

シリセンおよびシリセン複合膜物質の構造安定性と電子物性

Energetics, Geometries, and Electronic Properties of Silicene and
Silicene-based Composite Atomic-Layer Materials

齋藤 晋、是常 隆

Susumu Saito and Takashi Koretsune

東京工業大学 大学院理工学研究科 物性物理学専攻

Department of Physics, Tokyo Institute of Technology,
2-12-1 Oh-okayama, Meguro-ku, Tokyo 152-8551, Japan

炭素単原子膜物質であるグラフェン系は、その伝導電子系が質量のないディラック粒子として振る舞うという特異な電子物性から大きな注目を集め、集中的な研究展開がなされてきたが、その高い移動度から、将来のデバイス物質としても大きな期待が持たれている。そして、後者の観点から、炭素と同じ「IV族」元素であり、従来の微細加工技術が適用可能と期待される珪素 (Si) の単原子膜「シリセン」が、最近、注目されつつある。

密度汎関数法による全エネルギー計算から固体の安定構造の予言が可能となった 1980 年代より sp^2 混成軌道 Si 系の構造安定性研究は展開されてきており、グラファイト同様の積層系の研究[1]、そして、単原子膜 (シリセン) の研究[2]が先駆的なものとして挙げられる。特に後者では、質量のないディラック粒子特有の電子構造が報告されており、シリセンがグラフェン同様の興味深い電子物性の舞台となることを強く期待させる研究結果となっている。実験的にも、昨年、銀表面上でのシリセン合成が報告され、今後、さらなる展開が期待される状況である。そこで、我々は、電荷移動のあるシリセンの構造安定性を、フォノン分散関係計算も含めた密度汎関数法により研究を進めた。その結果、電子が供給されたシリセンは安定化するのに対し、ホールが供給されたシリセンではソフトモードが現れ、不安定化することが判明した (図1)。さらに、今後のシリセンの物性測定、そして応用展開を進める上で重要となると考えられる、シリセンとグラフェンあるいは六方晶窒化ホウ素 (h-BN) との複合膜系について、構造と安定性、そして層間相互作用が複合系の電子構造に及ぼす影響に関する研究結果についても報告する。

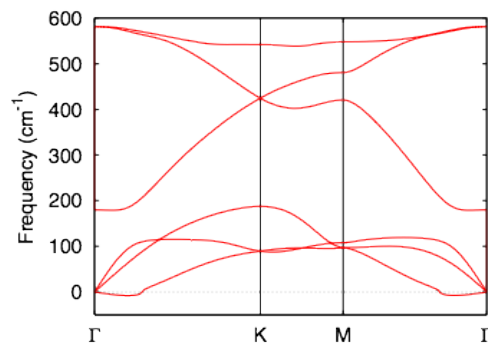


図1 正に帯電したシリセンの分散関係。帯電量は、単位胞あたり $0.1e$ である。

- [1] M. T. Yin and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **29**, 6996 (1984).
- [2] K. Takeda and K. Shiraishi, Phys. Rev. B **50**, 14916 (1994).
- [3] P. Vogt *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 155501 (2012).