

グラフェンの 100 倍以上のキャリア数を持つ導電性シート 世界初「ディラック線」を持つ単原子シートの発見

1. 発表者：

松田 巖（東京大学物性研究所 准教授）
杉野 修（東京大学物性研究所 准教授）
Baojie Feng（広島大学放射光科学研究センター 助教）

2. 発表のポイント：

- ◆銅シリサイド Cu_2Si 単原子シートを合成、その中に「ディラック線（注1）」の存在を発見。
- ◆本シートに「ディラック線」が存在することを最先端の実験と理論で実証。
- ◆グラフェンの 100 倍以上のキャリア数を持つ導電性シートとして次世代エレクトロニクスを飛躍的に向上させる可能性。

3. 発表概要：

東京大学物性研究所の松田巖准教授、杉野修准教授、Tai C. Chiang 客員教授らの研究グループは、広島大学放射光科学研究センターの Baojie Feng 助教、中国科学院の Lan Chen 教授・Kehui Wu 教授、北京工業大学の Yugui Yao 教授、イタリア ELETTRA 放射光施設の Paolo Moras 主任研究員と共同で、銅（Cu）とケイ素（Si）からなる化合物の単原子シート、銅シリサイド（ Cu_2Si ）を合成し、その中に「ディラック線」が存在することを発見しました（図1）。

炭素の単原子シートであるグラフェンには「ディラック点（注1）」という特殊な電子状態が存在し（図2）、電子があたかも質量がない粒子として物質中を高速に移動するために、この物質は革新的エレクトロニクス材料として注目されています。もしもディラック点に類似した特殊な電子状態が他の単原子シートに存在すれば、さらに新しい動作原理に基づく高速エレクトロニクスが生まれる可能性が出てきます。

東京大学物性研究所の松田巖准教授らは、銅シリサイドの単原子シートを合成し、その電子状態を調べたところ、「ディラック線」とよばれる新たな状態が存在していることを発見しました。この状態を精密な第一原理計算（注2）により明らかにし、銅シリサイドが持つ固有の対称性によって生じている可能性が高いことを見出しました。さらに本シートについて、電気伝導を担うキャリア数を光電子分光により評価したところ、グラフェンの 100 倍以上多いことが分かりました。

「ディラック線」の存在は三次元の物質では確認されていますが、電子材料として利用可能な物質で見つかったのはこれが初めてです。

本研究成果は、新材料「銅シリサイド（ Cu_2Si ）の単原子シート」が示す新奇な電子状態の発見のみならず、次世代材料として注目されている単原子シートのディラック物質に対して新しい設計指針を提供します。またこの新材料は銅とシリコンという安価な元素から構成されており、今後、本研究成果をもとに、ディラック物質の工業利用への新しい展開が期待されます。

本研究成果は総合科学雑誌の速報誌「Nature Communications」（10月18日（水）オンライン版）に掲載されました。

4. 発表内容：

背景

最近、微細化が進められているナノデバイスの究極の素子として、厚さが原子1層分である単原子シートに注目が集まっています。炭素の場合は「グラフェン」として知られ、エレクトロニクスなどへの応用研究が世界中で盛んに行われています。最近では、ケイ素から構成される「シリセン」やホウ素から構成された「ボロフェン」などの単原子シートの報告が続きました。新しい物質には、既成概念を越える物性の可能性が秘められており、新たな動作原理に基づく次世代デバイス開発にも期待が寄せられています。

研究成果

本研究グループは、新材料として「銅シリサイド (Cu_2Si) の単原子シート」を銅単結晶基板の上に合成することに成功し、その電子状態をイタリア ELETTRA 研究所と広島大学放射光科学研究センターの放射光を利用した光電子分光法（注3）によって直接観測し、その結果を第一原理計算で精密に解析しました。

その結果、本シートは「ディラック線」を有した世界初の2次元ディラック物質であることが明らかになりました。グラフェンやボロフェンなどの2次元ディラック物質は「ディラック点」と呼ばれる特異的な電子状態を持つことが知られており、それが新奇な性質の起源となります。最近、世界中でこの「ディラック点」が線状に並んだ新たな「ディラック線」が発見され、新たな材料の開発が行われつつあります。

さらに光電子分光から得られた結果を用いて、本シートにおける電気伝導を担う電子であるキャリア密度を評価したところ 10^{16} 個/ cm^2 であることが分かりました。これは、現在唯一の導電性単原子シートと使用されているグラフェンの100倍以上の値であり、飛躍的な結果と言えます。

「ディラック線」を有する物質は、これまで3次元結晶の報告に限られており、今回、物質の最小構成単位である単原子シートにおいて、「ディラック線」を持つものを世界で初めて発見しました。

今後の展開

本研究は、銅シリサイド (Cu_2Si) 単原子シートがディラック線を持つことを世界で初めて発見し、それがグラフェンの100倍以上のキャリア数を持つことを示しました。

単原子シートのディラック物質は、エレクトロニクスの新たな動作原理を担うものとして、注目されています。これまでの研究では「ディラック点」を持つ物質設計及び物質開発しかなされていみせんでしたが、本研究により新たに「ディラック線」を持つものも加わりました。

今後、本研究成果を元に、さらに多種多機能な原子シートの開発が促進され、私たちの社会を支えるエレクトロニクスの発展がより加速すると期待されます。

5. 発表雑誌：

雑誌名：Nature Communications

論文タイトル：Experimental realization of two-dimensional Dirac nodal line fermions in monolayer Cu_2Si

著者：Baojie Feng, Botao Fu, Shusuke Kasamatsu, Suguru Ito, Peng Cheng, Cheng-Cheng Liu, Ya Feng, Shilong Wu, Sanjoy K. Mahatha, Polina Sheverdyeva, Paolo Moras, Masashi Arita, Osamu

Sugino, Tai-Chang Chiang, Kenya Shimada, Koji Miyamoto, Taichi Okuda, Kehui Wu, Lan Chen, Yugui Yao, and Iwao Matsuda

DOI : 10.1038/s41467-017-01108-z

7. 問い合わせ先 :

【研究に関すること】

東京大学物性研究所機能物性研究グループ

准教授 杉野 修 (スギノ オサム)

TEL: 04-7136-3290、04-7136-3296

E-mail : sugino@issp.u-tokyo.ac.jp

東京大学物性研究所極限コヒーレント光科学研究センター (LASOR)

准教授 松田 巖 (マツダ イワオ)

TEL: 04-7136-3402 (柏キャンパス) 、 0791-58-0802 ext. 3619 (播磨分室)

FAX: 04-7136-3283 (柏キャンパス) 、 0791-58-1886 (播磨分室)

Email: imatsuda@issp.u-tokyo.ac.jp

広島大学放射光科学研究センター

教授 島田 賢也 (シマダ ケンヤ) 、 助教 FENG BAOJIE (フエン バオジー)

TEL:082-424-6999

Email:kshimada@hiroshima-u.ac.jp

【報道に関すること】

東京大学物性研究所 広報室

TEL: 04-7136-3207

E-mail: press@issp.u-tokyo.ac.jp

広島大学 広報グループ

TEL:082-424-6762

E-mail: koho@office.hiroshima-u.ac.jp

8. 用語解説 :

(注1) ディラック点 / ディラック線 / ディラック物質

電子の速度を光の速度に近づけていくと電子の振る舞いを表す量子力学の方程式に相対性理論を取り入れる必要があります、現在のエレクトロニクスで用いられている電子の運動方程式と異なったものになります。その理論はディラックによって1920年代に発見され、ディラック方程式と呼ばれています。ディラック方程式によると電子のエネルギーは速度に比例し、さらに「ディラック点」と呼ばれる特異点が存在します。これまで様々な物質で、ディラック点及びその近傍の電子状態の研究が進められていました。今回、銅シリサイドで発見した「ディラック線」は「ディラック点」が線状に並んだものであり、これからの理論や実験の研究対象となります。

炭素の単原子シートではこの「ディラック点」が存在し、電子の振る舞いも相対論的です。このような物質を最近では「ディラック物質」と呼ぶようになってきました。

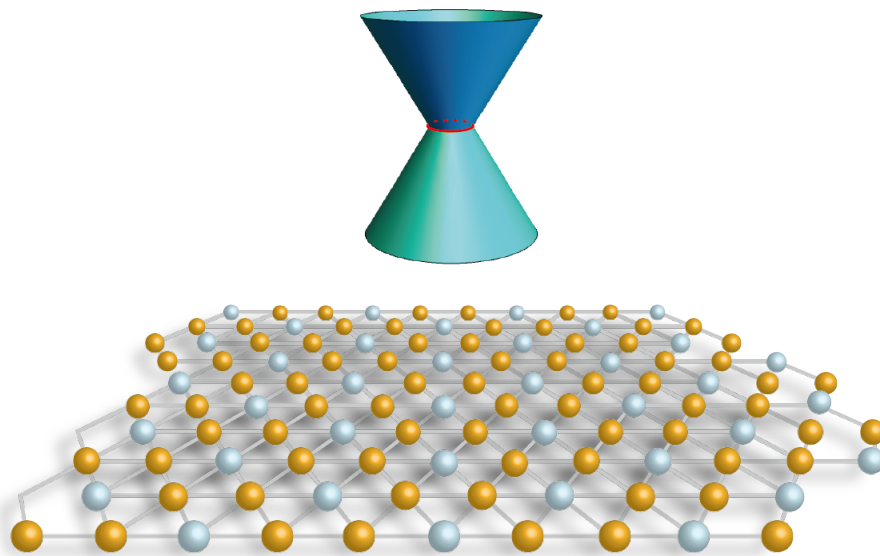
(注2) 第一原理計算

量子力学の基礎的な方程式にもとづく電子状態計算です。実験値などの経験的なパラメータを使用しないのが特徴で、純粋に理論を元に行っているため、物質のマイクロ情報を正確に知ることができます。

(注3) 光電子分光法

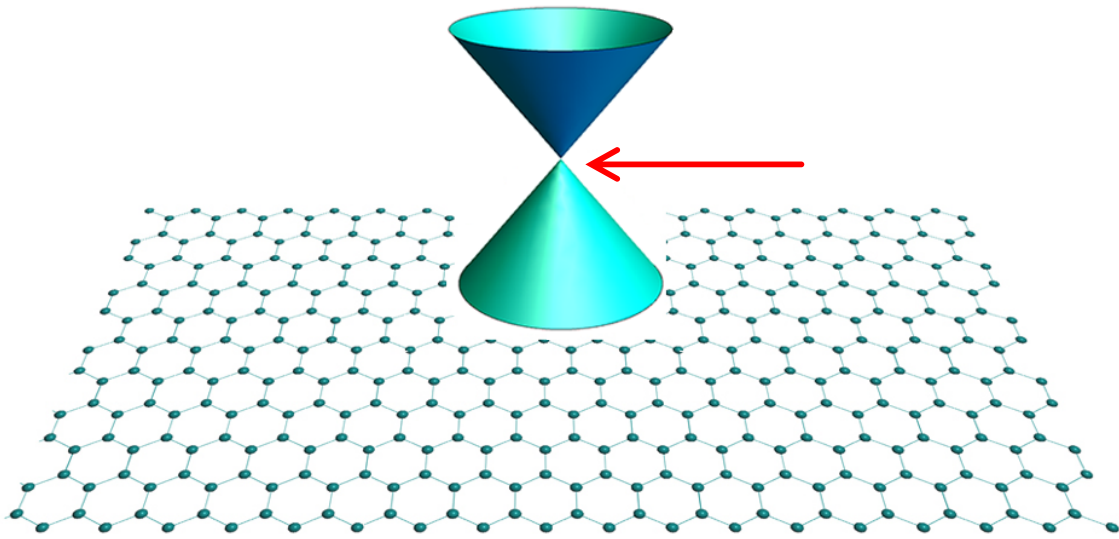
金属や半導体などの固体に紫外光よりもエネルギーが高い（波長が短い）光を照射すると、電子が放出されます。この電子を光電子と呼び、光電子のエネルギーや速度を分析することで固体中の電子の情報を抽出する実験法を光電子分光法といいます。

9. 添付資料：



(図1) 「ディラック線」を有する新しいディラック物質の銅シリサイド (Cu_2Si) 単原子シートの模式図

黄色の球が Cu、水色の球が Si を示す。上下のディラックコーンの重なる部分が「ディラック線（赤線）」。



(図2) 「ディラック点」を有するグラフェンの模式図
上下のディラックコーン（円錐）が交わる点がディラック点。