

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	非一様な系における電気分極とスピン磁化の理論
Title(English)	Theory of electric polarization and spin magnetization in inhomogeneous crystals
著者(和文)	荒井宣裕
Author(English)	Nobuhiro Arai
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京科学大学, 報告番号:甲第208号, 授与年月日:2025年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:村上 修一,西田 祐介,賀川 史敬,古賀 昌久,石塚 大晃
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Institute of Science Tokyo, Report number:甲第208号, Conferred date:2025/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第 号		学位申請者氏名		荒井 宣裕	
		氏名	職名		氏名	職名
論文審査 審査員	主査	村上 修一	教授	審査員	石塚 大晃	准教授
	審査員	西田 祐介	教授			
		賀川 史敬	教授			
		古賀 昌久	准教授			

論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「Theory of electric polarization and spin magnetization in inhomogeneous crystals」と題し、固体結晶中の電子系に関して、空間的な非一様性を導入した際に現れる電気分極やスピン磁化について一般論を構築したもので、本編6章と付録2章よりなる。

第1章「Introduction」では結晶中での電気分極や電気・磁気多重極子の物理について概観している。電気分極の物理や電気・磁気多重極子分極に関する理論・実験の先行研究について解説し、さらに結晶に空間的な非一様性を導入したときに対称性が破れて電気分極などが現れる現象について概観している。またここでいう空間的非一様性とは、座標に比例するようなハミルトニアンで表されるもので、そこには一様電場・一様軌道磁場・ひずみ勾配などが含まれることを述べている。最後に本論文の全体を概観している。

第2章「Quantum theories for electromagnetic multipole moments」では、電気分極の現代理論に沿って基礎事項を紹介したのち、電気四重極子の理論を紹介している。さらに空間的非一様性による分極についての、半古典論に基づく先行研究を解説している。さらに軌道磁化の理論を紹介し、関連して電気磁気効果に関する理論を解説している。

第3章「Electric polarization in inhomogeneous crystals」では、座標に比例するような非一様性により誘起される電気分極の理論を構築している。まず座標に比例する非一様性を線形応答理論で扱うために、有限の波数を導入して最後に波数をゼロとする極限をとることや、分極自身は直接計算できないため電流を計算し、最後に周波数で割って分極を計算することなど、計算手法について述べている。その上で線形応答理論による分極の計算を行って空間勾配の1次まででの分極の表式を導いている。さらにより高次項から出てくるトポロジカル項を加えたものとして、非一様性誘起の分極の式を導いている。さらに、半古典論による先行研究には抜けている項があることを指摘している。ここで得た表式の正しさを検証するために、2次元のモデルを導入して誘起される電荷分布の計算を行い、この章で得た表式と良い一致を示している。

第4章「Spin magnetization in inhomogeneous crystals」では、空間非一様性により誘起されたスピン磁化の表式を線形応答理論により導出している。結果として得た表式は、先行研究での表式と異なり、占有状態に縮退のある場合も適用可能な一般性のある表式であることを指摘している。またここで得た現象は、マルチフェロイクス物質など電気磁気効果を示す物質で現れることを述べている。さらに1次元系のモデルでの数値計算を行い、2種類の非一様性に対して、誘起されるスピン磁化の分布が、この章で得たスピン磁化の表式とよく一致していることを指摘している。

第5章「Inhomogeneity-induced phenomena with disorder」では、前章までとは異なり、乱れや有限温度の効果も新たに入れて、非一様性に誘起された電流の表式を導出している。その結果、乱れがあつたり温度が有限であつたりする場合にも、電流が必ず軌道磁化の回転という形で書けることを一般的に示している。このことから、ここで誘起される電流は磁化電流であり、磁化電流が場所に依存するために、磁化電流がバルクで現れていることを述べている。さらに、ここでは周波数ゼロの極限と波数ゼロの極限を両方とっているが、波数ゼロの極限を先にとるような transport limit では、頂点補正の項から、散逸を伴う電流が現れることを述べている。

第6章「Summary and prospect」においては、論文の全体を概観し今後の展望について述べている。特に、本論文で想定している非一様性としては、一様電場、一様磁場、ひずみ勾配などがあるが、本論文で構築した理論はそれらを全て含む一般理論であり、さらに元素組成の勾

配など、今後実験で実現できる可能性のある非一様性も含んでいる、適用範囲の広い理論であることを述べている。

付録A章「Electric polarization induced by spatial inhomogeneities in our model」では、第3章で用いた2次元系のモデルに関して、分極の表式を実際に評価する計算過程を詳細に示している。付録B章「Spin magnetization induced by spatial inhomogeneities in our model」では、第4章で用いた1次元系のモデルに関して、非一様性に誘起されたスピン磁化の表式を実際に評価する計算過程を詳細に示している。

以上をまとめると本論文では、一般的な空間非一様性に対して、電気分極・スピン磁化・電流などが誘起される現象について、線形応答理論に基づき一般論を構築している。この理論は一般の系に広く適用でき、一様電場、一様磁場、ひずみ勾配への応答など従来研究されている応答理論を包含するとともに、それ以外のさまざまな非一様性についても適用できる。そのため今後、非一様性誘起の物理現象として実験への提案をも行うことができ波及効果が大きい。このように空間非一様性のある外場により電気分極やスピン磁化などを誘起する基本的・普遍的な性質の理論構築を行った本論文は、理学の発展に大いに資するものと判定され、本論文は博士（理学）の学位論文として十分価値があると認められる。

注意：「論文審査の要旨及び審査員」は、東京科学大学リサーチポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。