

強磁性スピネル物質 HgCr_2Se_4 は磁性ワイル半金属か？ 磁性半導体か？

極限コヒーレント光科学研究センター 田中 宏明
量子科学技術研究開発機構 高崎量子応用研究所 明石 遼介
極限コヒーレント光科学研究センター 松永 隆佑
極限コヒーレント光科学研究センター 近藤 猛
広島大学 大学院先進理工系科学研究科 黒田 健太

要旨

固体結晶中の電子は、結晶の並進対称性に由来する波数で特徴づけられる。電子のエネルギーと波数の関係を表すバンド分散は、固体結晶の性質を議論する基盤であるため非常に重要である。そのバンド分散を実験的に直接観測できるのが、角度分解光電子分光法(angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES)である。

本研究[1]は、強磁性スピネル HgCr_2Se_4 のバンド分散を ARPES により観測した結果を報告するものである。 HgCr_2Se_4 は、2つのバンド分散が3次元波数空間の1点で交わるワイル点を持つ「ワイル半金属」であることが理論的に提案されていた物質であり[2]、この提案はワイル半金属の中で最初期の研究として広く知られている。しかし、本研究で我々は、ARPES により HgCr_2Se_4 のバンド分散を観測することに成功し、予測されていたワイル点が見えないことを見出した。また、電気伝導測定・赤外領域の吸収分光測定・先行研究より精密なバンド計算によって、この結果を裏付けることにも成功した。

研究背景(1): ワイル半金属

2つのバンドが交差している時、一般的には有限の飛び移り積分によって波動関数が混成しエネルギーギャップが開く。ギャップが開かずワイル点を生じるメカニズムは、次のように説明される[3]。近接した2つのバンドのみを考えると、そのハミルトニアンは 2×2 行列であり単位行列・パウリ行列の線形結合で表せる。線形結合係数は波数の関数であり、3つのパウリ行列に掛かる係数がすべてゼロになるところはバンドが縮退するが、3次元波数空間であれば自由度が3あるため条件を満たす点が存在する、ということである。このような偶然縮退に由来するワイル点以外にも、対称性に由来して高対称点でバンドが縮退することもある。

ワイル半金属は、フェルミ準位付近の価電子バンドにワイル点がある物質であり、特にワイル点に由来して特異な

物性を示すものが注目を集めている。磁性を持ち時間反転対称性を持たないワイル半金属の場合、波数空間の仮想磁場(ベリー曲率[4])に由来する異常ホール効果はその代表例である。ワイル点でベリー曲率は発散するため、価電子帯にあるワイル点は異常ホール伝導度を大きくすることが期待される。実際、大きな異常ホール効果を示す物質で価電子帯にワイル点を持っていることが報告されてきた[5-8]。

研究背景(2): HgCr_2Se_4 のバンド分散

HgCr_2Se_4 は強磁性スピネル物質であり、そのバンド分散は上に凸の形状をしたホールバンドと下に凸の形状をした電子バンドを持つ。先行研究ではこれらのバンドがフェルミ準位付近で交差しワイル点を生じると予測されており[2, 図 1(a)]、異常ホール効果を示すことも報告されている[9]。しかし、異常ホール効果の温度依存性などから、ベリー曲率由来ではなく不純物による散乱由来ではないかという研究もある[10, 11]。さらに、過去に遡ればこの物質はホールバンドと電子バンドの間に直接ギャップがある磁性半導体あるいは絶縁体として扱われており[12]、赤外吸収分光によりバンドギャップが $0.3 \sim 0.8$ eV 程度であり温度に大きく依存することが報告されている[13]。このように、 HgCr_2Se_4 はバンドギャップを持つ半導体[図 1(b)]であるかバンドギャップが閉じたワイル半金属であるかが決着しておらず、ARPES によるバンド分散の直接観測が待ち望まれていた。

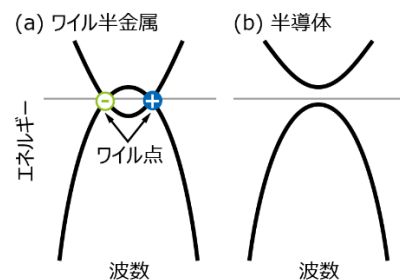


図 1: HgCr_2Se_4 について予測されてきたバンド分散の模式図。(a) ワイル半金属の場合。(b) 磁性半導体の場合。

- [7] E. Liu *et al.*, Nat. Phys. **14**, 1125 (2018).
- [8] D. F. Liu *et al.*, Science **365**, 1282 (2019).
- [9] T. Guan *et al.*, Phys. Rev. Lett. **115**, 087002 (2015).
- [10] S. Yang *et al.*, Phys. Rev. Lett. **123**, 096601 (2019).
- [11] S. Li and A. Levchenko, Phys. Rev. Lett. **124**, 156802 (2020).
- [12] P. K. Baltzer *et al.*, Phys. Rev. Lett. **15**, 493 (1965).
- [13] T. Arai *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **34**, 68 (1973).
- [14] L. Goldstein *et al.*, J. Appl. Phys. **49**, 1474 (1978).
- [15] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [16] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [17] M. Ernzerhof and G. Scuseria, J. Chem. Phys. **110**, 5029 (1999).
- [18] M. Marsman *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 064201 (2008).
- [19] J. Heyd *et al.*, J. Chem. Phys. **118**, 8207 (2003), *ibid.* **124**, 219906 (2006).
- [20] J. P. Perdew, *et al.*, J. Chem. Phys. **105**, 9982 (1996).

