

空間反転対称性の破れた系における Weyl 点近傍のスピ構造

石井史之¹, 小鷹浩毅²

¹ 金沢大学 理工研究域 数物科学系

² 金沢大学大学院 自然科学研究科 数物科学専攻

時間反転対称性を示し、空間反転対称性をもつ空間群の結晶では、そのブロッホ状態の固有値はその対称性からそれぞれ $E(\mathbf{k}, \uparrow) = E(-\mathbf{k}, \downarrow)$, $E(\mathbf{k}, \uparrow) = E(-\mathbf{k}, \uparrow)$ の関係を満たす。その結果、 $E(\mathbf{k}, \uparrow) = E(\mathbf{k}, \downarrow)$ と、全ての \mathbf{k} 点でスピ縮退を起こす。一方で、空間反転対称性を破った系では、 $\mathbf{k} = 0$ ならびに時間反転操作によって $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} \pm \mathbf{G}$ へと変換される時間反転不変な \mathbf{k} 点を除いては、 $E(\mathbf{k}, \uparrow) \neq E(\mathbf{k}, \downarrow)$ となりスピ分裂を生ずる。特に物質の表面ではこれらは Rashba 効果として知られており、近年研究が盛んにおこなわれている。我々はこれまで、ビスマス薄膜について Rashba 効果、すなわちスピ分裂と二次元 \mathbf{k} 空間におけるスピ構造について、密度汎関数法に基づく第一原理計算手法によって調べてきた [1, 2]。特に、フェルミ線上のスピ構造を詳しく解析するプログラムの開発をおこない [2, 3]、高山らのビスマス多層膜のスピ角度分解光電子分光の実験結果を説明した [4, 5]。

このように表面系、すなわち二次元系におけるスピ分裂とスピ構造の第一原理的研究は多くなされてきたが、3次元系における同様の研究は第一原理計算手法によって殆どおこなわれてこなかった。本発表では、反転対称性を破った系におけるスピ分裂とスピ構造について系統的に調べたのでそれらについて報告する。その中で特に興味深い系として、Weyl ハミルトニアンで記述できるバンド分散とスピ構造をもつ系がある。すなわち、系の有効ハミルトニアンが $H_{eff} \propto (k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + k_z \sigma_z)$ で与えられる系である。ここで $\mathbf{k} = 0$ の縮退点は Weyl 点と呼ばれる。そのような系の一例として、空間群 P2₁3 (No. 198) の結晶についてスピ軌道相互作用を考慮した電子状態計算をおこない、そのバンド構造、スピ分裂、スピ構造を明らかにした。図に、実空間でスキルミオン相が発見されている FeGe と同じ結晶構造である B20 型 CoSi のバンド構造とその Γ 点近傍のフェルミ面上のスピ構造を示した。図 (a) のバンド構造より、フェルミ準位 ($E = 0$ eV)、 Γ 点近傍で線形分散をもった分裂したバンドが在ることがわかる。また図 (b) に示したフェルミ面上のスピ構造からスピ方向はフェルミ面から外向きに向かっている。また、図には示さないが、分裂したバンドに対応する反対向きのスピをもつフェルミ面も存在する。これらの結果から、系は Weyl ハミルトニアンで記述できると考えられる。同じ空間群をもつ他物質や、他の Weyl 点のある空間群についても系統的に調べたので、それらについて紹介する。

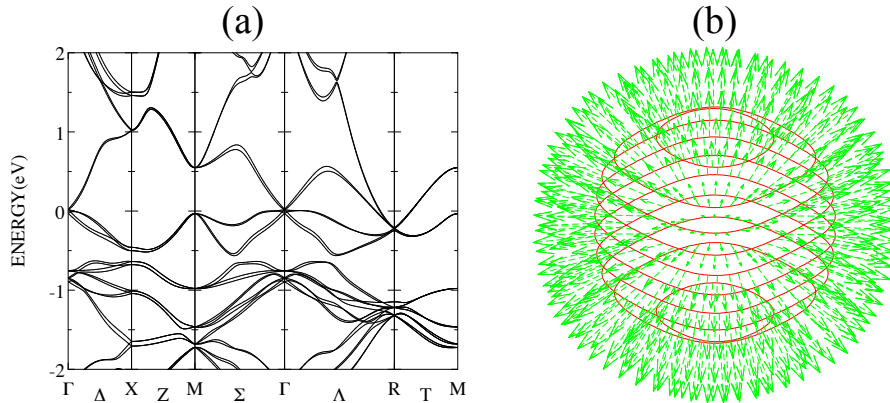


Figure 1: B20 型 CoSi の (a) バンド構造。フェルミエネルギー (E_F) は $E_F = 0$ eV としてある。(b) Weyl 点近傍のフェルミ面とフェルミ面上のスピ構造。

References

- [1] H. Kotaka, F. Ishii, M. Saito, T. Nagao and S. Yaginuma, Jpn. J. Appl. Phys. **51**, (2012)025201.
- [2] H. Kotaka, F. Ishii, M. Saito, Jpn. J. Appl. Phys. **52**, (2013)035204.
- [3] T. Ozaki et al., [http:// www.openmx-square.org/](http://www.openmx-square.org/)
- [4] A. Takayama, T. Sato, S. Souma and T. Takahashi, Phys. Rev. Lett. **106**, (2011)166401.
- [5] H. Kotaka, F. Ishii, M. Saito, in preparation.