

Title	Peierls instabilityとPb _{1-x} Sn _x Teの異常誘電率
Author(s)	川村, 肇
Citation	大阪大学低温センターだより. 1974, 8, p. 1-4
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/3590
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

Peierls instabilityと $Pb_{1-x}Sn_xTe$ の異常誘電率

理学部 川村 肇 (豊中 2474)

R. E. Peierlsが1955年に出版した“Quantum Theory of Solids”は大変ユニークな著書であるが、その中で彼は一次元の金属は安定ではあり得ないと推論している。又三次元でも単純立方格子を持つ金属は不安定で三方晶系に転移するであろうと考えた。

例えば図1 aのように一次元金属でバンドの中間まで電子で充たされていると考えよう。ここでもし格子が等間隔でなく、一つおきに間隔が異なり、単純胞の大きさが倍になり、Brillouin Zoneが半分になったとすると図1 bのように、新しく出来たzone boundary $\pm\pi/2a$ の所にエネルギーギャップが生じるであろう。この結果電子エネルギーは低下して、このような絶縁体構造が安定となる。

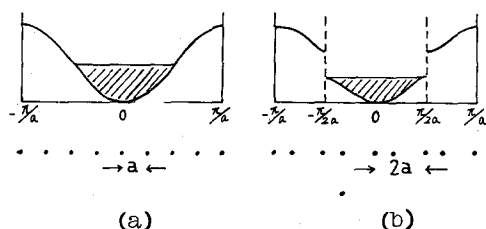


図1. 一次元結晶の Peierls instability

Peierlsは又Bi, Sb, Asの結晶構造はNaCl型をbody diagonalの方向に引ばって、body centerにある格子点を中点から少しずらせたような構造になっているが、これも基本的にはこれと同じ考えで説明出来るであろうと述べている。

最近になって $K_2Pt(CN)_4Br_{0.30} \cdot 3H_2O$ と云う一次元結晶が、常温でPeierls型の変形をしていることがX線散乱のdiffuse scatteringによって明になった。¹⁾この変形はつづいて中性子散乱や遠赤外反射などによって確かめられた。フェルミ面の波数は必ずしもBrillouin zoneの半分とは限らないから、super latticeの大きさは二倍とは限らず、その周期はもとの周期の整数倍とは限らない。又変形はstaticでなくphononの形でdynamicalにも生じ、電子の粗密の波がこれに乗って進行することが予期される。これは最初Fröhlichの予期した超伝導のメカニズムである。

$PbTe, SnTe$ はNaCl型の結晶でBrillouin zoneのL点 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ に伝導帯の底と価電子帯のtopとが向き合っていて、(111)の方向に細長くのびたvalleyをなしている。この間

1) R. Comes, M. Lambert, H. Launois and H. R. Zeller, Phys. Rev. B8, 571(1973).

のエネルギーギャップはPbTeで0.18eV, SnTeで0.3 eVと非常に小さい。PbTeとSnTeとは全域固溶体を作り単結晶を作ることが出来る。伝導帯の底と価電子帯のtopはPbTeとSnTeでは逆転し, Snが約30%のときgapは零になる。(図2)

SnTeは低温でNaCl型から上述のBi型に転移することが最近X線回折, 中性子回折, ラマン散乱などで見出された。しかしその転移温度は測定者によってまちまちで0°Kから95°Kに及んでいる。この違いはキャリア濃度のちがいにあって, 図3のようにキャリア濃度の低い方が転移温度が高いのではないかと推定される。同形の化合物GeTeは常温でBi型で, 650°KでNaCl型に転移する。又PbTe及び相転移を起さないSnTeでもTOフォノンがソフト化して, 図4のように Γ 点における振動は非常に低くなっている。

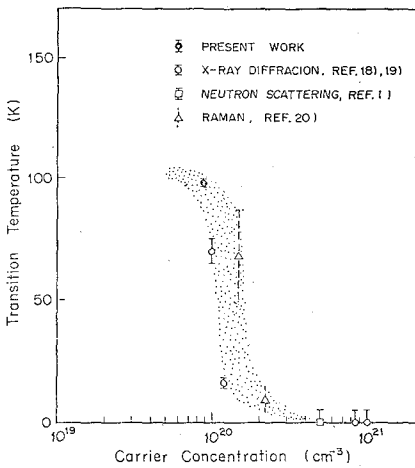


図3. SnTeの構造転移温度とキャリア濃度の関係

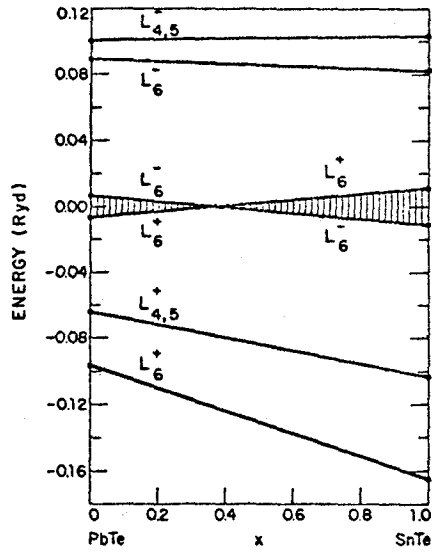


図2. PbTe-SnTe系のバンド構造

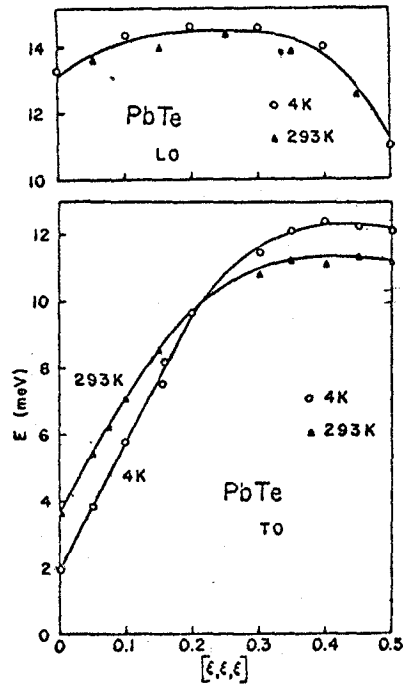


図4. PbTeのフォノン分散曲線. 中性子散乱による測定, TOのソフト化. H.A. Alperin, S.J. Pickart, J. Rhyne and V.J. Minkiewicz, Rhys. Letters 40A 295 (1972).

PbTeの格子誘電率は、キャリアのスクリーニングのためキャパシタンスからの測定は不可能であるが、P-n接合のキャパシタンスや光学(赤外領域)反射、中性子散乱、磁気プラズマ法などで測定されているが、その値は200くらいから3000くらいに及んでいる。我々はn型 $Pb_{1-x}Sn_xTe$ の単結晶について、色々のSn成分(x)とキャリア濃度nをもった試料について、磁気プラズマの方法で格子誘電率をはかった。磁気プラズマの方法と言うのは、磁場の下でうすい試料の中にマイクロ波によって励起されるヘリコン波のFabry-Perot型の干渉を測定するもので、半導体中の有効誘電率が格子誘電率 ϵ_l と磁場の下におけるプラズマの誘電率

$$\pm \omega_p^2 / \omega(\omega_c - \omega) \cong \pm \frac{2nec}{fH}$$

の和になり、前者が磁場によらないのに反し、後者が磁場に逆比例して減少することを利用するものである。上式で ω_p はプラズマ周波数 $\sqrt{4\pi ne/m^*}$ で ω_c はサイクロトロン周波数 eH/m^*c である。

我々の測定結果によると $0 < x < 0.3$, $5 \times 10^{16} < n < 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ の範囲内で ϵ_l はxの増加と共に増加し、nの増加と共に減少することが示された。 $0 < x < 0.3$ では上述の如く、xの増加と共にエネルギーギャップ E_G は減少し、nの増加によってフェルミエネルギー E_F が増加する。図5のように、せまいバンドギャップの場合はtwo-band modelが当てはまり、valence bandとconduction bandとは対称であるから、 $E_G + 2E_F$ は丁度最少の帯間励起エネルギーになる。そしてこれは又xの増加と共に減少し、nの増加と共に増加する。そこで ϵ_l を1つのパラメーター $E_G + 2E_F$ の関数としてプロットして見たのが図6である。

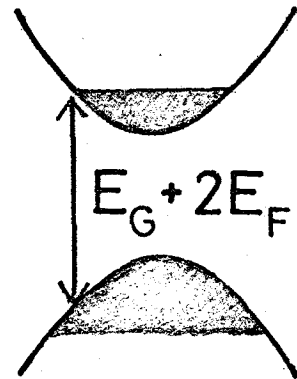


図5. two band model
における電子の帯間励起
エネルギー

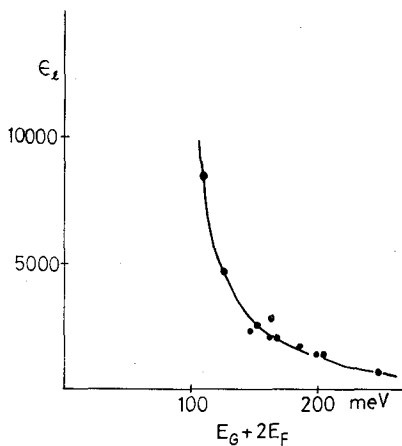


図6. 格子誘電率 ϵ_l と帯間励起エネルギー
 $E_G + 2E_F$ との関係(実験)

E_G がほとんど零に近く、 E_F も零であるような場合のバンド構造は図7のようになるであろう。ここで body diagonal に並んだ anion と cation の間隔を少しずらして、2 倍の周期の superlattice になるような Bi 構造にゆがめて見ると、これによって L 点でほとんど縮退していた conduction band と valence band とは分離し、エネルギーギャップが増大する。その結果図7のように、電子系のエネルギーは低下するであろう。これによって格子変位に対する回復力が減少し、TOフォノンがソフト化する。又格子誘電率は異常に大きくなるであろう。電子が conduction band に存在すれば、そのエネルギーは変形によって増加するから E_F の増加によってこの効果は小さくなる。又 E_G が大きければ矢張りソフト化が減少するであろう。

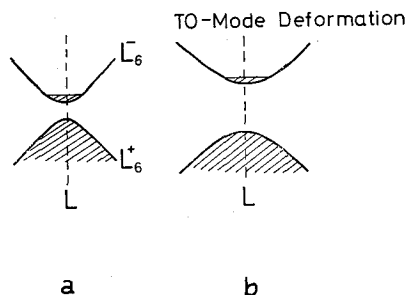


図7. TO-Modeの変形によるバンドギャップと電子エネルギー変化

この考えは valence band から conduction への励起に結びつい

た TO-Phonon-Electron Coupling を考え、これを TO-Phonon のエネルギーにくり込むことによってこれが減少すると言ひ形に定式化することが出来る。

このような考えは Peierls instability の考えと通じる所があるように思われるが、我々は実験と理論の両面からもっと深めたいと思っている。

第15回低温研究会

梅雨空の7月10日に第15回低温研究会を低温工学協会関西支部の共催の下に開いた。テーマはクリーンエネルギーを主体とした。

・田村英雄氏(阪大工・応化)

“水素エネルギーシステムと液化水素”

はクリーンエネルギーとしての水素の持つ性質、製法、貯蔵、輸送の方法について詳しい話があった。

・松本光雄氏(三菱重工・横浜造船所)

“LNGの基礎物性と応用”

は、現実にLNGを取り扱っている立場から物性、安全、容器等の問題をユーモアを交え、興味深く話された。

当日の出席者は学内外から37名であった。