

ホウ素単原子シート「ボロフェン」とディラックフェルミオン

極限コヒーレント光科学研究センター Baojie Feng、松田 巖

周期表 5 番目のホウ素についてはこれまで多数の同素体が報告されており、室温大気条件下における最安定構造および相図についても未だに議論が続いている。一方、昨今の物質構造の研究では、Graphene (C)に代表される単元素から構成される 2 次元シートが世界中で注目を集めており、Silicene (Si)、Germanene (Ge)、Stanene (Sn)、Phosphorene (P)などの報告も続いている。ホウ素単原子シートの物性についても様々な理論研究が実施され、その結果、3 次元結晶と同様にホウ素の 2 次元結晶にも複雑な原子構造が多数存在することが分かってきた[1]。興味深いのは、これらホウ素シートの中には金属的なものも予言されていることである。ホウ素の純粋結晶では未だ金属的なものは確認されておらず、単原子シートの合成に成功すれば、固体物理の歴史において珍しい金属的なホウ素同素体が発見されることになる。そんな中、ごく最近、金属結晶基板上にホウ素を蒸着すると 2 次元層が合成されることが走査型トンネル顕微鏡(Scanning Tunneling Microscope, STM)で観測された[2]。そこで我々は本シートの原子構造及び電子状態を理論計算と光電子分光法で調べたところ、これらの 2 次元結晶が金属的なボロフェン Borophene(B)であることが分かり[3]。さらに本シートの電子状態の中にはディラックバンドも観測された[4]。

ボロフェンの合成では、まずその基板となる Ag(111)単結晶表面を超高真空中でアルゴンスパッタリングと加熱処理のサイクルを繰り返して清浄化する。そしてその後高純度(99.9999%)のホウ素を約 600K で蒸着することでボロフェンが自己組織的に成長する。表面実空間の様子を STM で観察すると、図 1(a)のように Ag(111)表面上にボロフェンのドメインが形成されている。ドメインの中を観察すると、ボロフェンには局所的な構造に加えて長周期な構造も存在することが判る。局所領域を視ると図 1(c)のように明点が線状に並んだ様子が確認できる。この線状の構造は 2 次元層同士で互いに 120°回転した関係(3 回対称)にあり、またその周期構造の大きさと向きも $[1\bar{1}0]$ 方向に 5.0Å、 $[\bar{1}12]$ 方向に 2.9Å である。この STM 像による局所領域観察の結果を元に、Ag(111)表面上ボロフェンの原子配置を密度汎関数法による第一原理による構造最適化計算

を行った結果を図 1(d)に示す。このボロフェンの構造で、これまで理論的に予想されてきたホウ素シートモデル[1]の 1 つであり、「 β_{12} シート」構造と呼ばれる。少し複雑に見えるが、3 角格子から周期的に原子欠陥を導入することでこの構造モデルを再現することができる。図中の単位ユニットセルで示すように、STM で観測された周期構造はボロフェンのものに対応しており、直線的な構造もホウ素の原子構造内の密度分布の違いを反映していることが分かる。

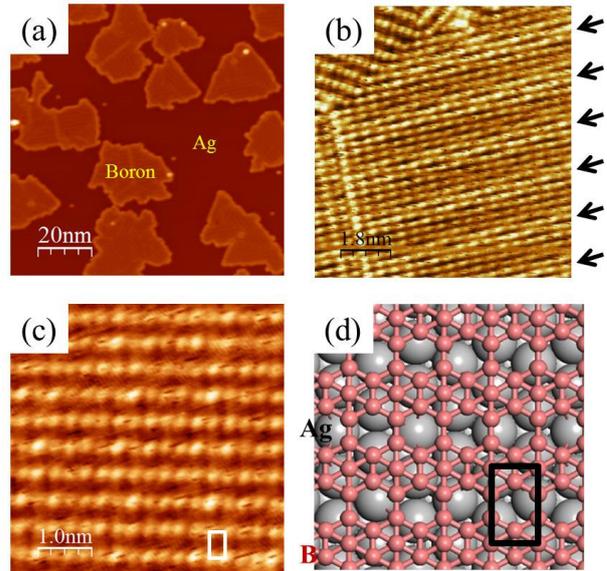


図 1 Ag(111)表面上ボロフェンの(a-c)STM 像(70K)と(d)原子構造モデル

ホウ素の 2 次元シートの中には金属的なものが存在することが理論的に予測されていたが、 β_{12} シートについては実験当初、バンド計算の研究報告がなかった。そこで、このボロフェンの電子状態を調べるために角度分解光電子分光法によるバンドマッピングを実施した。図 2(a)は各結合エネルギーにおける光電子強度マップで、強度が大きいところにバンド(電子状態)が存在する。結合エネルギー 0(フェルミ準位)の光電子強度マップにおいて明確な形状(フェルミ面)が幾つか確認でき、それぞれ B1,B2,B2'バンドとして各エネルギーマップでもその分散が追跡できた。基板が Ag 結晶なので、その金属バンド(Ag *sp*)も異なる波

謝辞

本研究にあたり、東京大学物性研究所の外国人客員所員 Tai C. Chiang 氏、杉野修氏、笠松秀輔氏、Ro-Ya Liu 氏、飯盛拓嗣氏、小森文夫氏および KEK Photon Factory 湯川龍氏、組頭広志氏に感謝致します。また、中国の共同研究者 Jin Zhang 氏、Chao Lian 氏、Hui Li 氏、Lan Chen 氏、Kehui Wu 氏、Sheng Meng 氏に感謝致します。また、東京大学物性研究所の共同研究者杉野修氏、笠松秀輔氏、Ro-Ya Liu 氏、飯盛拓嗣氏、小森文夫氏および KEK Photon Factory 湯川龍氏、組頭広志氏に感謝致します。本研究は JST ACT-C と文科省光融合プログラムの元、実施されました。

参考文献

- [1] X. Wu, J. Dai, Y. Zhao, Z. Zhuo, J. Yang, and X. C. Zeng, *ACS Nano* **6**, 7443 (2012).
- [2] B. Feng, J. Zhang, Q. Zhong, W. Li, S. Li, H. Li, P. Cheng, S. Meng, L. Chen, and K. Wu, *Nat. Chem.* **8**, 563 (2016).
- [3] B. Feng, J. Zhang, R.-Y. Liu, T. Iimori, C. Lian, H. Li, L. Chen, K. Wu, S. Meng, F. Komori, and I. Matsuda, *Phys. Rev. B* **94**, 041408(R) (2016).
- [4] B. Feng, O. Sugino, R.-Y. Liu, J. Zhang, R. Yukawa, M. Kawamura, T. Iimori, H. Kim, Y. Hasegawa, H. Li, L. Chen, K. Wu, H. Kumigashira, F. Komori, T.-C. Chiang, S. Meng, I. Matsuda, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 096401 (2017).
- [5] G. van Miert and C. M. Smith, *Phys. Rev. B* **93**, 035401 (2016).
- [6] E. S. Penev, A. Kutana, and B. I. Yakobson, *Nano Lett.* **16**, 2522 (2016).
- [7] A. Nagashima, N. Tejima, Y. Gamou, T. Kawai, C. Oshima, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3918 (1995).

