

## X 線 CTR 散乱における直接的界面構造解析法と トポロジカル絶縁体界面への応用

### Direct methods of X-ray CTR scattering structure analysis and their application to topological insulator interfaces

東大物性研<sup>1</sup>, JST さきがけ<sup>2</sup> 白澤徹郎<sup>1,2</sup>

ISSP, Univ. of Tokyo<sup>1</sup>, JST, PRESTO<sup>2</sup>, Tetsuroh Shirasawa<sup>1,2</sup>

E-mail: sirasawa@issp.u-tokyo.ac.jp

X 線 CTR 散乱 (X-ray crystal truncation rod scattering) は結晶の電子密度が表面で裁断されることで生じるロッド状の散乱であり, ロッドに沿った X 線散乱強度の解析によって, 表面界面の原子位置, 熱的 (または静的) な構造揺らぎ, 占有率などの結晶学的パラメータが得られる. 伝統的には, CTR 散乱強度分布を再現する構造モデルを試行錯誤的に見つけ出して, 最小二乗法によって精密化する方法が用いられてきたが, この方法を薄膜及び界面構造に適用するのは難しい. 薄膜内部構造は表面界面から伝搬する格子緩和や, 平均位置からの静的ゆらぎが膜厚方向に沿って一様ではなく, これらを正確に知るには, 薄膜及び界面に含まれる全ての原子, 言い換えると, 薄膜+界面の厚みをもつ“単位柱”の結晶学的パラメータを決定しなくてはならない. 多数の構造パラメータ全てを最小二乗法で大域的最小値に落とし込むのは難しいし, 界面に特殊な構造や組成混合 (intermixing) が有る場合にこれを試行錯誤的に決定するのは困難である. こうした背景から近年, CTR 散乱データから直接的に薄膜界面構造を解く方法が展開されている.

本講演では, 筆者等のグループで開発してきたホログラフィの原理に基づく界面原子像の再生法と, 反復位相回復法による構造最適化について説明し, 新しい量子状態として注目されているトポロジカル絶縁体界面への応用例を紹介する[1,2]. 代表物質である  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  薄膜の界面においては, ホログラフィ法によって厚さ 1 原子層程度の界面濡れ層が存在することを示し, 観察されていた電子状態や薄膜成長機構との関連を明らかにした[1]. 一方, Cu ドープした  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜においては, ドープ量に応じて特定の原子層間隔が  $10^2\text{\AA}$  のオーダーで変化することを明らかにし, 電子輸送特性やトポロジカル超伝導との関連を議論している[2].

[1] T. Shirasawa, J. Tsunoda, T. Hirahara, and T. Takahashi, Phys. Rev. B 87, 075449 (2013).

[2] T. Shirasawa, M. Sugiki, T. Hirahara, M. Aitani, T. Shirai, S. Hasegawa, and T. Takahashi, Phys. Rev. B 89, 195311 (2014).

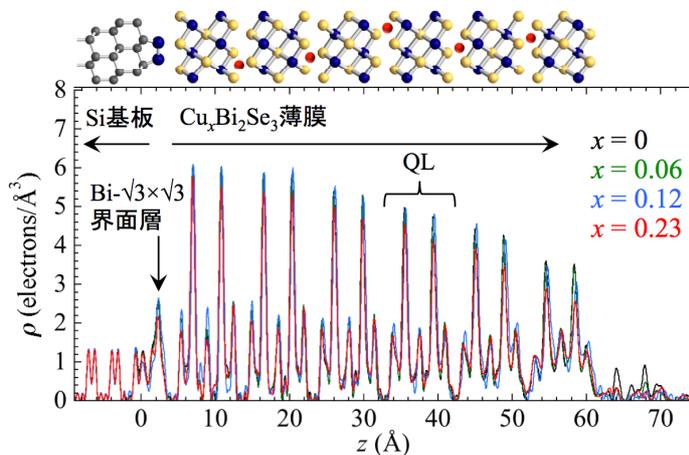


図 1. CTR 散乱の直接的構造解析で得られたトポロジカル絶縁体  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜の電子密度プロファイル。