

令和元年5月31日現在

機関番号：82401

研究種目：若手研究(A)

研究期間：2016～2018

課題番号：16H06012

研究課題名(和文)半金属的フェルミ面を持つワイル半金属の電子状態解明

研究課題名(英文)Spectroscopic study of Weyl semimetals with semimetallic Fermi surfaces

研究代表者

幸坂 祐生 (Kohsaka, Yuhki)

国立研究開発法人理化学研究所・創発物性科学研究センター・上級研究員

研究者番号：80455344

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 18,900,000円

研究成果の概要(和文)：半金属的なFermi面を持つWeyl半金属(タイプII)における特徴的な電子状態を、走査トンネル顕微鏡を用いた分光イメージング測定により探索した。タイプIIのWeyl半金属の候補物質として β -MoTe₂を測定した結果、極性構造に起因する2種類の電子状態を観測した。どちらも非占有状態で複雑な構造を示しており、 β -MoTe₂が持つ複雑な電子状態を反映している。準粒子干渉が観測されており、理論計算との比較から電子状態の詳細を絞り込むことが可能であることを示している。

研究成果の学術的意義や社会的意義

β -MoTe₂において複雑な構造を持つ準粒子干渉が観測された。準粒子干渉は電子波の散乱干渉による定在波であり、原理的に電子状態に関する多くの情報を含む。その情報を抽出する方法として、第一原理計算に基づく準粒子干渉シミュレーション手法を開発した。この手法は、Weyl半金属だけでなく様々な物質に広く適用可能であり、スピンや軌道といった内部自由度まで含めた電子状態の詳細を探索するための新たな手法として用いることができる。

研究成果の概要(英文)：To examine electronic states of type II Weyl semimetals, we have performed spectroscopic-imaging scanning tunneling microscopy of β -MoTe₂, which is a candidate material of type II Weyl semimetal. The electronic states we observed can be classified into two groups, indicating that two kinds of surfaces originating from the polar crystal structure of β -MoTe₂ are resolved. In both cases, the electronic states exhibit complicated structures especially above the Fermi energy. Details of the electronic states can be identified by comparing the experimental data and the theoretical simulation of quasiparticle interference.

研究分野：物性物理

キーワード：走査トンネル顕微鏡 Weyl半金属

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

電子の波動関数の位相幾何学的性質は凝縮系物理学における新たなパラダイム（トポロジカル物理）として、世界中で活発に研究されている。トポロジカル絶縁体に続き、Weyl 半金属が登場し、トポロジカル物理は新展開を迎えている。量子ホール効果やトポロジカル絶縁体にはない Weyl 半金属の大きな特徴は、特異な電子状態が結晶内部と表面の両方に出現することである。結晶内には Weyl 粒子と呼ばれるカイラリティーを持った有効質量ゼロの素励起が創発し、表面には Fermi アークと呼ばれる非連続な Fermi 面を持つ電子状態が実現する。これらの特徴的な電子状態に起因して、カイラル異常・量子異常ホール効果、Fermi アーク由来の新奇量子振動・量子干渉効果など、Weyl 半金属はバルク・表面の両面での多彩な量子現象の宝庫であることが予測されている。

Weyl 半金属は空間反転対称性か時間反転対称性が破れた物質で実現する。最初に実験的に確認された Weyl 半金属は極性（空間反転対称性が破れた）構造を持つ $(\text{Ta,Nb})(\text{As,P})$ である [S. - Y. Xu et al., Science 349, 613 (2015) など]。これらの物質においては、伝導帯の最下部と価電子帯の最上部が Weyl 点において接触し、点状の Fermi 面を形成する（タイプ I）。一方、Weyl 点が電子的な Fermi 面とホール的な Fermi 面の境界に位置する、異なる Weyl 半金属も理論的に提案されている（タイプ II、図 1）。この新たなタイプの半金属的な Fermi 面を持つ Weyl 半金属は、予期せぬ新奇物性を示し得る [A. A. Soluyanov et al., Nature 527, 495 (2015)]。

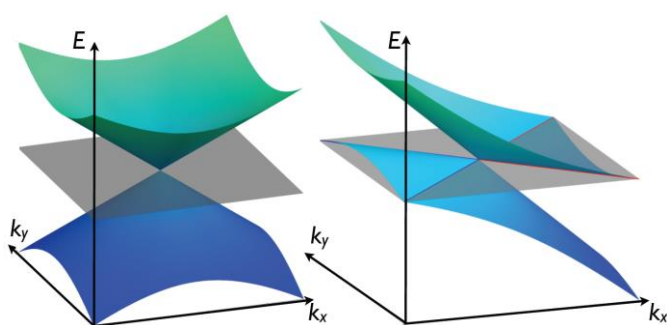


図 1 2 種類の Weyl 半金属のバンド構造。(左) 伝導帯の最下部と価電子帯の最上部が接するタイプ I、(右) 電子面とホール面が接するタイプ II。[A. A. Soluyanov et al., Nature 527, 495 (2015)]

タイプ II の Weyl 半金属であることが予測されている物質に $\beta\text{-MoTe}_2$ がある (図 2)。この物質は低温で極性構造へ構造相転移を起こすことが知られており、低温相で Fermi 準位の上 6 meV と 59 meV に Weyl 点を持つと予測されている [Y. Sun et al., Phys. Rev. B 92, 161107 (2015)]。さらに、Mo を Nb で置換すると極性構造への構造相転移が抑制され、それに伴い Seebeck 係数が増大する [K. Ikeura et al., APL Mater. 3, 041514 (2015)]。これは、極性構造の抑制に伴う Weyl 半金属から通常金属へのトポロジカル転移近傍で異常物性が発現する可能性として非常に興味深い。

2. 研究の目的

本研究においては、半金属的な Fermi 面を持つ Weyl 半金属（タイプ II Weyl 半金属）の特徴的な電子状態を分光学的に探索することを目的とした。その候補物質として、 $\beta\text{-MoTe}_2$ に着目した。実空間・波数空間の両面から、 $\beta\text{-MoTe}_2$ の特異な電子状態を定量的に解明し、トポロジカル物理の深化に寄与することを目的とした。

3. 研究の方法

電子状態の分光学的探索手法として、本研究では走査トンネル分光イメージング測定を用いた。走査トンネル分光イメージング測定は、走査トンネル顕微鏡を用いた実空間分光である。走査トンネル顕微鏡が持つ高い空間分解能 (~ 10 pm) とトンネル分光が持つ高いエネルギー分解能 (~ 10 μeV) で物質表面の状態密度分布を明らかにすることができる。また、探針と試料の間に印加するバイアス電圧の極性を変えることにより、占有状態・非占有状態の両方を測定可能であるため、 $\beta\text{-MoTe}_2$ のように Weyl 点が非占有状態に位置する物質にも適している。さらに、

得られた状態密度像を Fourier 変換することで、電子状態の波数空間における特徴を解析することもできる。

測定は、理化学研究所に設置された超高安定超高真空低温走査トンネル顕微鏡を用いて行った。この装置は、機械的振動が 0.5 pm 以下、長時間のドリフトが 0.1 nm/日以下と極めて安定しており、ノイズと歪みの少ないデータが得られることが特長である。測定に用いた β -MoTe₂ 単結晶は超高真空チャンバー内、約 77 K でへき開し、測定に適した清浄表面を用意した。へき開後は直ちに顕微鏡本体に搬送した。探針にはタングステンワイヤーを電気化学研磨したものを使用した。探針は、超高真空チャンバー内に導入後、電子ビーム加熱および電界イオン顕微鏡を用いて清浄化し、金単結晶上で調整してから測定に使用した。測定は全て 4.6 K にて行った。

4. 研究成果

図 3 に走査トンネル顕微鏡像の 1 例を示す。平坦なへき開面が得られ、原子分解能が得られる。結晶構造の擬一次元的な構造を反映して、走査トンネル顕微鏡像にも縞状構造が見られる。さらに、微分コンダクタンス像には準粒子干渉（後述）が観測された。複数の試料についての測定を繰り返した結果、走査トンネル顕微鏡像で観察される不純物の形状の特徴、トンネルスペクトル、および準粒子干渉の特徴はそれぞれ 2 種類に分類されることが判明した。 β -MoTe₂ は極性構造を持つ物質であり、結晶学的に異なる 2 種類の表面が存在する。2 種類の異なる測定結果は、分光イメージング測定で種類の異なる表面が区別できることを意味している。2 種類の表面の両方において、微分コンダクタンス像は極めて複雑な構造を示す。特に Fermi 準位よりもエネルギーが高い非占有状態側で Fourier 変換像には多数の構造が観測された。これは β -MoTe₂ が複雑な電子状態を持つことを反映していると考えられる。

次に、電子状態の詳細を解明するために、微分コンダクタンス像に現れる準粒子干渉に注目した。準粒子干渉は、不純物等によって電子波が散乱干渉を起こすために生じる定在波の一種であり、電子状態に関する多彩な情報を有する。一方で、散乱の始状態と終状態の両方に関する情報を含むために、それらの情報を分離する必要がある。そのため、角度分解光電子分光の結果などを参照することがしばしば行われる。しかし、 β -MoTe₂ においては非占有状態で多数の構造が現れるため、角度分解光電子分光結果と物理的直観に基づく従来型の解析法では限界があることが判明した。

そこで、測定と解析の両面からこの困難の解決を試みた。測定では、準粒子干渉像の Fourier 変換像において、広い測定範囲を確保しつつ高い波数分解能を実現する測定パラメータを用いた。これは、1 回

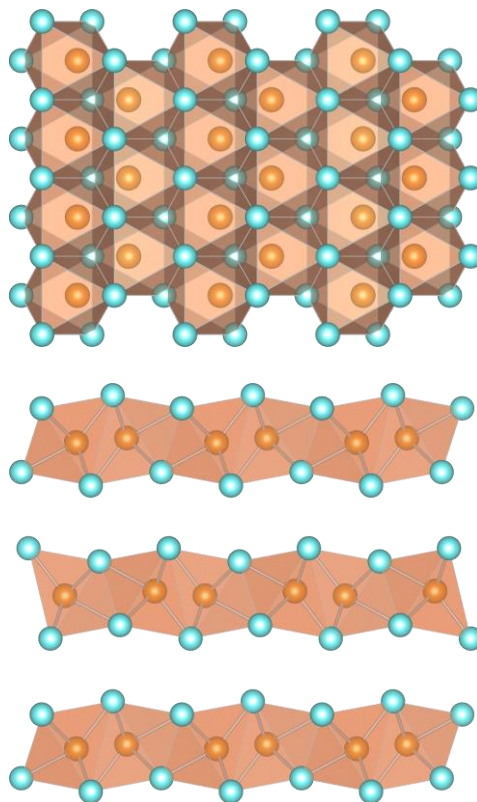


図 2 β -MoTe₂ の結晶構造。(上) [001] 方向から (下) [100] 方向から。Mo 原子 (オレンジ) が [100] 方向に平行なジグザグ鎖を形成する。

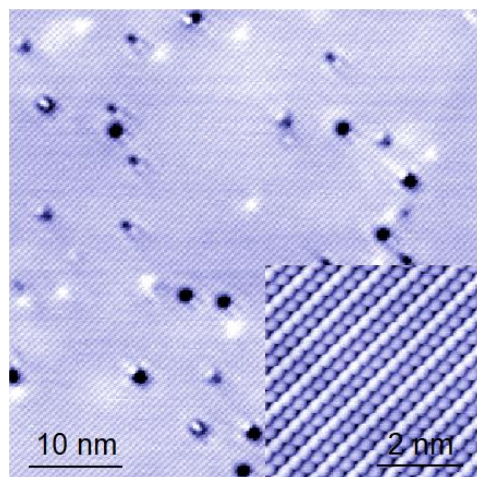


図 3 β -MoTe₂ の走査トンネル顕微鏡像の一例。一辺が約 50 nm。擬一次元的な結晶構造を反映した縞状構造と数種類の不純物が見られる。右下の拡大像は一辺が約 5 nm。

に測定できるエネルギー範囲を犠牲にすることになるが、エネルギー範囲を変えつつ何度も測定を行うことでカバーした。解析では、準粒子干渉を計算によって再現することで電子状態を明らかにすることを試みた。これまでに行ってきたモデルハミルトニアンを用いた計算では β -MoTe₂の複雑な電子状態を表現できないため、第一原理計算結果を元にして準粒子干渉を計算する手法を開発した。この手法は、第一原理計算結果に対し、強結合モデルを用いたフィットを行って得た固有値と固有ベクトルを元に準粒子干渉計算を行うものである。同手法の開発過程において、結晶構造や電子状態が β -MoTe₂より簡単な物質としてトポロジカル超伝導体候補物質 β -PdBi₂に適用し、実験結果をよく再現する結果を得た。この結果は、第一原理計算結果に基づく準粒子干渉計算が電子状態解析に強力な手法となることを示している。

しかし、 β -MoTe₂においては計算による準粒子干渉の再現は部分的なものに留まった。第一原理計算の結果が部分的に観測値と異なっており、その影響を強く受けたためである。 β -PdBi₂においても同様の差異は存在したが、容易に補正が可能であった。このことは、計算では細部を知ることが難しい β -MoTe₂の電子状態を、準粒子干渉計算を通して絞り込むことができることを意味する。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計3件)

- (1) K. Iwaya, Y. Kohsaka, K. Okawa, T. Machida, M. S. Bahramy, T. Hanaguri, T. Sasagawa, Full-gap superconductivity in spin-polarised surface states of topological semimetal β -PdBi₂, Nat. Commun. 8, 976 (2017-10-17), doi: 10.1038/s41467-017-01209-9, 査読あり
- (2) T. Machida, Y. Kohsaka, K. Iwaya, R. Arita, T. Hanaguri, R. Suzuki, M. Ochi, Y. Iwasa, Orbital-dependent quasiparticle scattering interference in 3R-NbS₂, Phys. Rev. B 96, 075206 (2017-08-21), doi: 10.1103/PhysRevB.96.075206, 査読あり
- (3) Y. Kohsaka, T. Machida, K. Iwaya, M. Kanou, T. Hanaguri, T. Sasagawa, Spin-orbit scattering visualized in quasiparticle interference, Phys. Rev. B 95, 115307 (2017-03-15), doi: 10.1103/PhysRevB.95.115307, 査読あり

〔学会発表〕(計3件)

- (1) 幸坂祐生, STMによるスピン軌道相互作用の可視化, 日本物理学会第73回年次大会, 東京理科大学, 2018年3月23日.
- (2) 幸坂祐生, 他7名, β -MoTe₂の分光イメージングによる電子状態解析, 日本物理学会2017年秋季大会, 岩手大学, 2017年9月21日.
- (3) 幸坂祐生, 他6名, Weyl半金属MoTe₂のSTM/STS測定, 日本物理学会第72回年次大会, 大阪大学, 2017年3月17日.

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

○出願状況(計0件)

○取得状況(計0件)

〔その他〕

- (1) 幸坂祐生, 波動関数の干渉縞から見えるもの—走査型トンネル顕微鏡による準粒子散乱過程の解析—, 固体物理 53, 155, 2018年4月15日.
- (2) 幸坂祐生, 走査トンネル分光イメージングによる物質科学, 物性研究 6, 064231, 2017年11月20日, doi: 10.14989/229053
- (3) 幸坂祐生, 花栗哲郎, 分光イメージングSTMによる電子状態解析, 表面科学 38, 502-507, 2017年10月20日, doi: 10.1380/jsssj.38.502

6. 研究組織

(1)研究分担者

研究分担者氏名:

ローマ字氏名:

所属研究機関名：

部局名：

職名：

研究者番号（8桁）：

(2)研究協力者

研究協力者氏名：

ローマ字氏名：

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。