

# 表面電子状態から探るビスマス単結晶のトポロジカル秩序

大坪嘉之

大阪大学大学院生命機能研究科 / 理学研究科

結晶表面にバルク電子構造のトポロジカル量子数により保護された金属的な電子状態が現れる、いわゆるトポロジカル物質に関する研究は近年の物性物理学において最も注目を集めているテーマの1つである[1]。ビスマス(Bi)はその大きなスピン軌道相互作用から多くの既知のトポロジカル物質の主要な構成元素として用いられてきた。

一方、Bi単結晶のトポロジカル秩序については現在も議論が続けられている。微量のアンチモン(Sb)との合金相  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  は初めて実験的に確認された3次元トポロジカル絶縁体であることと[2]、Sbとの合金化によりバルク電子状態が絶縁体化することは明らかであるが、Bi単結晶自体については通常半金属である[2, 3]とする立場と角度分解光電子分光(ARPES)で得られた表面バンド分散に基づいてトポロジカル半金属とする[4, 5]立場に分かれており、未だ完全な決着はみられていない。

本発表ではまずARPESにより得られた単結晶表面電子状態[4]について概観し、続いて、経験的な強束縛近似を用いた2種類の計算により、実験的に得られている表面電子状態をどのように理解し得るかについて紹介する。BiおよびSbに関する強束縛近似パラメータは既に広く知られているが[6]、表面電子状態の計算に際してはこのパラメータでは実験結果の一部を再現できないことが明らかになった。講演者等はこの乖離を強束縛近似パラメータの修正により解決した。また、Bi単結晶の格子定数変調によりトポロジカル秩序相が反転することと、変調前のトポロジカル秩序が自明か非自明かによってトポロジカル相転移が起きる格子定数変調の方向（縮める/広げる）が反転することが見出された[7]。

並行して、室温より上の高温におけるBi単結晶の表面電子状態およびトポロジカル秩序に関してARPESにより調査した結果も紹介したい。一般に、高温では熱膨張により結晶格子にわずかな変調が生じる。最新の理論計算によればBi単結晶のトポロジカル相転移に必要な格子変調は1%未満であり[3]、10 K程度の低温から450 Kまでの温度上昇によりこの範囲を横切るとは十分に期待できる。温度を掃引したARPES測定を行ったところ、表面ブリルアンゾーンの $\Gamma$ 点近傍では表面電子状態が低結合エネルギー側にシフトするが、M点近傍では逆に高結合エネルギー側にシフトする様子が確認された。物質のトポロジカル秩序相を反映するバルク電子状態の射影領域と表面電子状態の関係においては、M点近傍で全ての表面電子状態がバルク価電子帯バンドに入り込む、通常（トポロジカルに自明な）半金属において予測される振る舞いを示しているように見えた。この結果がトポロジカル相転移を支持するか否か等、詳細な解釈については講演で議論する予定である。

## 参考文献

- [1] L. Fu, C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 045302.
- [2] D. Hsieh *et al.*, *Nature* **452** (2008) 970.
- [3] I. Aguilera *et al.*, *Phys. Rev. B* **91** (2015) 125129.
- [4] Y. Ohtsubo *et al.*, *New J. Phys.* **15** (2013) 033041.
- [5] S. Ito *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **117** (2016) 236402.
- [6] Y. Liu and R. E. Allen, *Phys. Rev. B* **52** (1995) 1566.
- [7] Y. Ohtsubo and S. Kimura, *New J. Phys.* **18** (2016) 123015.