

## 論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称	博士（理学）	氏名	Wang Xiaoxiao
学位授与の要件	学位規則第4条第①・②項該当		
論文題目			
<b>Orbital and Spin Dependent Electronic Structures of Non-symmorphic Dirac Nodal Line Semimetals</b> (非共型ディラック線ノード半金属の軌道およびスピんに依存した電子構造)			
論文審査担当者			
主査	教授	木村 昭夫	
審査委員	教授	黒岩 芳弘	
審査委員	教授	島田 賢也 (放射光科学研究センター)	
審査委員	准教授	樋口 克彦 (先端物質科学研究科)	
〔論文審査の要旨〕			
<p>固体の電氣的、光学的物性は、固体中の電子構造によって支配されている。その電子構造を実験的に決定することは、固体の示す巨視的物性現象への理解につながり非常に有用である。特に最近、グラフェンの発見を皮切りに直線的なバンド分散形状を示すディラック電子系は、電子の有効質量がゼロとなることが報告された。このようなディラック電子系物質では、摩擦のない電子輸送現象が期待され、消費電力を大幅に下げる電子デバイスへの応用の観点から注目を集めている。</p> <p>申請者は ZrSiS や HfSiS に代表されるディラック線ノード半金属に着目して研究を行った。これらは P4/nmm の空間群に属し、バンド構造計算からノンシンモルフィックな空間群に守られたバンド交差、いわゆるディラックコーンと呼ばれる直線的なバンド分散構造を形成することが予言されている。それらのディラックコーンは異方的で特定の方向に線ノードを有するのが特徴である。この特異な線ノードディラックコーンは通常のディラックコーン半金属で見られる点ノードと異なり、よりあらわに伝導現象をはじめとした巨視的な量子現象が現れることが期待され興味深い。</p> <p>申請者はこれらの物質の巨視的な量子現象に関わるバルクや表面のスピンの軌道に依存した電子構造の解明に取り組んだ。先行研究では ZrSiS や HfSiS について表面バルクバンドの観測にとどまり、スピン構造やバンドの軌道対称性については未解明であった。</p> <p>申請者はまず、周期性の途切れた表面に現れる特異な電子状態を調べるために、広島大学放射光科学研究センター（ビームライン BL-9B）にてスピン角度分解光電子分光を行なった。その結果、表面状態にスピンによる分裂構造があることを明らかにした。そのフェルミ面に沿ってスピン方向を調べたところ、スピンの方向が一方に向いた、標準的なラシュバ型のスピントクスチャーとは大きく異なっていることを初めて明らかにした。このような特異なスピントクスチャーの形成起源を調べるためには、そのフェルミ面を構成している電子軌道を特定する必要がある。そこで申請者は、同センターBL-1にて直線偏光依存角度分解光電子分光を行い、表面準位に由来するフェルミ面を構成する電子軌道対称性を同定し</p>			

た。これらのスピントクスチャーや軌道対称性は理論計算でも再現された。さらにモデル計算からこの表面状態がラシュバ型とドレッセルハウス型の両方が競合した結果現れたものであることを結論した。申請者が明らかにした同一方向を向くスピントクスチャーは、標準的なラシュバ効果で形成される標準的なスピントクスチャーに比べて電子の後方散乱を大幅に抑制するため、スピンのコヒーレンス時間を伸ばすことができる。本研究では、このようなスピントクスチャーを電場などの外場をかけることなく形成する方法を示したとも言える。

申請者は、さらに  $\text{ZrSiS}$  と  $\text{HfSiS}$  の混晶  $\text{Zr}_{1-x}\text{Hf}_x\text{SiS}$  について角度分解光電子分光を用いて直線的に分散するバンド構造（ディラックコーン）についてその軌道対称性を同定するべく、偏光配置を変えて角度分解光電子分光を行なった。その結果、ディラックコーンを形成する2つのバンドが異なる軌道対称性を持つことがわかった。また、その軌道対称性が  $\text{Hf}$  濃度にも依存することも明らかになった。 $\text{ZrSiS}$  の  $\text{Zr}$  サイトに  $\text{Hf}$  を導入量の増加に伴い、バルクバンドにおけるエネルギーギャップが大きくなることがわかった。これは  $\text{Zr}$  原子よりも  $\text{Hf}$  原子の方が原子番号が大きくなりスピントクス相互作用が大きくなることから、スピントクス相互作用によって開いたエネルギーギャップであることがわかる。それに伴い、先述の表面バンドの分裂の大きさも顕著になっていった。

申請者はこれまで観測が行われていなかった  $\text{HfSiS}$  表面状態のスピントクス成分を初めて実験的に捉え、その形成起源まで明らかにした。さらに  $\text{Zr}_{1-x}\text{Hf}_x\text{SiS}$  の  $\text{Hf}$  濃度依存性から、バルクバンドのエネルギーギャップや表面バンドの分裂構造の起源がスピントクス相互作用であることをつきとめた。これら学位申請論文の研究成果は、指導教員を含む複数の研究者との共同研究によるものであるが、研究の全過程において申請者の主体的・中心的な寄与が認められる。

以上のことより、審査の結果、本論文の著者は博士（理学）の学位を授与される十分な資格があるものと認める。

公表論文

(1) Disentangling orbital and spin textures of surface-derived states in non-symmorphic semimetal HfSiS

Xiaoxiao Wang, Jiahua Chen, Mingtian Zheng, Tatiana V. Menshchikova, Igor P. Rusinov, Eike F. Schwier, Filip Orbanić, Shilong Wu, Kazuki Sumida, Tomoki Yoshikawa, Koji Miyamoto, Munisa Nurmamat, Taiji Okuda, Kenya Shimada, Mario Novak, E. V. Chulkov and Akio Kimura  
Physical Review B **100**, 205140 (2019).

参考論文

(1) Element-specific density of states of Co<sub>2</sub>MnGe revealed by resonant photoelectron spectroscopy  
Takashi Kono, Masaaki Kakoki, Tomoki Yoshikawa, Xiaoxiao Wang, Kazuki Sumida, Koji Miyamoto, Takayuki Muro, Yukiharu Takeda, Yuji Saitoh, Kazuki Goto, Yuya Sakuraba, Kazuhiro Hono, and Akio Kimura

Physical Review B **100**, 165120 (2019).

(2) Highly anisotropic interlayer magnetoresistance in ZrSiS nodal-line Dirac semimetal

M. Novak, S. N. Zhang, F. Orbanić, N. Bilićskov, G. Eguchi, A. Kimura, X. X. Wang, T. Osada, K. Uchida, M. Sato, O. V. Yazyev, Q. S. Wu, and I. Kokanović

Physical Review B **100**, 085137 (2019).

(3) Interface enhanced superconductivity in monolayer FeSe films on MgO (001): charge transfer with atomic substitution

Guanyu Zhou, Qinghua Zhang, Fawei Zheng, Ding Zhang, Chong Liu, Xiaoxiao Wang, Can-Li Song, Ke He, Xu-Cun Ma, Lin Gu, Ping Zhang, Lili Wang, Qi-Kun Xue

Science Bulletin **63**, 747 (2018).

(4) Enhancing the quantum anomalous Hall effect by magnetic codoping in a topological insulator

Yunbo Ou, ChangLiu, Gaoyuan Jiang, Yang Feng, Dongyang Zhao, Weixiong Wu, Xiaoxiao Wang, Wei Li, Canli Song, Li-Li Wang, Wenbo Wang, Weida Wu, Yayu Wang, Ke He, Xu-Cun Ma, and Qi-Kun Xue

Advanced Materials **30**, 1703062 (2017).

(5) Interface induced high temperature superconductivity in single unit-cell FeSe on SrTiO<sub>3</sub>(110)

Guanyu Zhou, Ding Zhang, Chong Liu, Chenjia Tang, Xiaoxiao Wang, Zhi Li, Can-Li Song, Shuaihua Ji, Ke He, Lili Wang, Xu-Cun Ma, Qi-Kun Xue

Applied Physics Letters **108**, 202603 (2016).