

軟 X 線で決定する物質のバンドトポロジー

— トポロジーは見かけより中身が大事 —

極限コヒーレント光科学研究センター 黒田 健太、近藤 猛

概要：

トポロジカル絶縁体を代表とするトポロジカル物質の非自明なバンドトポロジーは、強いスピン軌道結合によって生じるバンド反転で決まる。これに伴い、結晶表面に特異な電子状態が現れることから [1]、「見かけ(表面)で中身(バルク)のトポロジーを知る」ことが可能であり、数十 eV 程度の真空紫外光を用いた表面敏感な角度分解光電子分光 (ARPES) で観測される電子状態を表面状態のバンド計算と比較して、バンドトポロジーの同定が行われてきた。しかしながら、狭ギャップ半導体や半金属などでのバンド計算では、予測される表面状態やトポロジーが計算パラメータに敏感に変化してしまうため、これまで行われてきた見かけに頼る方法では不十分であった。実際に、La モノプニクタイトや Ce モノプニクタイトなどの半金属物質では、全く矛盾した解釈が報告されており [2-4]、「見かけで中身を知る」測定ではなく、「中身を直接知る」測定が求められていた。

本研究で我々は、励起光として数百 eV 程度の軟 X 線高輝度放射光を用いたバルク敏感 ARPES を利用することで、バンドトポロジーに対する直接的な実験を Ce モノプニクタイトで実現させた [5]。この実験は、Ce モノプニクタイト物質群 (CeP, CeAs, CeSb, CeBi) のバルク電子構造の

系統的な観察に基づく。そしてプニクトゲンのスピン軌道結合効果によるバンド反転を直接観ることで、トポロジカル相図を実験的に決定するものである。これにより、見かけの測定に頼らない、バンドトポロジーを直接決定する新たな実験方法を確立した。

実験結果：

実験は大型放射光施設 SPring-8 の高輝度軟 X 線固体分光ビームライン BL25SU にて開発された高効率・軟 X 線 ARPES 装置を用いて行った。Ce モノプニクタイトの電子構造は、3 次元ブリルアンゾーンの対称点 Γ 点にトップを持つプニクトゲン p 軌道由来のホールバンドと X 点にボトムを持つ Ce t_{2g} 軌道由来の電子バンドがエネルギー的に重なっており、キャリア補償型の半金属として特徴づけられる。そこで、放射光の利点である波長可変性を発揮させ、それぞれの物質で運動量対称点にあるこれらの電子構造をカットするように軟 X 線の波長を選択して ARPES 測定を行った。

図 1 に軟 X 線 ARPES で得られた半金属的なバルク電子構造の系統的な変化をまとめた。CeP から CeBi まで系統的に観察することで、プニクトゲンのスピン軌道結合がバンド構造に与える効果が見えてくる。スピン軌道結合の小

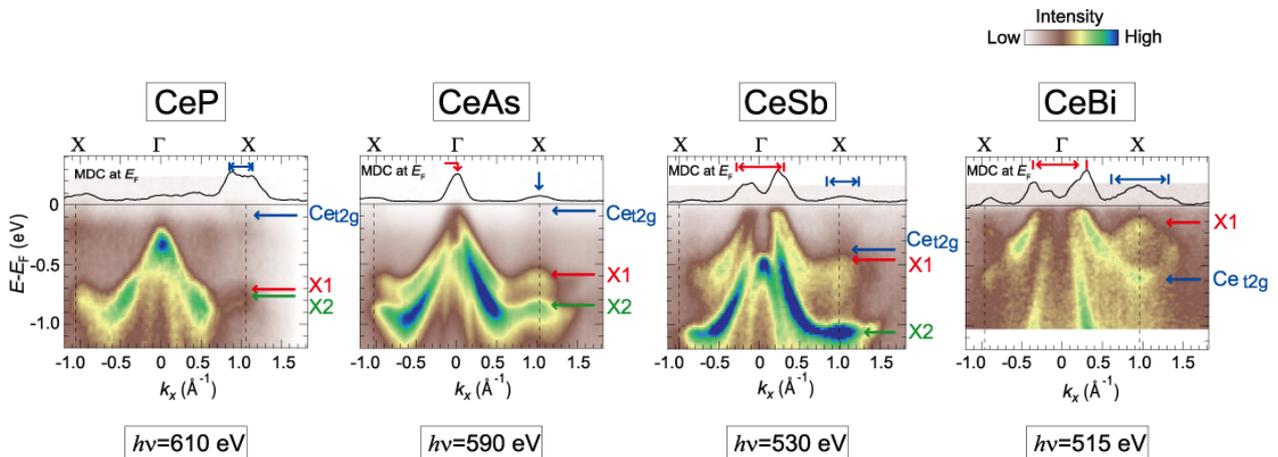


図 1：放射光軟 X 線 ARPES で観測された Ce モノプニクタイトの半金属的なバルク電子構造の系統的な変化。 Γ 点にバンドトップを持つプニクトゲン p 軌道由来のホールバンドと X 点にバンドボトムを持つ Ce t_{2g} 軌道由来の電子バンドが観測されている。図上にフェルミエネルギー (E_F) での ARPES 強度の運動量分布 (MDC) をプロットした。CeSb や CeBi では、Sb と Bi の強いスピン軌道結合とキャリア補償型の半金属バンド効果により、ホールポケット (赤線矢印) と電子ポケット (青線矢印) が形成されている。

