

2 種類の変調が競合する LaTeSb と ZrSnTe の精密構造解析 Structure Analyses of ZrSnTe, RTeSb with two Independent Competing Superstructure

野上由夫¹, 近藤隆祐¹¹岡山大学 理学部 物理学科

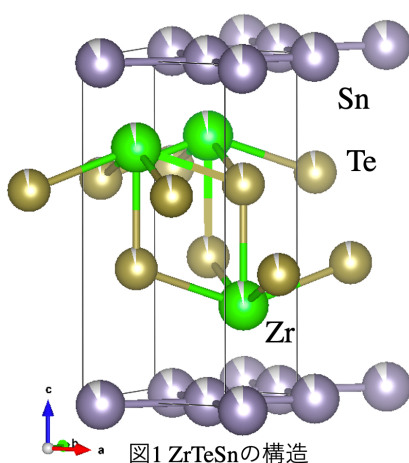
〒700-8530 岡山市北区津島中 3-1-1

Yoshio NOGAMI^{1,*} and Ryusuke Kondo²¹Physics Department, Faculty of Science, Okayama University

3-1-1 Tsushimanaka, Kita, Okayama 700-8530, Japan

1 はじめに

2005 年に理論的にトポロジカル絶縁体 (TI) が予言された。スピン軌道相互作用が強い系では、バンド反転によりトポロジカル不変量 Z_2 が 1 に変化し、真空などの $Z_2=0$ 絶縁体と連続的に変化することは不可能でその界面では時間反転対称性に保護されたディラックコーンを形成する。



CDW が観測される場合があり、これをうまく利用するとフェルミ面の変化を直視でき、 x を変化したときにディラックコーンとフェルミ準位との関係を推測可能である。

2 実験

測定は LaSbTe については、主として岡山大学自然科学研究センター分析計測分野のコンフォーカル CCD 回折計で衛星反射計測及び超格子構造解析を行い、ZrSnTe については主として KEK-PF、BL-8A の 16.53 keV の放射光と巨大ワイセンベルクカメラを用いて構造解析をおこなった。なお、Y の吸収や蛍光をへらすために波長は Y の K 吸収端より下の約 0.75 Å でおこなっている。

3 解析

Y 及び Sb をトープした ZrSnTe の構造解析結果を

	Pure	Sb(10%)	Sb(20%)	Y(10%)
R1	0.0374	0.0218	0.052	0.0302
WR2	0.0928	0.048	0.1459	0.0616
a(A)	4.037	4.045	4.046	4.043
c(A)	8.685	8.678	8.681	8.687
V(A3)	141.5	142	142.1	142
Zr(x)	0.75	0.75	0.75	0.75
Zr(y)	0.75	0.75	0.75	0.75
Zr(z)	0.2644	0.2649	0.2646	0.2643
Te(x)	0.75	0.75	0.75	0.75
Te(y)	0.75	0.75	0.75	0.75
Te(z)	0.6196	0.6194	0.6192	0.6195
Sn(x)	0.75	0.75	0.75	0.75
Sn(y)	0.25	0.25	0.25	0.25
Sn(z)	0	0	0	0

表1 ドープした ZrSnTe の構造

その後、トポロジカル相転移点が空間対称性により保護され安定化したトポロジカル半金属も提案され実際に観測されている[1]。トポロジカル半金属は表面効果ではなくバルクであり、高移動度や非飽和直線磁気抵抗など TI には見られない特徴を示す。更に磁場印加や磁性元素により、ワイル半金属へ変化しフェルミアーク表面状態なども観測されており、新素子などの応用もおおいに期待される。

物質設計段階ではトポロジカル半金属と期待されても、本当にトポロジカル半金属の物性を示すためには以下の条件がつく。1) スピン軌道相互作用の強さが適当であり、トポロジカル相転移を起こせる、2) キャリア数が適当でありちょうどディラック点にフェルミ準位がくる、3) ディラックコーンを保護するのに十分な空間対称性を持つ。

我々は十分高い対象性を持つ ZrSiS 型結晶[2]に属する ZrSnTe (空間群 $P4/nmm$) について構成元素を一部分 Y または Sb に置換し、キャリア数と体積を変化させた。同じく同型構造の LaSbTe について Sb:Te 比を変え、電子構造およびフェルミ準位を変化させて構造を精密に観測した。なお LaSbTe では

表 1 に示すが、ドーピングにより原子位置および格子定数の変化はわずかである。これは ZrSnTe においては構造不安定性が極めて小さいことを示している。

これに対して LaSbTe では Sb:Te 比を変化させることにより二つの変調が観測された。この内 $q_1=(q_1\ 0\ 0)$ は伝導面内の変調で、バンド計算の結果のネスティングベクトルとほぼ符合することから CDW であると考えられる。もう一つの変調は $2c$ の整合超格子であり、波数で言えば $q_2=(0\ 0\ 1/2)$ となる。この $2c$ 整合超格子は、本研究で初めて発見されたものである。

例えば $\text{LaSb}_{1-x}\text{Te}_{1+x}$ では $x=0.6, -0.5, -0.4, -0.2, -0.05$ では $2c$ の超格子構造が形成される。超格子構造と基本構造とを比較するために、LaTeSb と $\text{LaTe}_{0.95}\text{Sb}_{1.05}$ との構造解析結果を表 2 に示す。後述する LaTe_2 の結果も合わせて記述している。

	LaTeSb	Sb(+0.05)	LaTe2
R1	0.0181	0.0179	0.0215
WR2	0.0633	0.0676	0.0964
a(A)	4.406	4.395	4.452
b(A)	4.406	4.393	4.405
c(A)	9.561	19.242	9.366
V(A3)	186.6	371.5	187.9
La(x)	0.75	0.7499	0.75
La(y)	0.75	0.4864	0.75
La(z)	0.2773	0.639	0.2754
Te(x)	0.75	0.7502	0.75
Te(y)	0.75	0.4876	0.75
Te(z)	0.62732	0.8132	0.6305
Sb/Te(x)	0.75	0.7472	0.75
Sn/Te(y)	0.25	-0.0234	0.25
Sn/Te(z)	0	0.5011	0.001
SG	P4/nmm	P212121	Pmmn

表 2 $\text{LaSb}_{1-x}\text{Te}_{1+x}$ の構造解析結果

$2c$ の超格子により空間群は $P4/nmm$ から $P2_12_12_1$ に変化し、反転対称や 4 回軸も失われて対称性が低下し、ディラックコーンが保護されずギャップが開きトポロジカル半金属ではなくなっているであろう。これらの同型物質では、 $2c$ の超格子構造がない領域での試料作成をおこない低温物性測定をおこなうべきであることがわかる。Sb が多い側の $\text{LaSb}_{1-x}\text{Te}_{1+x}$ の構造について考察してきたが、Te が多い側、具体的には、 $x=0.2$ 以上では、基本構造に加え CDW による不整合変調が形成される。この伝導面内の X 線写真を図 2 に示した。 $x=0.2$ 以上ではブラッグ反射の 4 方に衛星反射点が観測される。これは母結晶が正方晶系であるため、 a 方向と b 方向が縮退しており、 $q_1=(\pm q_1\ 0\ 0)$ と $q_1=(0\ \pm q_1\ 0)$ の両方がブラッグ反射に

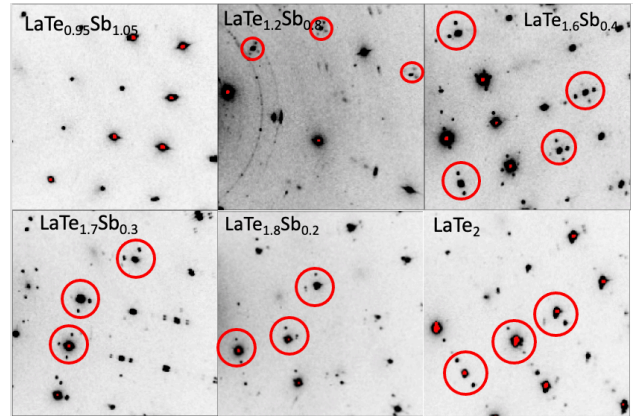


図2 $\text{LaSb}_{1-x}\text{Te}_{1+x}$ の CDW。Te 量によって波数も増加する

随伴して観測されているのであろう。図 2 に示す通り $\text{LaSb}_{1-x}\text{Te}_{1+x}$ の x が増加するに従って、 q_1 の値は増加し、 LaTe_2 では 0.25 に達する。また CDW 波数は一軸成分しか持たないので、母体格子の a 方向と b 方向との縮退がとけ、 $P4/nmm$ から $Pmmn$ に対称性が低下する (表 2)。つまり変調構造によるフェルミ面の折りたたみだけでなく、平均構造の対称性低下が起こっており、これがディラックコーンに影響を及ぼしている可能性は高い。

4 まとめ

ZrSnTe では元素置換に対し格子定数も原子位置もほとんど影響は見られずほぼ同型構造であると考えられる。LaSbTe では Sb 量が増えると $2c$ 超格子、Te 量が増えると面内一軸 CDW が形成され、平均構造の対称性まで変化してしまう。対称性に敏感なトポロジカル半金属の研究では、予め高輝度放射光などを用いて変調構造や超格子構造の形成の有無を調べる必要がある。

参考文献

- [1] Z. Wang et al., Phys. Rev. B 85 (2012) 195320 and Phys. Rev. B 88 (2013) 125427.
- [2] C. Wang et al., Inorg Chem 34 (1995) 5524

* nogami@science.okayama-u.ac.jp