}$ を固定し化学ポテンシャル μ と $\eta \equiv m^*\lambda^2/\Delta$ をパラメータとして S_0 および $r \equiv (S - S_0)/S_0$ を計算した結果から分かったことのいくつかを挙げる。

1. Δ が温度に比して大きくなりすぎると、S_0 自体が小さくなるとともに $|r|$ も減少する。
2. 図 1 とは逆に異常効果が S_0 を強める（$r > 0$) 領域もあり、$r \lessgtr 0$ で $|r|$ が最大となるのは μ がそれぞれ $\varepsilon_\pm$ バンド端 (Ω が互いに逆符号で大きい）にあるとき。

これらは、定性的には R2DEG 系固有の Berry 曲率の分布特徴 (図 1) から理解できる。また、式 (1) からも分かることであるが、緩和時間 τ がある程度以上に長くなると r は小さくなる。たとえば図 1 のうち $\Delta = 10^{-5}$ の場合、τ <0.1ps では $|r| \sim 0.2$ だが、10ps $< \tau$ では $|r| < 0.01$ となった。しかしどの程度までの散乱強度なら Berry 曲率が明確な意味をもって半古典論が適用可能か、という問題は検討を要する。ひとまずの重要な結論は、**条件次第で Berry 曲率は Seebeck 係数に無視できないほど寄与する可能性がある**という点である。

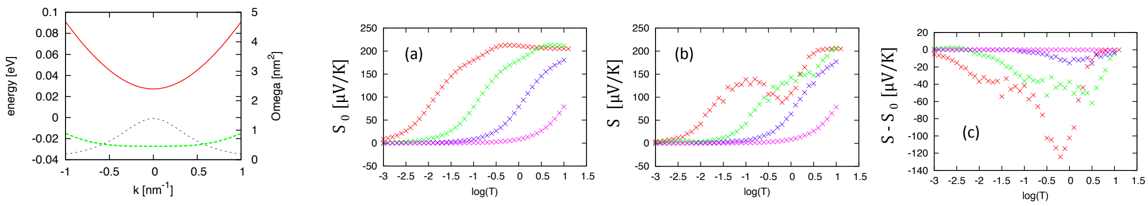

図 1　(2) の 2 つのバンド（最左図左軸）と $|\Omega|$（黒破線、同図右軸)、右 3 図は (a) S_0, (b) S, (c) $S - S_0$ の 温度（対数）依存性.　赤、緑、青、ピンクがこの順に $\Delta = 10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}$ に対応.
$T = 1\text{K},\ m^* = 1,\ \tau = 10^4,\ \eta \equiv m^*\lambda^2/\Delta = 1,\ \mu = -0.9\Delta$（※明示しない限り原子単位)

[1] G.Sundaram and Q.Niu, Phys. Rev. B **59**, 14915 (1999).

[2] Di Xiao *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 026603 (2006).