

層状エレクトライド上のグラフェン： van Hove特異点に到る高濃度電子ドーピング

Ultra-heavy doping of graphene with a layered electride support:
probing a divergent van Hove singularity

○東工大¹、物材機構²、東北大³ ○井下 猛^{1,2}, 塚田捷³, 斎藤晋¹, 細野秀雄¹

○Tokyo Tech¹, NIMS², Tohoku Univ.³

○Takeshi Inoshita^{1,2}, Masaru Tsukada³, Susumu Saito¹, Hideo Hosono¹

E-mail: inoshita@mces.titech.ac.jp

エレクトライド、すなわち “電子が陰イオンの代わりとなっている結晶” は、化学分野では数十年前から知られていたが、近年新たな低次元物質として物理でも注目され始めている。ブレークのきっかけは、層状金属 Ca_2N が準2次元エレクトライド、すなわち $[\text{Ca}_2\text{N}]^+$ 層の間の隙間に余剰電子（アニオン電子） e^- が溜まって2次元電子系を形成した物質であることを示した実験である[1]。エレクトライドは仕事関数が小さいことから、電子ドーピング材料としての可能性を秘めている。最近、我々は DFT 計算により、層状エレクトライドではイオン層間のみならず表面の外側にも余剰電子が蓄積してクリーンな2次元電子系を形成することを示した[2]。本講演では、 Ca_2N 上にグラフェンを積層したヘテロ構造の電子状態を DFT 計算で調べた結果について報告する。

計算ではバルク Ca_2N を 18 原子層のスラブで近似し、その片面上にグラフェンを積んだスーパーセルを考えた。得られた Ca_2N およびグラフェン/ Ca_2N の部分電子密度 ($E_F - 0.5\text{eV} < E < E_F$) を Fig. (a)-(b) に示す。ただし電子密度は層 (a-b) 面内で平均し、層に垂直な方向を横軸 (z) にとった。 Ca_2N の表面外状態 (extrasurface state (ESS)) に存在した2次元電子がグラフェンの積層により完全に消滅し、ほぼ全てがグラフェンの $2p_z$ 軌道からなる π^* 状態に移動している。グラフェンにドーパされた電子の密度は $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ という大きな値であり、Fig. (c) の状態密度からわかるように、フェルミ準位は π^* バンドの van Hove 特異点 (状態密度の対数発散点) に達する。

このように、フェルミ準位が2次元電子バンドの鞍点に生じる van Hove 特異点近傍にある系では超伝導、強磁性、スピン・電荷密度波などの生じる可能性が指摘されており、グラフェン/ Ca_2N ヘテロ構造はその実験的検証の舞台として適当である。さらに、グラフェンに限らずさまざまな van der Waals 結晶を高濃度かつクリーンに n ドープするうえで、層状エレクトライド上への積層は有望な方法と考えられる。

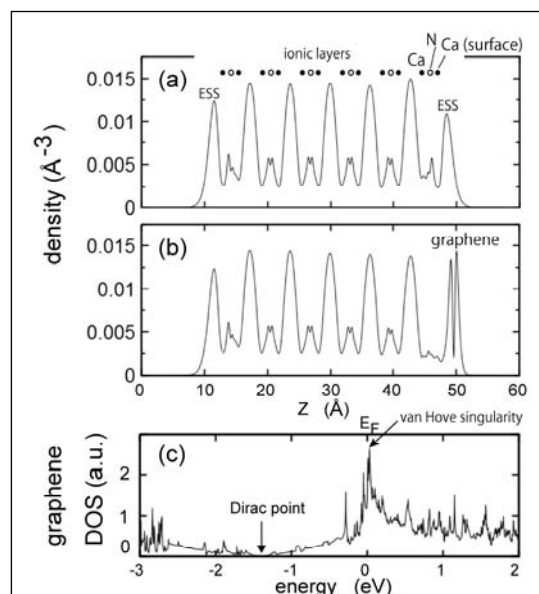


Fig. (a)-(b): Layer-averaged partial electron density ($E_F - 0.5\text{eV} < E < E_F$) for (a) Ca_2N and (b) graphene/ Ca_2N heterostructure. (c): Partial density of states of graphene in graphene/ Ca_2N .

[1] K. Lee et al., Nature **494**, 336 (2013).

[2] T. Inoshita et al., Phys. Rev. B **95**, 165430 (2017).