

IV 族系化合物混晶単層膜の構造および電子状態に関する理論的検討

Structures and electronic properties of group IV semiconductor alloy monolayers

三重大院工, ○秋山亨, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie University, ○Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】グラフェン等のハニカム構造を持つ2次元ナノ構造が特異な電子状態をもつ系として注目されている。特にグラフェンに替わる系として、単層シリセン、ジャーマニン、スタニン等のIV族元素で構成される二次元構造の電子デバイスへの適用が近年注目されている。[1-3]これらIV族元素の単層膜の結合は、 sp^2 軌道混成によって原子間の結合が形成されるグラフェンとは異なり、 sp^2 および sp^3 軌道混成の両方の寄与によって形成されており、その結果として最近接原子どうしがバックルした構造になる。最近の密度汎関数(DFT)計算では、これらバックルした構造においてもグラフェンと同様にK点においてディラックコーンが存在するバンド構造となることが指摘されており、バックルした単層シリゲン(SiGe)においても同様の電子状態となることが提案されている。[4,5]しかしながら、そのIV族系化合物混晶で形成される単層膜における構造安定性および電子状態に関する系統的な検討はなされていないのが現状である。本研究ではIV族系化合物混晶で形成される単層膜として Si_xGe_{1-x} 、 Ge_xSn_{1-x} および Si_xSn_{1-x} を対象として、これらの構造安定性および電子状態を密度汎関数理論にもとづく電子状態計算により検討する。

【結果および考察】様々な組成における Si_xGe_{1-x} 、 Ge_xSn_{1-x} および Si_xSn_{1-x} 単層膜でのDFT計算結果(スピン軌道相互作用は考慮していない)から、これらの系での平均ボンド長は組成 x の増大とともに減少し、その傾向はベガード則に対応していることが判った。また、バックルした単層膜のエネルギーは平坦な単層膜のそれに比べて ~ 0.12 eV/atom 低いことから、全組成領域においてバックルした単層膜が安定であると考えられる。さらに、バックリング長も組成 x の増大とともに減少し、重い元素によって構成される共有結合ボンドにおいて sp^3 軌道混成の寄与が大きくなることも判った。Fig.1はこれら単層膜におけるバンド構造を示したものである。Figs. (a)-(d)に示すシリセン、ジャーマニン、スタニンおよび $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 単層膜においてグラフェンと同様のK点でのディラックコーンが存在するのに対し、Figs. (e)および(f)示す $Ge_{0.5}Sn_{0.5}$ および $Si_{0.5}Sn_{0.5}$ 単層膜においては(~ 0.24 eV の)エネルギーギャップが存在して直接遷移型の半導体となる。以上の結果は、IV族系化合物混晶単層膜において、組成変調による物性制御の可能性を示唆している。

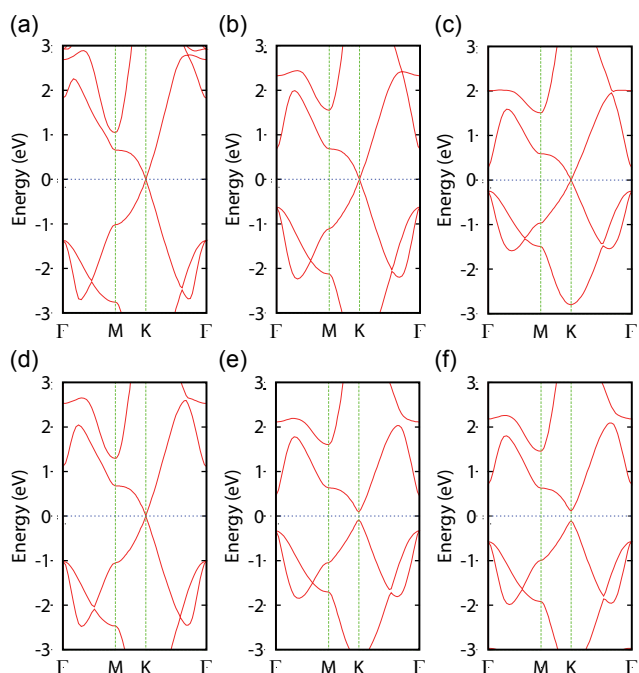


Fig: Calculated Kohn-Shan band structures of (a) silicene, (b) germanene, (c) stanene, (d) monolayer $Si_{0.5}Ge_{0.5}$, (e) monolayer $Ge_{0.5}Sn_{0.5}$, and (f) monolayer $Si_{0.5}Sn_{0.5}$. The Fermi energy is set at zero.

【参考文献】[1] B. Aufray *et al.*, Appl. Phys. Lett. **96**, 183102 (2010). [2] M. E. Dávila *et al.*, New. J. Phys. **16**, 095002 (2014). [3] Y. Xu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **111**, 136804 (2013). [4] J. C. Garcia *et al.*, J. Phys. Chem. C **115**, 13242 (2011). [5] P. Jamdagni *et al.*, Mater. Res. Express **2**, 016301 (2015).