

1. 序論 (はじめに)

1T-TaS₂ は遷移金属ダイカルコゲナイド (TMDC) の一種であり、層状の構造を持つ物質である。低温では $(\sqrt{13} \times \sqrt{13})R13.9^\circ$ の整合的な電荷密度波 (CDW) を形成する[1]。このとき、ウィグナー・ザイツセル内の原子配置は図 1 に示すようになり、セル内には Ta 原子が 13 個存在する。それらの原子は、位置に応じて Center, Inner, Outer の 3 種類に分類される。

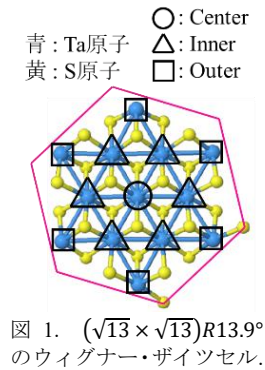


図 1. $(\sqrt{13} \times \sqrt{13})R13.9^\circ$ のウィグナー・ザイツセル。

先行研究[2]では、1T-TaS₂ の Ta 4f 電子の X 線光電子回折 (XPD) パターン (図 2 参照) が測定された。その結果、Ta 原子の位置の違いによる Ta 4f の束縛エネルギーの化学シフトが求められた。また、Center & Inner サイトと Outer サイトの XPD パターンの比較 (図 3 参照) が示された。

本研究では、この先行研究で得られた Ta 4f の束縛エネルギーをもとに、Center, Inner, Outer それぞれの Ta 4f の XPD パターンを計算した。

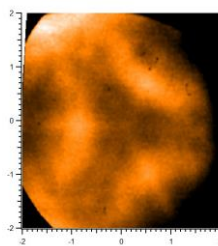


図 2. $h\nu = 126 \text{ eV}$ に対する、Ta 4f の XPD 実験結果[2]。

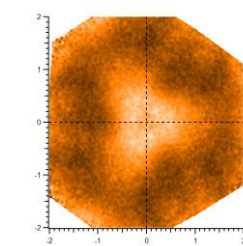


図 3. Inner の Ta と Outer の Ta に由来する光電子回折の比率 Outer / Inner.

2. 研究方法

LEED によって得られた低温での 1T-TaS₂(1000) の表面構造[1]をもとに、EDAC[3]を用いて、XPD パターンを計算した。

ここで XPD とは、表面の原子配列を解析する手法である。XPD では、X 線によって励起された光電子が球面波として拡がり、周囲の原子による散乱

波と干渉することで回折パターンが形成される。この回折パターンを解析することで、光電子放出原子 (エミッター) 周辺の構造情報が得られる。

3. 結果

Center, Inner, Outer に位置する Ta 原子をエミッターとしたときの、それぞれの 4f 電子の XPD パターンの計算結果を図 4(a), (b), (c)に示す。また、セル内の 13 個の Ta 原子をすべてエミッターとし、同様に計算した結果を図 4(d)に示す。

CDW 状態の影響によって、エミッターの位置により回折パターンに若干の違いが生じることが分かった。

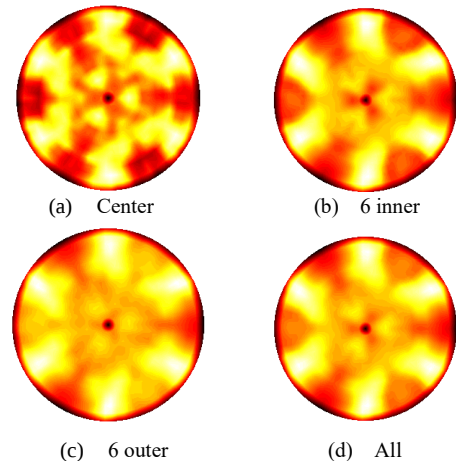


図 4. Ta 4f の XPD 計算結果. $h\nu = 126 \text{ eV}$ となるように設定した。右円偏光での結果と左円偏光での結果を足し合わせた。また、それぞれ相対強度で表した。

4. 結論 (まとめ)

本研究では、1T-TaS₂ の Center, Inner, Outer それぞれの Ta 4f の XPD パターンを計算した。その結果、実験では測定できない、エミッターの位置の違いによる回折パターンの変化が確認された。

参考文献

- [1] Gevin von Witte et al., "Surface structure and stacking of the commensurate $(\sqrt{13} \times \sqrt{13})R13.9^\circ$ charge density wave phase of 1T-TaS₂(0001)", *Phys. Rev. B*, 100, 155407, (2019).
- [2] 松井 文彦, 学会発表スライド.
- [3] F. J. Garcia de Abajo, M. A. Van Hove, and C. S. Fadley, "Multiple scattering of electrons in solids and molecules: A cluster-model approach", *Phys. Rev. B*, 63, 075404, (2001).