

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

高山 あかり*

Study of Atomic Structure, Electronic Structure and Transport Properties of Two-dimensional Dirac Nodal Line Materials

Akari TAKAYAMA*

We report an experimental verification of a set of electronic bands that forms a nodal loop in a mono-layer Cu_2Si on $\text{Si}(111)$ by photoemission spectroscopy. Preparation on a semiconducting substrate benefited a magneto-transport measurement of the layer and an *in-situ* experiment leads to observation of the anti-weak localization effect and the π Berry phase, while a Cu_2Si layer in the free-standing manner or on a metal substrate has two nodal loops and the Berry phase should become 2π . Growth of the layer on the Si substrate was found to yield the singularity for a trajectory loop of carrier scatterings. The system becomes quantum-mechanically intriguing to investigate evolutions of Dirac nodal line fermions in a single atomic layer.

1. 背景・目的

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だ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ー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、基板とノーダー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 基板上の Cu_2Si においてもその電子状態が観測されてきたが、ノーダー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. $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}(111)$ における2次元ノーダルライン型バンド分散

Si 基板上の 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tron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、 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Cu}(111)$ においてノーダー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、 $\bar{\Gamma}$ 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。

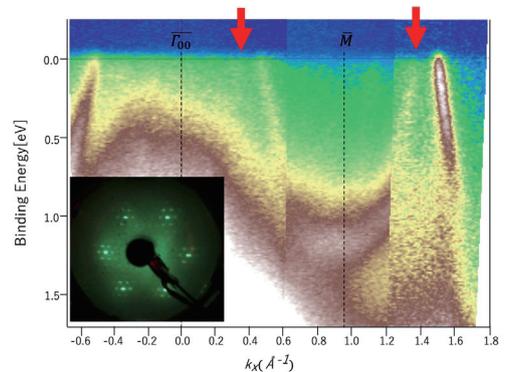


図1 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}(111)$ の ARPES および LEED 実験の結果。

2024年3月2日 受理

* 豊田理研スカラー

早稲田大学理工学術院先進理工学研究科物理及応用物理学専攻

3. $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}(111)$ の輸送特性

$\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}$ 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 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}(111)$ 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。単層 Cu_2Si は $T_c \sim 4.1$ Kでの超伝導転移が予測されているが[4]、 $\text{Si}(111)$ 上の Cu_2Si 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。

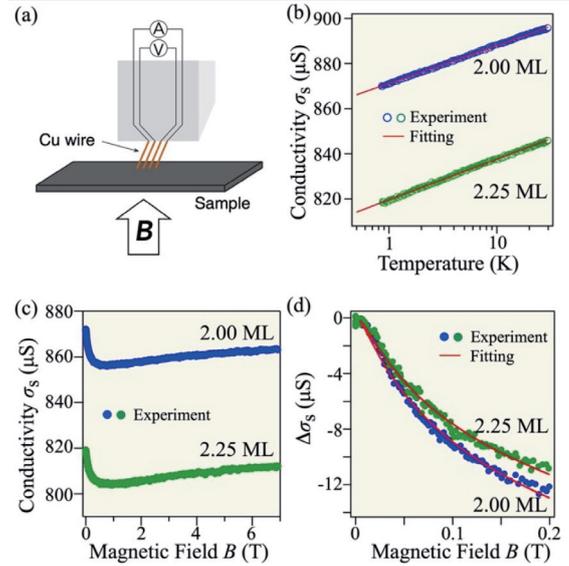


図2 (a) 4端子電気伝導測定の様式図。 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}(111)$ におけるシート伝導度の (b) 温度依存性、(c) 磁場依存性、(d) ゼロ磁場下の伝導度との差分。

4. $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}(111)$ の構造

これまでの $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}$ 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い。これは、従来の $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}$ 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 Cu_2Si のバンド計算では、ノーダルループは Cu_2Si 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。 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}$ 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、 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}(111)-5.55 \times 5.55$ 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にて行なった。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 Cu_2Si および Cu_2Si 直下の Si 層の歪みも考慮した解析を行った結果、図2(b)に示す構造モデルが最も実験値を良く再現する[図3(c)] ことを見出した。今回決定した構造は、 Cu_2Si 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。

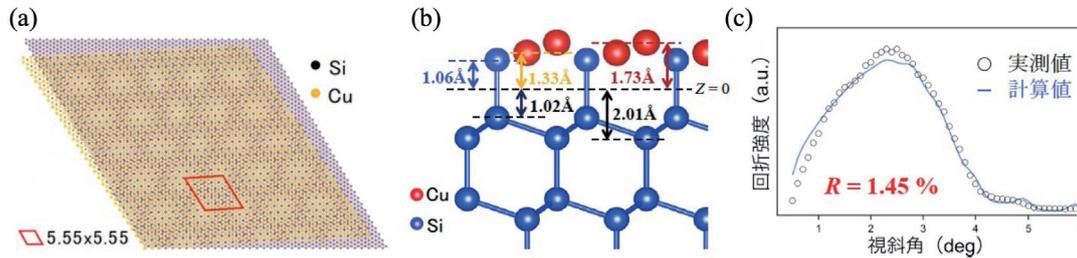


図3 $\text{Cu}_2\text{Si}/\text{Si}(111)-5.55 \times 5.55$ の (a) 構造模式図、(b) TRHEPDにより決定した構造モデル、(c) 実験および解析結果。

REFERENCES

- 1) B. Feng, *et al.*, *Nature Communications*, **8** (2017) 1007.
- 2) H.-J. Neff, *et al.*, *Physical Review B*, **64** (2001) 235415.
- 3) M. Cameau, *et al.*, *Physical Review Materials*, **84** (2019) 044004.
- 4) L. Yan, *et al.*, *Journal of Materials Chemistry C*, **7** (2019) 10926-10932.
- 5) M. De Santis, *et al.*, *Surface Science*, **477** (2001) 179-190.