

Li インターカレートしたグラフェンにおける van Hove 特異性の層数依存性

○一ノ倉聖^{1,*}, 豊田雅之¹, 橋爪瑞葵¹, 堀井健太郎¹, 日下翔太郎¹, 出田真一郎²,
田中清尚², 清水亮太³, 一杉太郎³, 斎藤晋¹, 平原徹¹

¹東京工業大学理学院, ²分子科学研究所 UVSOR, ³東京工業大学物質理工学院

Thickness-dependence of van Hove singularity in Li-intercalated graphene

○S. Ichinokura^{1,*}, M. Toyoda¹, M. Hashizume¹, K. Horii¹, S. Kusaka¹, S. Ideta²,
K. Tanaka², R. Shimizu³, T. Hitosugi³, S. Saito¹, and T. Hirahara¹

¹ Department of Physics, Tokyo Institute of Technology, ² UVSOR Facility, Institute for Molecular Science,

³Department of Applied Chemistry, Tokyo Institute of Technology

最近、2 次元物質中でフラットバンドによる多体効果の増強が精力的に研究されている¹⁾。フラットバンドがフェルミ面上に現れたとき、van Hove 特異性 (VHS) と呼ばれる状態密度の発散が起こる。グラフェンには約 2eV 非占有側にフラットバンドが存在する。電子供与性物質からの過剰なキャリアドーピングにより、それを占有状態とすることができる。多体効果による多彩な電子相図を調べるには、さらに電界効果などにより VHS 条件の近傍でフェルミ準位を細かく制御する必要がある。Li は電気化学的インターカレーションが可能であり、制御性が高い。Li 侵入グラフェンの電子状態は真空蒸着と角度分解光電子分光法により調べられてきたが、VHS に着目してフェルミ面近傍を解析した例はこれまでなかった。また、Li が侵入した多層グラフェンの電子状態も調べられていなかった。そこで、本研究では層数制御したグラフェンに Li をインターカレートさせ、VHS に着目してバンド構造測定を行い、さらに第一原理計算と比較した。

SiC 基板上の単層グラフェンに Li を蒸着すると、グラフェン下のバッファ層が遊離し、2 層グラフェンとなる。Li は更にその間に $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 周期で侵入する (Fig. 1a)。すると Γ 点を中心とした 2 重のディラックコーン π_1^* , π_2^* が生じる²⁾。Li 侵入 2 層グラフェンのフェルミ面近傍のバンド構造を Fig. 1b に示す。 π_2^* は $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ ブリルアンゾーンの M 点において VHS 条件を満たしている。同様に n 層グラフェンからは $n+1$ 層の Li 侵入グラフェンができる。そこで単層から多層のグラフェンに Li を侵入させ、バンド構造を系統的に調べた。すると、層数増加に伴いフラットバンドは高束縛エネルギー側に単調にシフトしたが、変化は最大でも 60 meV にとどまった。しかし第一原理計算を行うと、層数変化に

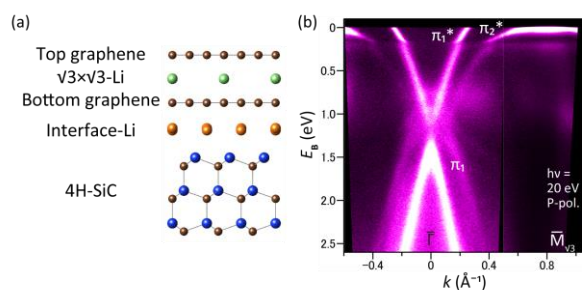


Fig. 1. SiC 基板上の Li 侵入 2 層グラフェンの (a) 結晶構造と (b) Γ 点近傍の電子状態。

よりフラットバンドのエネルギーは不規則に変化した。これは主にグラフェン層間の相互作用の変化を反映している。実験で見られたシフトも層間相互作用の変化が要因であると考えられる。しかし、計算ではフラットバンドが最大 0.4 eV 動いていたため、何らかの機構によりシフトが抑制されていると考えられる。SiC 基板を含んだモデルで計算を行うと、基板の表面状態がディラックバンドと混成し、フェルミ面近傍の電子状態に変化を与え、バンドシフトを抑制し得ることが明らかとなった。また、グラフェンと SiC の界面にはショットキー接合が生じており、SiC 基板はバックゲートとして用いることができる。従って、Li 侵入グラフェンにおいては層数および電界効果によって VHS 点近傍でのフェルミ面制御が可能であることがわかった。

文 献

- 1) Y. Cao *et al.*, Nature **556**, 43-50 (2018).
- 2) C. Bao *et al.*, Phys. Rev. Lett. **126**, 206804 (2021).

*E-mail: ichinokura@phys.titech.ac.jp