

## ファンデルワールス積層体における電子構造の直接観測

坂野 昌人

東京大学大学院工学系研究科

単層グラフェンに代表されるようなテープを用いた機械的剥離によって得られる微小（ $\sim 0.01$  mm）二次元結晶を積層したファンデルワールス積層体は、積層する際のひねり角度や原子層の種類といった多岐にわたる自由度が存在しており、未開拓物性の宝庫として盛んに研究が行われている。本発表では BL28-A における顕微角度分解光電子分光によって、二次元結晶やファンデルワールス積層体の電子構造を直接観測した研究成果を紹介する。

テープを用いた簡便な単層グラフェンの作製技術の確立を皮切りに、二次元結晶の作製・転写・積層技術は日進月歩の発展をとげている。そのような二次元結晶を重ね合わせたファンデルワールス積層体では非自明なバンド構造が形成され、構成要素が単独では発現し得ない新奇物性が発現し得る。現在ではグラフェンのみならず、遷移金属ダイカルコゲナイドに代表されるような層状化合物において二次元結晶が作製され、それらの積層体における物性研究・材料開発が進められている。従来研究の多くは、剥離によって得られる二次元結晶を用いて作製されたデバイスの電気伝導特性や光学特性を計測し、それと第一原理バンド計算の結果を比較することによって研究が進められてきた。しかし、微小（ $\sim 0.01$  mm 程度）な二次元結晶に適用可能な実験手法は限られていることから、計算の入力に必要な原子座標を実験的に評価することは困難であり、また計算精度やコードの選定に依存して実験結果を上手く再現できないという課題があった。さらに、より複雑なファンデルワールス積層体が研究対象となった際には、結晶構造が大規模な非周期構造となるために計算コストの問題も顕在化してくる。そのため、特異な電気伝導特性や光学特性を発現する電子構造を直接観測できることが望ましい。

そこで我々は、剥離法によって作製されたツイスト積層体などの複雑なファンデルワールス積層体の電子構造を角度分解光電子分光によって直接観測する一連の手法を開発した[1]。角度分解光電子分光測定を行うためには、1. 超高真空下における清浄表面の取得、2. 表面敏感な手法であること、3. 光電子放出に伴う帯電の抑止、4. 微小試料を測定するための光源の顕微化、などの多岐にわたる課題がある。本研究では、試料作製する際に吸着力の異なる 2 種類の有機ポリマーを用意し、ヘテロ構造を上下反転（フリップ）する過程を導入することによってそれらの課題を克服し、ファンデルワールス積層体における電子構造の直接観測を可能にした。

本講演では、上記の試料作製方法と開発した顕微レーザー角度分解光電子分光装置を用いて 2 層 $\sim$ 5 層  $\text{WTe}_2$  フレークのバンド構造を直接観測した研究[2]や、BL28-A における顕微角度分解光電子分光[3]を用いた 180 度ツイスト 2 層  $\text{ReSe}_2$  の電子構造の研究[4]を紹介する。

[1] S. Masubuchi\*, M. Sakano\*, Y. Tanaka\* (\*equally contributed) *et al.*, *Sci. Rep.* **12**, 10936 (2022).

[2] M. Sakano\*, S. Masubuchi\*, Y. Tanaka\* (\*equally contributed) *et al.*, *Phys. Rev. Research.* **4**, 023247 (2022).

[3] M. Kitamura *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **93**, 033906 (2022).

[4] S. Akatsuka, M. Sakano *et al.*, *Phys. Rev. Research* **6**, L022048 (2024).