

2次元ディラックノーダルライン物質の構造と

電子状態および輸送特性の解明

研究代表者 高山 あかり
(先進理工学部 物理学科 准教授)

1. 1 研究課題

ディラック型電子のバンドが線（ループ状）で交わる「ノーダルライン型バンド分散もつ物質」は、ディラック電子系の利点はそのままに高いキャリア密度をもつことができる物質系とされ、近年注目が集まっている。2次元ディラックノーダルライン物質の候補として有力視されているのが Cu_2Si 単原子層であり、 $\text{Cu}(111)$ 基板上に作製された単層 Cu_2Si において2次元物質におけるノーダルループの存在が角度分解光電子分光(ARPES)により報告されている[1]。このノーダルライン型電子状態の輸送特性を明らかにするためには、極低温で伝導性がフリーズアウトする（無視できるようになる）半導体または絶縁体基板上に単層 Cu_2Si を作製し、基板とノーダルループの電子状態が分離した試料の作成が有効であり、これまで Si 基板上的 Cu_2Si においてもその電子状態が観測されてきたが、ノーダルループの存在については議論されていなかった。本研究では、Si 基板上に作製した単層 Cu_2Si について、高分解能 ARPES 測定による電子状態の決定、極低温強磁場下電気伝導測定における輸送特性の解明、全反射高速陽電子回折(TRHEPD)による構造解析を行なった。

2. 主な研究成果

2.1 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}(111)$ における2次元ノーダルライン型バンド分散

Si 基板上的 Cu_2Si （以下 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}$ ）では、Si と Cu_2Si の格子定数の違いにより $\pm 3^\circ$ 回転した非整合ドメインで覆われ、この格子非整合により 5.55×5.55 相が形成されることが知られており、本実験で作成した試料も低エネルギー電子回折 (LEED) において 5.55×5.55 周期のパターンが確認された（図 1）。この試料の電子状態を明らかにするため、佐賀県立九州シンクロトロン光研究センターの BL13（佐賀大ライン）において ARPES 実験を行った。実験に用いた光のエネルギーは、 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Cu}(111)$ においてノーダルループを報告した先行研究[1]の測定条件に倣って $h\nu = 30$ eV (p 偏光)に設定した。実験の結果、 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}$ における ARPES の先行研究[2, 3]で観測されたバンド分散に加え、赤矢印で示すように、 Γ 点で電子ポケットを形成するバンド分散を新たに観測した(図 1)。この電子バンドは単層 Cu_2Si で存在が予測され、 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Cu}$ で報告されている γ バンド[1]と定性的に一致していることがわかった。本実験の結果、 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}(111)$ もノーダルライン型の電子状態をもつ可能性が非常に高いことがわかった。

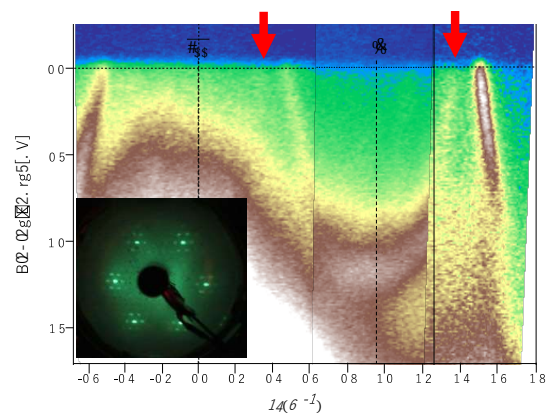


Fig. 1 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}(111)$ の ARPES および LEED 実験の結果

2.2 Cu₂Si/Si(111)の輸送特性

Cu₂Si/Si の輸送特性を明らかにするため、超高真空中・極低温・強磁場下での 4 端子電気伝導測定を行った。実験は東京大学理学系研究科物理学専攻の長谷川研の装置を用いて行なった。図 2(a)は、測定の様式図であり、試料表面に垂直に最大 7 T の磁場 B を印加し、試料温度は 0.83 K まで冷却して実験を行った。図 2(b)は、2.00 ML と 2.25 ML の Cu₂Si/Si(111) の 30 K 以下の 0 T におけるシート伝導率 σ_{sheet} の温度依存性を示している。 σ_{sheet} は温度が下がると徐々に減少し、これは弱局在(WL)または弱反局在(WAL)による補正を取り入れたフィッティングでよく説明できる。試料温度 1 K での磁気伝導率を図 2(c)に示す。磁場の増加に伴い、 σ シートは低磁場領域 (0~0.5 T) で減少し、その後、高磁場領域 (0.5~7.0 T) でわずかに増加した。低磁場領域の振る舞いに着目すると、 $\Delta\sigma$ (ゼロ磁場下の伝導度との差分) の関係は、Hikami-Larkin-Nagaoka (HLN) の式で記述できることがわかった[図 2(d)]。単層 Cu₂Si は $T_c \sim 4.1$ K での超伝導転移が予測されているが[4]、Si(111)上の Cu₂Si 層の構造では、WAL 効果の誘起によって超伝導転移が妨げられていると結論づけた。

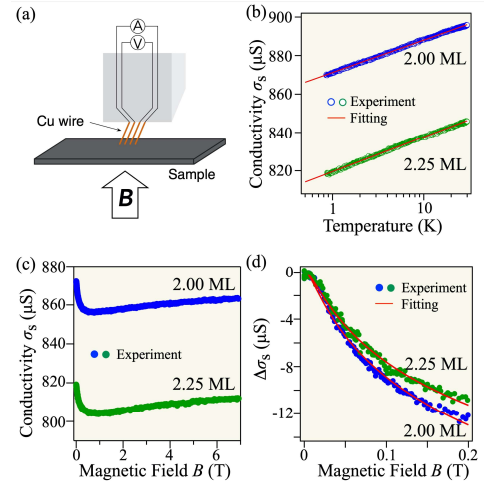


Fig. 2 (a) 4 端子電気伝導測定の様式図。Cu₂Si/Si(111) におけるシート伝導度の (b) 温度依存性、(c) 磁場依存性、(d) ゼロ磁場下の伝導度との差分。

2.3 Cu₂Si/Si(111)の構造

これまでの Cu₂Si/Si のバンド計算では、ノーダルループの存在は示されていなかった。これは、従来の Cu₂Si/Si のバンド計算では、図 3(a)に示すような 5.55×5.55 周期の超構造を反映させた構造でのバンド計算が行われていなかったことに起因すると考えた。また、単層 Cu₂Si のバンド計算では、ノーダルループは Cu₂Si 層の凹凸 (バックリング) の有無によって縮退点でのギャップの存在が指摘されている。Cu₂Si/Si のノーダルループの電子状態を議論するには、正確な構造を決定し、その構造モデルでのバンド計算が必須である。本研究では、Cu₂Si/Si(111)- 5.55×5.55 構造の全反射高速陽電子回折 (TRHEPD) 実験による構造解析から、この格子非整合による巨大格子系の構造決定を行なった。

本実験は高エネルギー加速器研究機構低速陽電子実験施設 (SPF) にて行った。ここでは、原子密度と層間距離の情報を反映する一波条件下において、(00) スポット強度の視斜角依存性 (ロッキング曲線) を測定し、実験とよく対応するロッキング曲線をもつ構造モデルを探索する。最表面の Cu₂Si および Cu₂Si 直下の Si 層の歪みも考慮した解析を行った結果、図 3(b)に示す構造モデルが最も実験値を良く再現することを見出した[図 3(c)]。今回決定した構造は、Cu₂Si 層の構造は Santis らの先行研究[5]とよく対応すること、さらに基板の Si 層にも多少の格子緩和が存在することを示唆している。

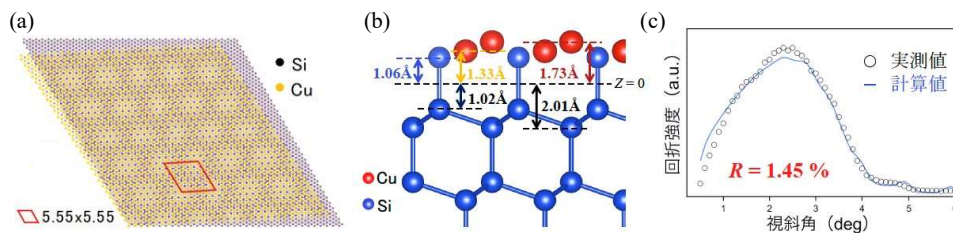


Fig.3 Cu₂Si/Si(111)- 5.55×5.55 の (a) 構造模式図、(b) TRHEPD により決定した構造モデル、(c) 実験および解析結果。

3. 共同研究者

中村 友謙 (OIST・博士研究員)	秋山 了太 (東京大学・助教)
長谷川 修司 (東京大学・教授)	松田 巖 (東京大学・教授)
今村 真幸 (SAGA-LS・助教)	高橋 和敏 (SAGA-LS・教授)
望月 出海 (高エネ研・助教)	兵頭 俊夫 (高エネ研・ダイヤモンドフェロー)

4. 研究業績

4.1 学術論文

M. Sakamoto, H. Toyama, T. Nakamura, L. Zhu, Y. Tsujikawa, M. Imamura, K. Takahashi, R. Hobara, R. Akiyama, Z. Wei, W.-X. Tang, A. Takayama, I. Matsuda and S. Hasegawa, *“Observing the π Berry phase of the nodal line system in a monolayer Cu_2Si on silicon” submitted.*

4.2 総説・著書

4.3 招待講演

4.4 受賞・表彰

203 年度豊田スカラー (公益財団法人豊田理化学研究所)

4.4 学会および社会的活動

日本物理学会 第 79~80 期代議員

日本表面真空学会 関東支部幹事、2023 年度支部講演大会実行委員 (オンライン)

放射光学会 行事委員 (2023.9~)

高エネルギー加速器研究機構 PF-PAC 委員

佐賀大学シンクロトン光応用研究センター東京支所長

5. 研究活動の課題と展望

本研究で行った $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}$ の構造解析において、モアレ構造を取り入れた構造モデルの妥当性を示すことができた。これまでのバンド計算ではモアレ構造を取り入れた巨大格子は適用されておらず、このことが本研究の ARPES 実験との相違の原因になった可能性が考えられる。今後、スーパーコンピュータを用いてモアレ周期を含めたバンド計算を行い、本構造解析結果との整合性について検討したい。また、 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Cu}$ の構造解析も行い、基板依存性についても明らかにしたい。