

角度分解光電子分光によるカゴメ超伝導体 AV_3Sb_5 ($A = K, Rb, Cs$)の研究

理学研究科物理学専攻 加藤剛臣

V原子によって構成される理想的なカゴメ格子を有する AV_3Sb_5 ($A = K, Rb, Cs$)は、超伝導に加えて $2 \times 2 \times 2$ 周期の電荷密度波(CDW)を示すことが報告され、カゴメ格子に由来する鞍点(SP)構造など特徴的なバンド構造との関連が議論されている。本研究では、カゴメ超伝導体 AV_3Sb_5 の角度分解光電子分光(ARPES)測定を行うことでバンド構造を決定し、CDWおよび超伝導の起源について研究を行った。

CDWに伴う電子状態の変化を解明するため、 KV_3Sb_5 及び CsV_3Sb_5 についてSPを形成するバンドに着目してARPES測定を行った結果、 T_{CDW} 以下で開くCDWギャップの観測に成功し、また、ギャップサイズの面内及び面直波数依存性の測定では、SPで最大となる異方的なCDWギャップを見出した[1]。この結果は、カゴメ格子に由来するSPが面内 2×2 CDWの安定化に重要な役割を果たしていることを示している。また、バンド構造と物性の関連の解明には、圧力印加やキャリアドーピングによるバンド制御が有効な手段となるが、本研究では CsV_3Sb_5 について、Vと同族のNb置換による化学的圧力印加、および表面へのCs蒸着による電子ドーピングを行い、電子状態の変化をARPESにより決定した[2]。その結果、Nb置換試料では、Sb由来の電子バンドとV由来のSPの逆向きのエネルギーシフト及び、Nb置換によるCDW抑制に伴うギャップサイズの減少を見出した。以上の結果は、SPのシフトによるフェルミ準位上の状態密度の減少がCDW抑制の一因であり、またCDWギャップの減少やSb由来のフェルミ面の拡大が T_c の上昇をもたらしていることを示唆している。Cs蒸着を行った試料の測定では、電子ドーピングによるバンドのシフト量が軌道に依存することを見出した。さらに、この軌道に依存した電子ドーピングによってCDWが抑制されることを明らかにし、CDWに対するVの複数の軌道の寄与を明らかにした。

さらに、本研究では空間分解能の高いマイクロARPESを用いることで、 CsV_3Sb_5 に存在するSbおよびCsで終端された2種類のドメインを分離して電子状態を観測することに成功した[3]。その結果、Cs終端ドメインにおいて、 T_{CDW} 以下で3次元CDWによる k_z 方向のバンドの折り返しを見出した。一方、Sb終端ドメインでは、バンドの折り返しが消失することを明らかにし、CDWの3次元性が途切れていることを見出した。また、 RbV_3Sb_5 と KV_3Sb_5 についてもマイクロARPES測定を行い、3次元CDWに由来するバンド分裂がアルカリ元素に依存して変化することを見出した[4]。理論計算との比較から、観測したバンド分裂の変化はCDWの3次元構造の違いに起因すると結論した。

以上のように、本研究ではカゴメ超伝導体 AV_3Sb_5 の物性発現機構の解明を目的としてARPES測定を行った。その結果、CDW発現に対するSPの重要性と、超伝導およびCDW発現に対する多軌道効果を明らかにした。また、マイクロARPES測定により、表面終端と3次元CDWが電子状態に与える影響を解明した。

【参考文献】

- [1] T. Kato *et al.*, *Commun. Mater.* **3**, 30 (2022).
- [2] T. Kato *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 206402 (2022).
- [3] T. Kato *et al.*, *Phys. Rev. B* **106**, L121112 (2022).
- [4] T. Kato *et al.*, *Phys. Rev. B* **107**, 245143 (2023).