

ZrB₂ 表面上のシリセンの電子状態計算

First-principles study of silicene on ZrB₂ substrate

尾崎泰助, C.-C. Lee, F. Gimbert, A. Fleurence, R. Friedlein, 高村(山田)由起子

T. Ozaki, C.-C. Lee, F. Gimbert, A. Fleurence, R. Friedlein, Y. Yamada-Takamura

北陸先端科学技術大学院大学

Japan Advanced Institute of Science and Technology, Ishikawa 923-1292, Japan

4 価元素である炭素原子は sp_2 結合と sp_3 結合による凝集エネルギーがほぼ縮退しており、非常に多彩な分子および結晶構造を取ることが知られている。一方、同じ 4 価元素であってもシリコン原子の sp_2 結合は相対的には安定ではないため、グラフェンに類似した蜂の巣格子構造(シリセン)は長らく理論的な興味に止まっていた。ところが最近、複数の実験グループによってシリコン原子による蜂の巣格子構造の生成に関する報告が相次いでなされた。シリコン原子による蜂の巣格子構造は金属基板上で生成したものであり、これまでに Er, Ag, ZrB₂ および Ir 基板上での報告例がある。北陸先端大・高村グループによる ZrB₂ 上でのシリセンの生成は自発的なエピタキシャル成長によるものであり、他の基盤上での生成方法と異なることが特徴である[1]。

我々は ZrB₂ 上でのシリセン構造の同定を行うために、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を系統的に行い、角度分解光電子スペクトル、XPS 及び、STM スペクトルの実験結果と比較検討を行ったので報告する。分子動力学計算及び構造最適化計算から、ZrB₂ 上においてシリコン原子が波打ったシリセン構造を安定構造として持つこと、また波打ち構造に由来したいくつかの多形構造が存在することが明らかとなった。ZrB₂(0001)面の(2×2)単位格子中での最安定な波打ちシリセン構造は($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)構造を取り、単位格子中に含まれた 6 つのシリコン原子は on-top(1 原子)、bridge(3 原子)、hollow(2 原子)サイトに分類される。この時、bridge 及び hollow サイトのシリコン原子が近似的にフラットな面を形成し、on-top のシリコン原子がその面から大きく飛び出す構造を持っている。得られた波打ちシリセン構造の XPS 及び、STM スペクトルの計算結果は実験とおよそ一致しており、波打ちシリセン構造の生成を強く示唆している。一方、STM と光電子分光スペクトルの角度依存強度比から見積もられた Si 原子の相対高さは第一原理計算の結果と必ずしも一致していない。講演では計算結果と実験との対応関係を議論する。

- [1] A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, H. Kawai, Y. Wang, and Y. Yamada-Takamura, "Experimental evidence for epitaxial silicene on diboride thin films", Phys. Rev. Lett. 108, 245501 (2012).