$ZrTe_3$における層間結合と電荷密度波不安定性の追究

真木　一
佐賀大学 理工学部 理工学科 物理学部門

$ZrTe_3$は擬 2 次元物質である。結晶構造をみると、三角柱形の $ZrTe_3$が b 軸方向に連なって鎖を作り、一対の鎖が a 軸方向に反転結合して ab 面で層を形成している。層間はファンデルワールス力による弱い結合である。そのため c 軸方向の電気抵抗率は、他の軸方向に比べて 10 倍程度大きい。この物質は 63 K 以下で電荷密度波(CDW)を示す。この CDW の変調は、b 軸方向に成分がなく、a 軸、c 軸方向でそれぞれ格子定数の約 14 倍、約 3 倍と報告されている。これは CDW が伝導性の高い方向に発達していないことを意味しており、非常に奇妙である。さらに 2 K 以下では a 軸方向に弱い超伝導が現れる。また、元素置換やインターカレーション、圧力印加などで CDW と超伝導の優勢関係は変化する。こうして、2 つの秩序が競合的に出現する仕組みを追究する研究対象としても $ZrTe_3$は興味深い。

我々は、シンクロトロン光を用いた角度分解光電子分光により、$ZrTe_3$ における CDW 発現の機構を調べている。特に層間方向における電子のエネルギー分散を実測し、ファンデルワールス結合であるにもかかわらず、層間で CDW が発達する理由を明らかにしたい。同時に、CDW や超伝導が 3 次元の秩序として安定化するためにはどんな要因が必要かについて知見を得たいと考えている。

報告会では、詳細と現状における実験結果を報告したい。

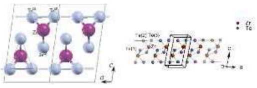
$ZrTe_3$における層間結合と電荷密度波不安定性の追究

Interlayer hybridization and CDW instability in $ZrTe_3$

真木　一, 藤本裕二, 山本　勇[A], 東　純平[A]
佐賀大学理工学部, [A]佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター

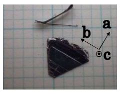
Introduction

$ZrTe_3$



Monoclinic,
a = 5.9 Å , b = 3.9 Å , c = 10.1 Å , β = 97.7°

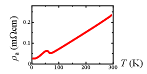
$ZrTe_3$ tetrahedral が b 軸方向に"鎖"を形成
van der Waals で c 軸方向に弱く結合



劈開性があり
糸状に割くこともできる

Charge Density Wave & Superconductivity

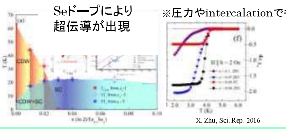
電気的異方性は 1:1:10
a軸方向の抵抗率異常：電荷密度波(CDW)



T_{CDW} = 63 K
q_{CDW} = (0.07a*, 0, 0.33c*)
鎖　劈開

Seドープにより
超伝導が出現

※圧力やintercalationでも



X. Zhu, Sci. Rep. 2016

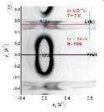
Motivation

超伝導とCDWの競合機構？
層間方向の電子構造？

van der Waals 結合方向でのCDW？
超伝導にも異方性

層間(c方向)の電子のエネルギー分散をみたい
ab面でもbc面でも清浄表面が準備できる！

先行研究はab面での研究中心

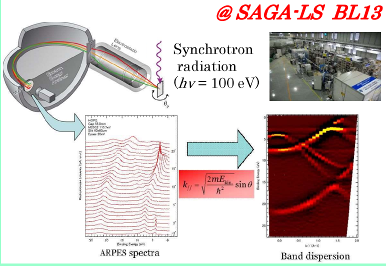


L.A. Gannon, Thesis. 2015

Experiments

Angle resolved photoemission spectroscopy

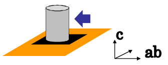
@SAGA-LS BL13



Sample Setup

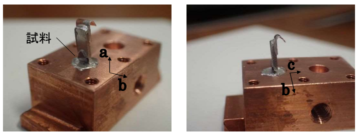
単結晶は、坂田先生（東理大）、出村先生（日大）にご提供頂きました
作製方法: 化学気相輸送法

ab 面の測定では、ピンをつけた試料をホルダーに取付けチャンバー内でピンを倒す→ 劈開される



試料はc軸方向に薄いので、bc(劈開)面を出すには工夫が必要

添え板を取り付けた試料をホルダーに立て、チャンバー内で板を押した



無事、清浄なbc面が得られた！

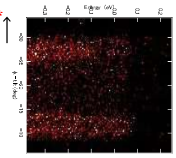
Results

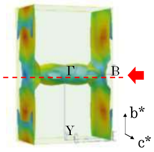
80 K

1. b*位置を決める

Tilt 角方向(b*)の状態分布から
最も適当なb*位置を決める

hν = 110 eV





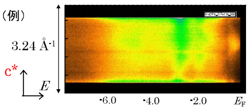
ΓB (a*/2) = 0.53 Å^{-1}
ΓY (b*/2) = 0.80 Å^{-1}
ΓZ (c*/2) = 0.31 Å^{-1}

このb*位置でa*方向の
電子状態変化をみることに

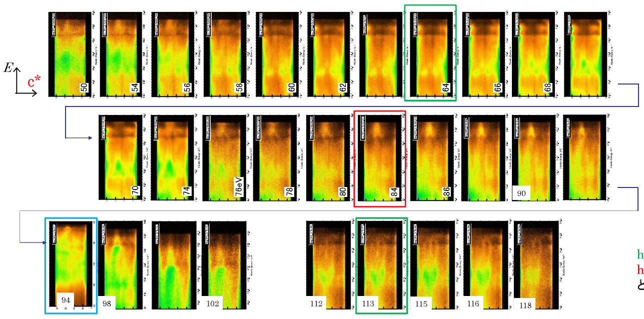
2. hν依存性（a*方向の変化）を確認する

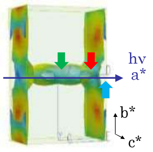
光子のエネルギーhνを変化させると
試料の深さ（a軸）方向の情報が得られる

（例）

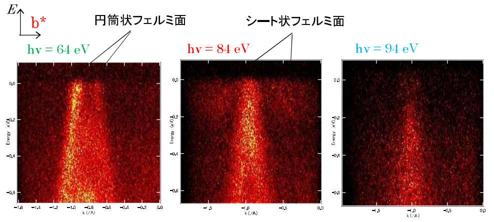


hν = 84 eV　に対応する a*位置での
c*方向のエネルギー分散
ただし、a*の位置はまだ不明

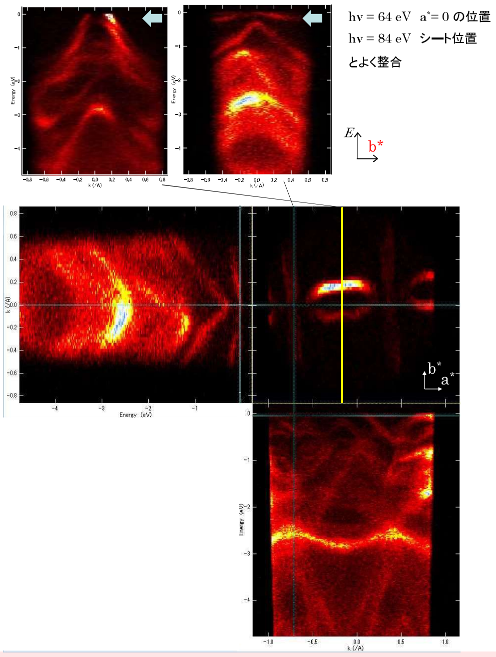




hν = 64 eV, 113 eV が a* = 0 の位置
hν = 84 eV がシート状構造の位置
と思われる



3. ab面測定データとの整合性を確認する

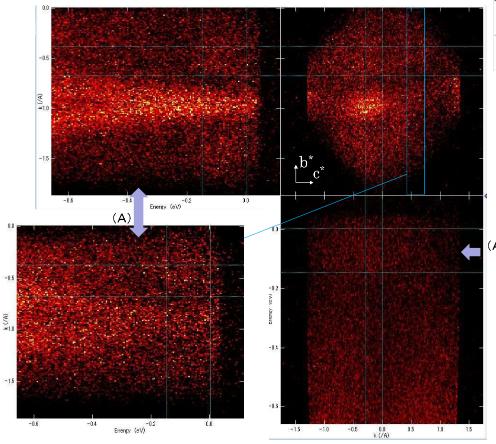


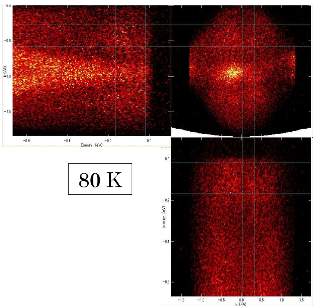
hν = 64 eV　a* = 0 の位置
hν = 84 eV　シート位置
とよく整合

4. シート位置（hν = 84 eV）でのフェルミ準位近傍の結果

CDW は通常、一次元的なフェルミ面に起因する
そこで、シート状フェルミ面（5p orbitals of Te(2)/Te(3)）に注目

11 K





CDW転移より高い温度（80 K）と低い温度（11 K）で、
大きな違いはみられない

低温では、シート部分の強度が部分的に弱くなっている
ように見える（A）

強度低下とCDWギャップの関係について、さらなる解析
が必要

Conclusion and Perspective

- $ZrTe_3$ の bc面での角度分解光電子分光測定に成功した
- 今後、MDC（momentum distribution curves）の評価、スペクトルの2階微分、価電子帯のエネルギー分散等の解析をさらに進めたい