

# Weyl半金属：イントロダクション

## バンドとFermi準位

原子が複数個集まって軌道が相互作用すると、電子のエネルギー準位が分裂します。多数の原子が集まれば、エネルギー準位もまた多数に分裂します。このエネルギー準位の集まりを**バンド（エネルギーバンド）**と言います。バンドを考える理由は、多くの物質の性質を理解するために効果的だからです。またバンドには、エネルギーの低い下側から順番に電子が詰まっていきます。絶対零度においては電子が下の準位からぎっしりと詰まっており、その中で最高の準位を**Fermi準位**、対応するエネルギーをFermiエネルギー  $E_F$  と言います。より大雑把には「これより上の準位にはほとんど電子が存在しない」という目安を与える準位がFermi準位です。熱を加えたり、電子を付加・除去したり、物質の構造を変化させることによってバンドの形は変化します。電子の入っているバンドとFermi準位の相対的な位置関係は物性を考える上で大切です。

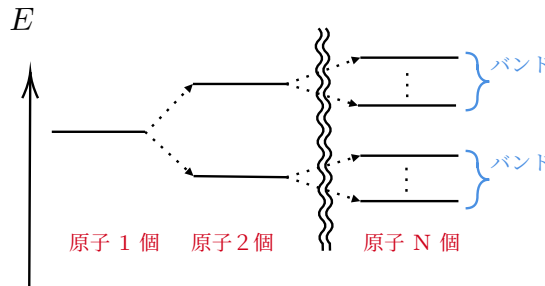


Figure 17. バンドの概念図.

## 半金属

絶縁体・半導体・金属・半金属をバンドによる概念図で見てください。絶対零度のときに電子で完全に占有されるバンドを**価電子帯**、その上にあるバンドのうち最も低い準位にあるバンドを**伝導帯**と言います。伝導帯に電子があると電流を流せます。

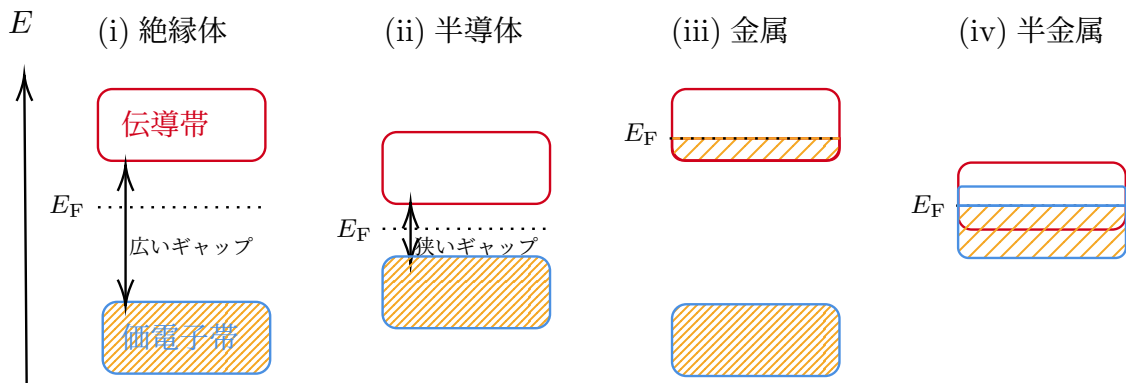


Figure 18. (i) 絶縁体. 両バンドは広いギャップで隔たっているため、電子が伝導帯へと移動できません。そのため伝導帯に電子が存在できず、電流が流れません。(ii) 半導体. 両バンドは狭いギャップで隔たっているため、適切な電圧をかけると電子が伝導帯に移動できるようになります。(iii) 金属. 伝導帯にFermi準位が存在します。伝導帯の電子が移動できるので電流が流れます。(iv) 半金属. 両バンドの一部が重なっているか、接しています。これは構造の歪みや、原子層間の相互作用などが原因です。金属と非金属の中間的な性質を示すことが知られています。また通常の金属では電荷が電子または正孔の一種類で運ばれるのに対し、半金属では両方によって電荷が運ばれます。このことに起因して、半金属は金属にはない電気伝導性や熱電特性を示すようになります。

# Weyl半金属：本論（発展的！）

## Dirac半金属

まず，Fermi準位付近のバンド構造が特別な対称性を持つ以下のハミルトニアンで記述できる系を考えます。

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{\mu=0}^3 R_{\mu}(\mathbf{k})\alpha_{\mu}, \quad (3)$$

$$\alpha_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

ただし， $\mathbf{k}$ は波数， $\sigma_i$ はPauli行列， $R_{\mu}$ は係数です。式(3)の固有値が0となる $\mathbf{k}$ が在るなら，その点を**Dirac点**と呼びます。Dirac点ではエネルギーが4重縮退しています。Dirac点を持つ半金属を**Dirac半金属**と言います。

## 磁性不純物の導入：スピン分裂

スピン分裂は(3)に以下のように項 $b\Sigma_3$ を加えることで記述されます。

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{\mu=0}^3 R_{\mu}(\mathbf{k})\alpha_{\mu} + b\Sigma_3 \quad (b \neq 0), \quad (5)$$

$$\Sigma_3 = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix}$$

また，式(5)の固有値が0となる $\mathbf{k}$ が在るなら，その点を**Weyl点**と呼びます。Weyl点ではエネルギーが2重縮退しています。Weyl点を持つ物質を**Weyl半金属**と言います。

波数 $\mathbf{k}$ に対してエネルギー準位を図示したのがFigure 19です。

## Weyl半金属の特性

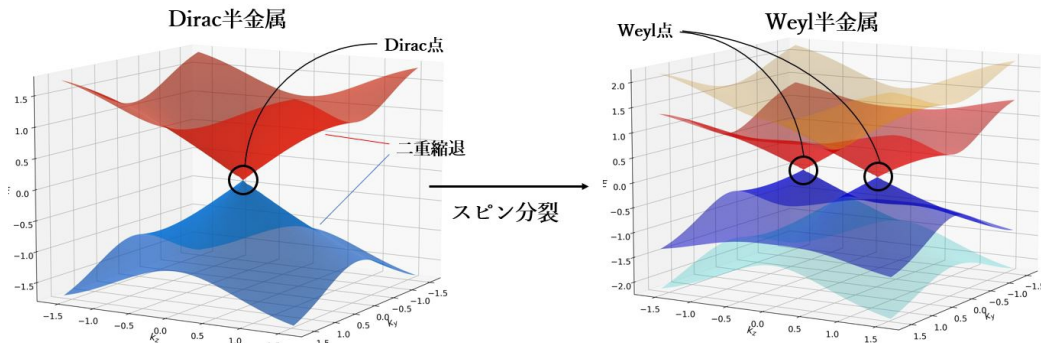


Figure 19. Dirac半金属にスピン分裂項を導入した際のバンド構造の変化。

Weyl半金属に特徴的な現象に，**異常Hall効果**や**異常Nernst効果**があります。Hall効果は，電流と磁場があると両者と垂直に電位差が生じる現象で，Nernst効果は，熱流と磁場があると両者に垂直に電位差が生じる現象です。磁化を持つ物質の場合は外部磁場に**磁化の寄与**が加わり，**通常のHall/Nernst効果よりも大きな電位差が生じます**。そのため「異常」Hall効果，「異常」Nernst効果と呼ばれます。特に，強磁性体では外部磁場を0にしても磁化が残るため，電流や熱流があれば電位差が生じます。

磁化の存在で異常Hall/異常Nernst効果が起こると説明しましたが，Weyl半金属では全く別の機構でこれらの効果が生じます。実際， $\text{Mn}_3\text{Sn}$ は反強磁性体であるにもかかわらず両効果が観測されています[4]。これはWeyl点が仮想的な磁気モノポールとして振る舞うことが原因と考えられています。Weyl半金属のこれらの性質は低消費電力で高速なメモリなど，様々なデバイスへの応用が見込まれています。

## 参考文献

- [1] 浅野建一『固体電子の量子論』（東京大学出版会，2021）。
- [2] 野村健太郎『トポロジカル絶縁体・超伝導体』（丸善出版株式会社，2018）。
- [3] N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, Rev. Mod. Phys. **90**, 015001 (2018)。
- [4] T. Chen, T. Tomita, S. Minami, M. Fu, T. Koretsune, M. Kitatani, I. Muhammad, D. Nishio-Hamane, R. Ishii, F. Ishii, R. Arita, and S. Nakatsuji, Nat. Commun. **12**, 572 (2021)。