

3次元ラッシュバ物質 BiTeBr における室温高圧下 X線回折 X-ray diffraction of BiTeBr at high pressures and room temperatures

大村彩子^{1,*}, 落合崇幸², 加納学³, 中野智志⁴, 中山敦子^{1,5}, 石川文洋², 山田裕², 笹川崇男³

¹新潟大学研究推進機構超域学術院, 〒950-2181 新潟市西区五十嵐2の町8050番地

²新潟大学理学部物理学科, 〒950-2181 新潟市西区五十嵐2の町8050番地

³東京工業大学応用セラミックス研究所, 〒226-8503 横浜市緑区長津田町4259

⁴物質・材料研究機構, 〒305-0044 つくば市並木1-1

⁵岩手大学理工学部物理・材料理工学科, 〒020-8550 盛岡市上田4-3-5

Ayako Ohmura^{1,*}, Takayuki Ochiai², Manabu Kanou³, Satoshi Nakano⁴, Atsuko Nakayama^{1,5},
Fumihiko Ishikawa², Yuh Yamada², Takao Sasagawa³

^{1,2}Niigata University, 8050, 2-no-cho, Ikarashi, Nishi-ku, Niigata, 950-2181, Japan

³Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuta, Midori-ku, Yokohama, 226-8503, Japan

⁴NIMS, 1-1 Namiki, Tsukuba, 305-0044, Japan

⁵Iwate University, 4-3-5 Ueda, Morioka, 020-8550, Japan

1 はじめに

極性半導体 BiTeX ($X = \text{Br}, \text{I}$) は空間反転対称性のない結晶構造 (空間群 $P3m1$) をもつ 3次元ラッシュバ物質として知られる[1]。BiTeX では、圧力を加えると数万気圧でバンドギャップの開閉に伴い、自明な半導体からトポロジカル絶縁体へと転移する“トポロジカル相転移”が理論予測されている[2]。トポロジカル絶縁体は、構成元素の強いスピン軌道相互作用に起因するバンド反転によって波動関数のパリティが「奇」となることが要因とされている。ゆえに、圧力誘起トポロジカル相転移の探索では、物性だけでなく、結晶構造の圧力変化を調べることもまた重要となる。そこで、本研究では、BiTeBr ($a = 4.2662(1) \text{ \AA}$, $c = 6.487(1) \text{ \AA}$ [3]) におけるトポロジカル相転移探索のために X線回折を行った。

2 実験

室温高圧力下の放射光 X線回折は、KEK-PF の AR-NE1 で行った。圧力発生にはダイヤモンドアンビルセルを用い、試料は凍結粉碎により微粉末化した。試料室には粉末試料と圧力測定用のルビー、および圧力媒体として物材機構にて約 180 MPa まで圧縮した He を封入した。入射光は、波長 $\lambda = 0.41718(9) \text{ \AA}$ ($E = 29.723 \text{ keV}$) に単色化し、ビームサイズは $75 \times 75 \text{ \mu m}^2$ とした。露出時間は 5 分であり、回折像はイメージングプレートで検出した。

3 結果および考察

図 1, 2 は、加圧過程 BiTeBr の X線回折パターンおよび格子定数の圧力変化である。BiTeBr は 8 GPa 付近まで $P3m1$ 構造を保持する一方、格子定数の比 c/a が 2-3 GPa で極小を示すことがわかった。我々が、実験的に得た格子定数を用いてバンド計算を行った

ところ、およそ 3 GPa でバンドギャップの開閉が生じてトポロジカル相転移が生じることが判明した。

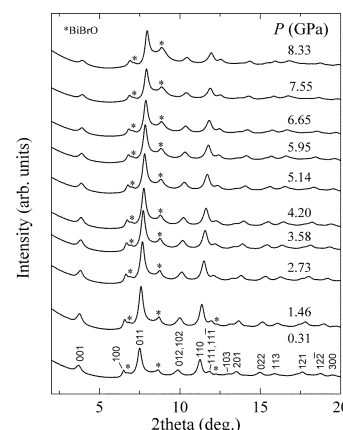


図 1 : BiTeBr の室温加圧過程の X線回折パターン

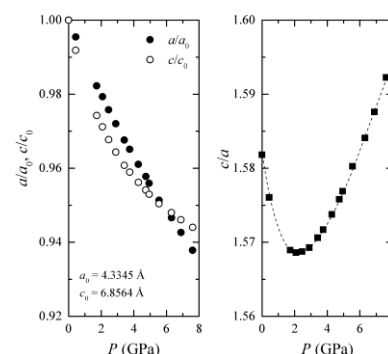


図 2 : $P3m1$ 構造の格子定数 a, c とその比 c/a

参考文献

- [1] Ishizuka *et al.*, Nat. Mater. **10**, 521 (2011).
[2] Bahramy *et al.*, Nat. Commun. **3**, 679 (2012).
[3] Shevelkov *et al.*, J. Sol. Stat. Chem. **115**, 397 (1995).

* ohmura@phys.sc.niigata-u.ac.jp