単純な酸化物 ReO。で見つかったディラック電子の鎖

[1] 要旨

近年、固体のバンド構造中に現れる相対論的粒子であるディラック電子が注目され、ディラック電子に由来した超高易動度や巨大磁気抵抗を示す物質が盛んに研究されている。特に、ノンシンモルフィックな結晶の対称性によって保護された「砂時計型」のバンド構造に由来するディラック電子は、スピン軌道相互作用が働いてもその性質が失われないことから重い元素を含む化合物において注目されている。

今回、レニウムの単純な酸化物の一つである ReO_2 の単結晶が作製され、22000%に達する巨大な磁気抵抗と量子振動測定によるフェルミ面の観測が報告された。電子状態計算との比較から、 ReO_2 はフェルミ準位近傍に砂時計型のバンドを持ち、砂時計の交点が 2 種類のループを形成して連なった「ディラックループ鎖」という特殊な電子構造を持つことが明らかになった。

[2] 本文

固体のバンド構造の中で直線バンドが交点を持つと、相対論的粒子であるディラック電子が現れる。黒鉛の単原子層(グラフェン)などのようにフェルミ準位近傍にバンド交点がある物質は、ディラック電子に由来した超高易動度や巨大磁気抵抗を示し注目が集まっている。しかし、このバンド交点にスピン軌道相互作用が働くとギャップが開き、ディラック電子の特性が失われてしまう。ReO2(図1左)のようなノンシンモルフィックな結晶では、対称性によって保護された「砂時計型」のバンド構造(図1右)に由来するディラック電子構造がスピン軌道相互作用が働いてもギャップが開かずその性質が失われないことから特に注目されている。理論研究から砂時計型のバンド構造を有する物質の候補は多数提案されているが、実験的検証は限られている。

2017年に中国の理論グループが、単純なレニウム酸化物である ReO_2 においてフェルミ準位近傍 に砂時計型のバンド分散が存在することを指摘した。さらに面白いことに、砂時計バンドの交点にあるディラック点がループを描き (ノーダルラインを形成し)、2 種類のループが鎖のように連なった「ディラックループ鎖」という特殊な電子構造 (図 1 右)を持つと予言した。

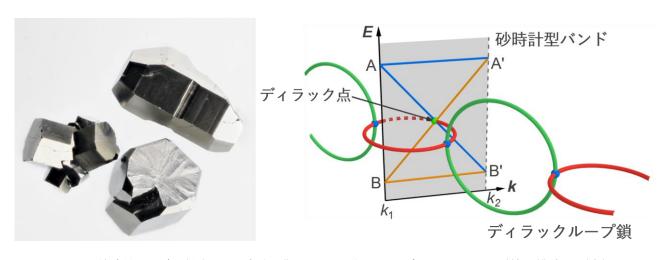


図 1. ReO₂の単結晶の写真(左)と砂時計分散によって作られるディラックループ鎖の模式図(右)

ReO₂ は古くから知られる物質で 50 年以上前に抵抗率の温度依存性が報告されているが、試料の純良性も良くなく、ディラック電子の存在を示唆するような実験結果は得られていなかった。

最近、東京大学物性研究所と物質材料研究機構、大阪大学産業科学研究所およびスピントロニクス学術連携研究教育センターの研究グループは、化学気相輸送法によって ReO₂ の純良単結晶を作製することに成功し(図1左)、これらを用いた物性測定の結果、22000%に達する巨大磁気抵抗や量子振動を観測した。電子状態計算から、確かにフェルミ準位近傍に砂時計型のバンド構造があり、観測された特異な物性はディラックループ鎖に由来している可能性が高いことが明らかにされた。この成果は、JPSJの 2021 年 9 月号に掲載された。

今回の研究成果は、ReO₂のようにスピン軌道相互作用が強い原子番号の大きな遷移金属化合物においても、砂時計型のバンド構造に由来したディラック電子の性質は失われず、巨大磁気抵抗などの特異な物性が現れることを示した。今後のさらなる研究において、特殊な表面状態や輸送特性の角度依存性などのディラックループ鎖に由来した新奇物性の観測が今後期待される。この成果は、ノンシンモルフィックな結晶の対称性に着目した新たなディラック電子系物質の探索指針を与えるものである。また、これまで発見された多くのディラック電子を有する物質は化学的に不安定なものが多く、空気中ですぐに劣化してしまうが、ReO₂ は酸化物なので非常に安定である。今回の発見は、材料の観点からも、酸化物ベースのディラック電子系物質に注目を喚起する成果である。

原論文(8月17日公開済)

Extremely Large Magnetoresistance in the Hourglass Dirac Loop Chain Metal β -ReO₂

Daigorou Hirai, Takahito Anbai, Shinya Uji, Tamio Oguchi, and Zenji Hiroi: J. Phys. Soc. Jpn. **90**, 094708 (2021).

<情報提供:平井 大悟郎(東京大学物性研究所)>