

三方晶テルル・セレンにおける Dirac 分散とスピン軌道効果 Dirac Cone and Spin-Orbit Effects in Trigonal Tellurium and Selenium

平山元昭、石橋章司、三宅隆

Motoaki Hirayama, Shoji Ishibashi, and Takashi Miyake

産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門

Nanosystem Research Institute, AIST, Tsukuba, Ibaraki 305-8568

グラフェンやビスマスなどの有効質量が 0、もしくは 0 に近いバンド分散を持つ物質が近年注目を集めている。我々は固体元素単体の Te, Se に焦点を当てた。三方晶の Te, Se は特異な螺旋状の構造(Fig. 1)によって注目を集め、古くからバンド構造や結晶構造の安定性に関して研究が行われていた[1]。近年では、剪断歪みを与えた Te におけるトポロジカル絶縁体の可能性も指摘されている[2]。

本研究では、相対論的な密度汎関数法[3] に GW の自己エネルギー補正を組み合わせ、Te, Se の電子構造を計算した。相対論的な密度汎関数法は Projector Augmented-Wave(PAW)法の QMAS(Quantum Materials Simulator)[4]、自己エネルギー補正は Full-Potential Linear Muffin-Tin Orbital (FP-LMTO) 法を用いて計算した。我々は、Te, Se 結晶において、Brillouin Zone(BZ)中 1 点で交差する 3 次元的な線形バンド分散が複数存在することを発見した(Fig. 2)。さらに圧力をかけていくと、スピン軌道相互作用を無視した場合、ある圧力下の H 点において、価電子バンドと伝導バンドを繋ぐ 3×2 重縮退の Dirac 分散が形成される(2 はスピン自由度)。スピン構造は特徴的である。 $P3_121$ の対称性を反映し、BZ の Γ KK'-AHH' の三角柱の辺上の固有状態のスピンは辺と平行に向く。その方向は混成によって変化し得る。

本発表では、圧力下の Dirac 分散の起源とスピン軌道相互作用の効果、及びフェルミ面上のスピン構造について報告する。

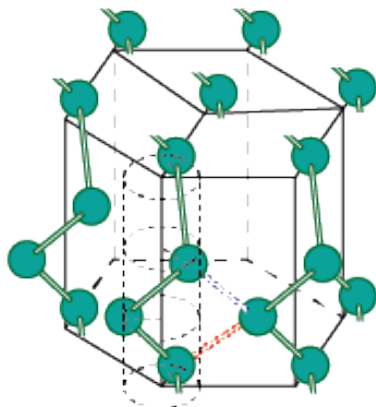


FIG. 1: Structure of Te and Se

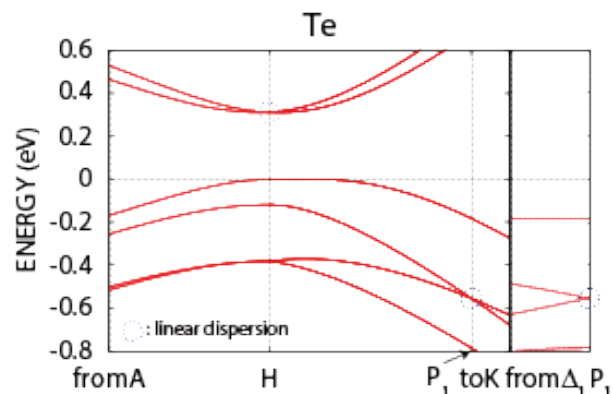


FIG. 2: Electric band structure of Te

- [1] J. D. Joannopoulos, M. Schlüter, and M. L. Cohen: Phys. Rev. B 11 (1975) 6. [2] L. A. Agapito, N. Kioussis, W. A. Goddard III, and N. P. Ong: Phys. Rev. Lett. 110 (2013) 176401. [3] T. Kosugi, T. Miyake, and S. Ishibashi: J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) 074713. [4] <http://www.qmas.jp/>