$CaSi_2$ 多結晶の育成及び $CaSi_2$ 組成近傍の Ca-Si 2 元系状態図

Growth of $CaSi_2$ single-phase polycrystalline ingots and the phase diagram of the Ca-Si binary system around $CaSi_2$

○八百川律子[1]、中野秀之[1,2]（1. 豊田中研、2. JST さきがけ）

○Ritsuko Yaokawa[1], Hideyuki Nakano[1,2] (1. TOYOTA CENTRAL R&D LABS., 2. JST PRESTO)

E-mail: e4777@mosk.tytlabs.co.jp

【緒言】近年、グラフェンや遷移金属カルコゲナイトなど、層状物質から二次元構造体を取り出だす研究が盛んに行われている。$CaSi_2$ は bulk Si の(1 1 1)面に相当する Si モノレイヤーと Ca モノレイヤーが交互に積層した層状物質である。我々は、Si モノレイヤー表面に有機基を修飾させた Si ナノシートとして、$CaSi_2$ から Si モノレイヤーを取り出す手法を確立してきた[1,2]。最近、$CaSi_2$ 中の Si 層を角度分解光電子分光によって電子状態を調べたところ、Si モノレイヤーにはグラフェンと同様にディラック・コーンが K 点に発生していることが確認された[3]。よって、透明電極や超速度デバイスとして応用が進められているグラフェンを超えると期待されているシリセン（Si モノレイヤー）の原料に $CaSi_2$ がなり得る可能性が示された。これまで、$CaSi_2$ は包晶であり、単相を得るには 120℃以上の大きな過冷却が必要だと考えられてきた[4]。しかし、$CaSi_2$ 多結晶粒を育成した際に、従来の状態図とは異なる析出挙動が見られたため、$CaSi_2$ 組成近傍の状態図の修正を行った[5]。

【結果】Ca_xSi_2(0.9≦x≦1.1)組成の原料を融解、冷却し、$CaSi_2$ 多結晶バルクを育成した。XRD、SEM を用いて冷却速度及び不純物の有無と析出相の関係を調べた。不純物の混入がない $CaSi_2$ 組成の原料からは、単相の $CaSi_2$ が形成されることを確認した（図１）。DTA 分析から各組成の融点及び変態温度を調べ、XRD の結果と合わせて作成した状態図（図２）からは、$CaSi_2$ は包晶であるものの、単相を得るために必要な過冷却は５℃以下であることが判明した。

[1]H. Okamoto, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 132, 2710 (2010).

[2]H. Nakano, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 134, 5452 (2012).

[3]E. Noguchi, et al., *Adv. Mater*. in press (2014).

[4]L. Gröbner, et al., *Intermetallics*, 11, 1065, (2003).

[5]R. Yaokawa, et al., *Acta Mater.* 81, 41 (2014).

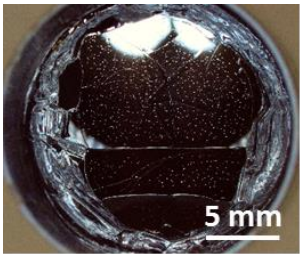

図 1　$CaSi_2$ 組成バルク上面

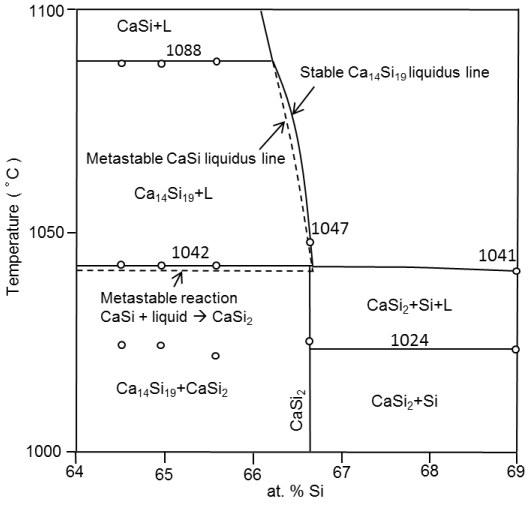

図 2　$CaSi_2$ 組成近傍の状態図

© 2015年 応用物理学会