

基板上 Si 単原子層膜（シリセン）でのディラック電子の消失と出現

グラフェンは、平面上に隙間なく並べられた正六角形の各頂点に炭素原子が位置した単原子層物質であり、太古の昔から地球上に存在するグラファイト（黒鉛）を実験室で剥離することにより、その存在が初めて確認された（Geim, Novoselov: 2010 年ノーベル物理学賞）。このグラフェンは、蜂の巣のような特異な構造における高い対称性に起因して、物性を担うフェルミ準位付近の電子が、質量 0 の相対論的フェルミオンに対するディラック方程式（ワイル方程式）に従うことが示されている。これをディラック電子と呼んでいる。このディラック電子による異常量子ホール効果などの興味深い物性に加え、グラファイトに起源を有する高い電子移動度、構造の頑健さにより、現在のテクノロジーの限界を打ち破る材料とも期待されている。

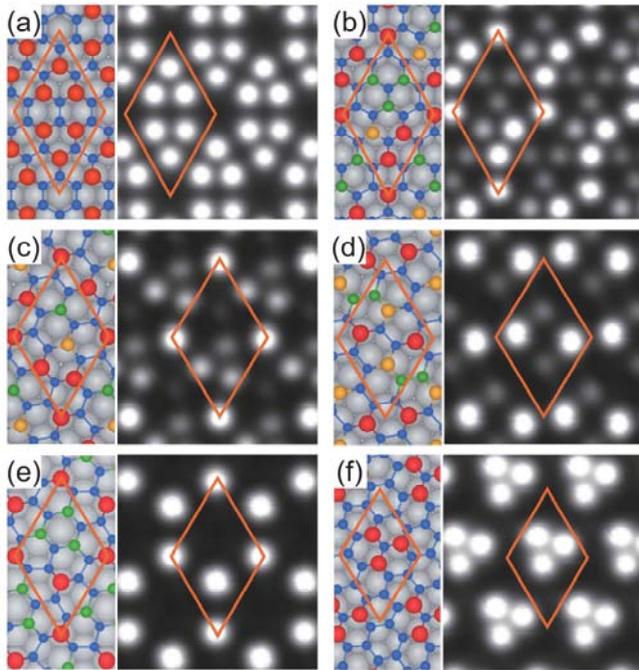


図 1: 計算された STM イメージ (右側) と対応する原子構造の平面図。銀(111)面の周期性に対して、 4×4 [(a) と (b)]、 $\sqrt{13} \times \sqrt{13}$ [(c) と (d)]、 $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ [(e) と (f)] の長周期構造が存在し、それぞれ最安定構造 [(a), (c), (e)] と準安定構造 [(b), (d), (f)] が見出された。平面図におけるシリセンを表すボールの大小は、シリセン膜の原子スケールでの凹凸を示している。大きな灰色のボールは基板の銀原子の位置である。平面内での単位胞は直線(オレンジ色)で示してある。

しかし、既存のテクノロジーを支えてきた Si 材料に対する、人類の微細加工技術の極限までの発展を活用するには、炭素原子と同じ IV 族である Si 原子による蜂の巣構造単層膜 [名付けてシリセン (silicene)] の生成が重要であり、それが実現されれば計り知れないインパクトが生まれる。しかしながらひとつの問題は、Si 原子に対しては、グラファイトに対応するような、蜂の巣構造の原子層が重なったバルク物質は、自然界に存在しないことである。従ってシリセンは、基板として他物質を用い、その上に生成することになる。つまり異なる物質との界面の制御と、その界面が電子物性とくにディラック電子に及ぼす影響の解明が重要な研究課題となる。実験的には、銀の(111)面を基板として用いたシリセンの生成がすでに行われ、生成されたシリセンの原子構造は走査型トンネル顕微鏡 (STM) 実験で明らかにされている。しかし、ディラック電子がこの基板上的シリセンでも存在するのか、するとしでもどのような変調を受けるかについてのコンセンサスは得られていなかった。

今回、東京大学工学系研究科物理工学専攻の研究グループは、量子論に立脚した第一原理計算 (注 1) により、銀(111)面上の様々な安定構造を探索し、走査型トンネル顕微鏡実験で得られている原子構造を見事に再現すると同時に、未だ実験的に見つかっていないシリセン構造をも見いだした (図 1)。さらにいずれのシリセン構造においても、物性を担うフェルミ準位付近には、ディラック電子は存在しないことを発見した。これは、シリセン中の Si 原子と基板の Ag 原子が強く結合し、そのために両者の軌道の混成が生じるためである。この知見から、シリセンと強からず弱からずの結合を形成する基板を用いれば、ディラック電子がフェルミ準位付近に発現する、安定なシリセン膜が生成されることが予想される。

実際、第一原理計算により、水素終端 Si(111)表面およびヘキサゴナル BN 膜がその条件を満たす、格好の基板となることを見出された (図 2)。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 *Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ)* の 2013 年 6 月号に掲載された。

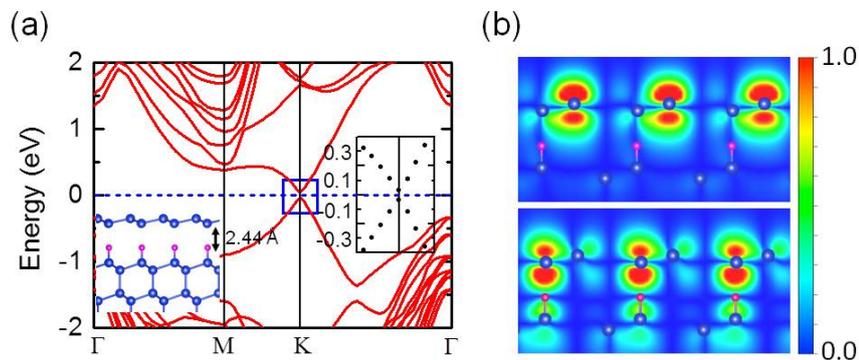


図 2: 水素終端 Si(111)面上のシリセンのバンド構造(a)とフェルミ準位付近の電子状態の波動関数(b)。計算で求めた安定構造の側面図が(a)に示してあり、大きい丸(青)が Si 原子、小さい丸(桃色)が水素原子である。フェルミ準位 [(a)の縦軸の原点に取ってある] 付近ではバンドは線形分散を示し、ディラック電子の特徴を示している。その波動関数を表示すると、(b)のように Si の p 軌道から成っている。シリセン膜にはわずかな凹凸があるため、Si の s 軌道の寄与もあるが、その効果は小さい。

注 1: 多電子系を扱うひとつの手法である密度汎関数理論に基づく全エネルギー電子構造計算。多体の交換相関エネルギーに対するいくつかの近似が用いられている。大規模計算を、京コンピュータに代表される超並列アーキテクチャで行うための、実空間アプローチ (RSDFT コード) が採用されている。

原論文

[Absence of Dirac Electrons in Silicene on Ag\(111\) Surfaces](#)

[Zhi-Xin Guo, Shinnosuke Furuya, Jun-ichi Iwata, and Atsushi Oshiyama: J. Phys. Soc. Jpn. 82 \(2013\) 063714](#)

問合せ先: 押山 淳 (東京大学大学院工学系研究科)