

Sn の準安定性の起源としてのトポロジカル相転移

Topological phase transition as the origin of metastability of Sn

東大工¹, NIMS², 理研 CEMS² ◯(M2)花田 達希¹, 大池 広志², 平山 元昭^{1,3},

Univ. Tokyo¹, NIMS², RIKEN CEMS³ ◯Tatsuki Hanada¹, Hiroshi Oike², Motoaki Hirayama^{1,3}

E-mail: nad-tat1025@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

物性物理学の究極的な目標は、新奇機能物性を創出し、その物性を自在に制御することである。従来、物性制御は平衡熱力学の枠組みで行われ、最安定な物質相に基づく設計が中心であった。一方で、光誘起相転移 [Y. Tokura. JPSJ, 75, 011001 (2006)] やクエンチ法 [F. Kagawa, and HO. Adv. Mater. 29, 1601979 (2017)] といった物質相の速度論的な準安定性を利用する新たな手法により、熱力学の制約を超えた非平衡物性制御が実現されつつある。しかしながら、物性制御現象の逆設計は依然として困難であり、多くの場合、発見的なアプローチに頼らざるを得ない。そこで本発表では、共有結合の観点から準安定状態の起源を明らかにし、物性制御現象の設計指針としての結合本数の変化の有効性を提案する。

ここでは、クエンチ法による物性制御が実現されている準安定物質である Sn に注目し、バンドトポロジーの立場から結合性を解析し、その準安定性の起源を明らかにする。Sn は安定半金属相の α 相と、準安定金属相の β 相の二つの物質相を示す。 α 相は立方晶ダイヤモンド構造である一方で、 β 相は α 相を(001)方向から一軸圧縮した正方晶構造であり、その構造変化経路は一軸圧縮によって特徴付けられる。また、 α 相は 4 本の最近接結合を持つのに対し、 β 相は 4 本の最近接結合に加えて、(001)方向への 2 本の次近接結合を持つ。

発表では、構造変化に伴うポテンシャルエネルギー・結合次数・バンド構造の変化の解析結果を報告し、(i) 最近接結合の欠損と次近接結合の形成によるエネルギー競合が Sn の準安定性の起源であり、(ii) 結合本数の変化はノーダルライン半金属へのトポロジカル相転移による Zak 位相の獲得として理解できることを示す。

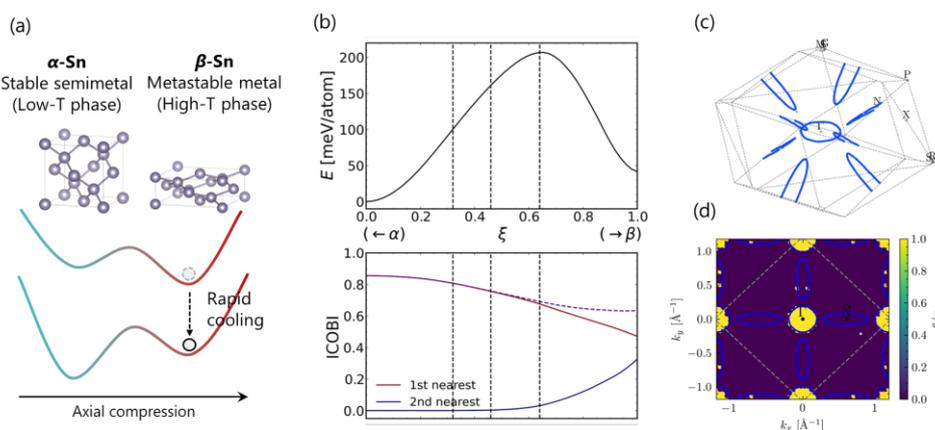


Fig. (a) α -Sn および β -Sn の結晶構造とクエンチ法の概念図. (b) 構造変化に対するエネルギー変化と結合次数変化. (c) ノーダルラインの概念図. (d) 表面 Brillouin zone における Zak 位相.