

In / Cu (001) 表面に生成する電荷密度波相の精密構造解析

八田振一郎^a, Yi Min-Su^b, 坂田 修身^b, 有賀 哲也^a

^a 京都大学・理学研究科, ^b 高輝度光科学研究センター

背景

結晶表面においては、表面垂直方向の並進対称性が破れているため、2次元面内に局在した電子状態（表面状態）が実現することがある。このような低次元電子状態を有する物質では電子-電子、電子-格子などの相互作用の効果が顕著に現れることから、密度波状態、超伝導状態などの出現が期待されてきた。表面でのこのような状態は数原子層以下の領域に局在するため、いわゆるナノスケール素子の構成要素として有力であると考えられ、注目を集めている。

Nakagawaら¹⁾は、Cu (001) 表面上に吸着したIn単原子層において、電子-格子相互作用とFermi面ネスティング効果が協奏的に働き、電荷密度波状態が実現することを見いだした。この系についての角度分解光電子分光などによる研究によると、この電荷密度波状態と高温の通常金属状態との間の相転移は、電子エントロピーと格子エントロピーとが共に寄与する複合的な機構によって起こることが示唆されている。この相転移機構を明らかにするためには、電子状態の解析だけではなく、下地を含めた表面の精密な構造解析を行う必要がある。

本研究では、In被覆率0.63MLにおいて生成する室温c (4 × 4) 電荷密度波相と高温のp (2 × 2) 通常金属層との間の相転移について、表面X線回折による精密構造解析を行い、角度分解光電子分光の結果と総合することにより、相転移の機構を明らかにすることを目的としている。

実験

実験はBL13XUの超高真空表面X線回折計を用いて行った。X線の波長としては0.609 Åを用いた。試料の作成は、超高真空装置内において、既報^{1,2)}の方法により行った。

結果

図1に、表面超構造による回折についての ω スキャンの一例を示す（スリット幅0.1mm、測定時間2 s /point）。超構造反射の半値幅は0.149°程度であり、試料の結晶性が良好であることを示している。

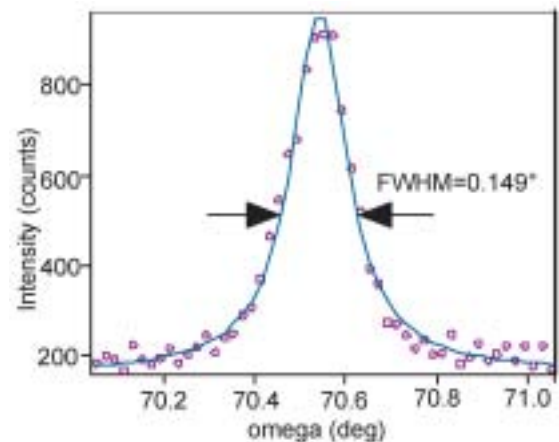


図1. Cu (001)-c (4 × 4)-In表面の (3/2, 0, 3/4) 反射の ω スキャン。

室温c (4 × 4) 相と高温p (2 × 2) 相について、(h, k, 0.3)における面内分布と、いくつかの逆格子ロッドの強度分布測定を行った。図2は、c (4 × 4) 相の面内強度分布である。63個の反射について測定を行った。等価な反射についての非対称因子は0.07であった。高温p (2 × 2) 相については34個の反射について測定を行い、非対称因子は0.11であった。いずれも、結晶のミスカット、

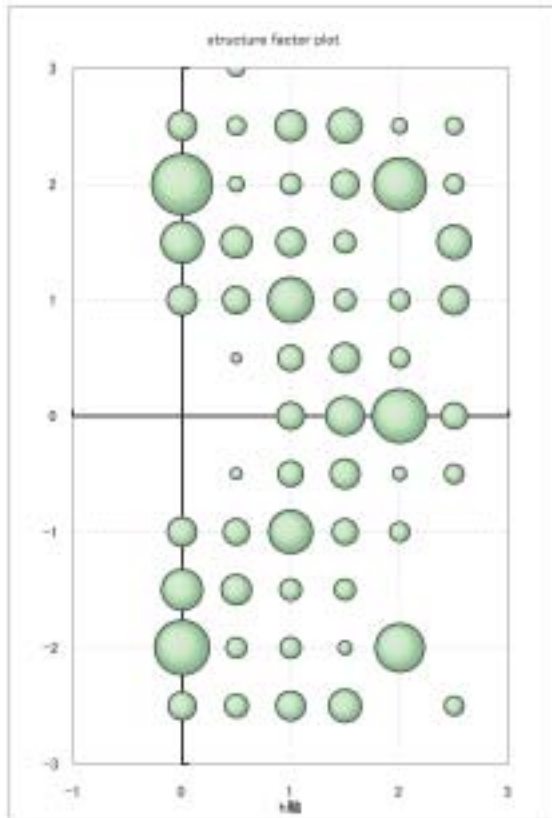


図2. c (4 x 4) 相の (h, k, 0.3) 反射の強度分布。

回折計の角度設定誤差等の影響が比較的小さく、良質な回折データが得られたことを示している。

図3は、室温c (4 x 4) 相と高温p (2 x 2) 相の (1, 1, l) ロッドの強度分布を比較したものである。いくつかのロッドにおいて、明確な相違が見られている。

現在、これらの実験データに基づいて、室温c (4 x 4) 相と高温p (2 x 2) 相の精密構造解析を進めている。被覆率から考えて、高温p (2 x 2) 相は何らかの無秩序性を含む構造であると予想されている。電荷密度波相転移の機構を理解するには、室温電荷密度波相の構造を明らかにすると同時に、高温相の無秩序性をモデル化し、定量的に理解する必要がある。

今後の課題

本研究では、In (0.63ML) / Cu (001) の

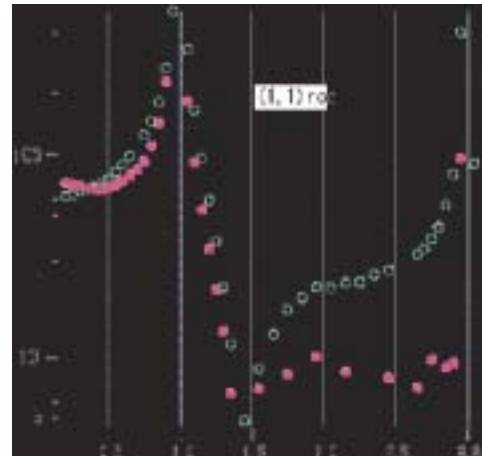


図3. 室温相 (●) と高温相 (○) の (1, 1, l) ロッドの比較

室温相と高温相についての良質なX線回折データを取得することができた。現在、両相の精密構造解析を進めている。至急完了したい。

角度分解光電子分光により得られた電荷密度波ギャップの温度依存性は、弱結合電荷密度波で期待されるBCS的な挙動にかなり近い。他方、高温相は無秩序性が高く、弱結合理論がただちに適用されるとは考えにくい。この状況を理解するためには、転移点近傍における格子変形を精密に解析する必要がある。この目的で、350-410 Kにおける回折プロファイルの精密測定を行いたい。

低温走査トンネル顕微鏡の結果によると、低温においては更に長周期の格子変調が出現する。この格子変調には、室温での不完全ネスティングにより取り残されたFermi面が関係している可能性がある。この相の精密構造解析も行う必要がある。

参考文献

- 1) T. Nakagawa et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 854 (2001).
- 2) T. Nakagawa et al., Phys. Rev. B **66**, 085402 (2002).