

シリセン-アミンヘテロ界面の電子物性に対する電界効果

Electric Field Effects on Electronic Properties at Silicene-Amine Hetero-interface

○飯田 健二、野田 真史、信定 克幸 (分子研)

○Kenji Iida, Masashi Noda, Katsuyuki Nobusada (Institute for Molecular Science)

E-mail: iida@ims.ac.jp

二次元層状物質に対する電界効果を利用した機能性デバイスの開発が近年急速に進んでいる。シリセンはグラフェンと類似の電子物性を持つことから、機能性材料としての利用が期待されているが、その化学的な不安定性の為に応用利用はこれまでに殆ど進んでいない。しかし近年 Tao らが電界効果型のデバイスを報告し[1]、シリセンへの電界効果に対する注目が急速に高まっている。

シリセンへの電界効果を利用したデバイスをより効率的に設計するには、界面での相互作用が印加電場により如何に変化するか、その機構を解明する事が必須である。これまでシリセンを用いた異種物質界面において、化学結合や印加電場で誘起される静電相互作用でバンドギャップが変化する事が第一原理計算から報告されている[2,3]。しかし、化学結合と印加電場の相関についての理解は殆ど進んでいない。そこで本研究では第一原理計算を用い、シリセン-アミン(NH_3 , NH_2CH_3)ヘテロ界面の電子物性の電界効果による変化について、Si-N 間化学結合及び電子分極に着目して解析し、機構の解明を行った。

図 1 に印加電場によるバンドギャップの変化を示す。シリセン単体ではギャップの変化は電場の符号に因らないが、 NH_2CH_3 や NH_3 が吸着した場合、正の電場を印加するとギャップが広がる一方、負電場ではギャップが小さくなる。

図 2(a)は NH_3 吸着による電子密度分布の変化である。黄色と緑の分布はそれぞれ電子密度の増加と減少を示す。緑の分布が NH_3 部分に主に見られる事は、 NH_3 とシリセンの化学結合に伴い、 NH_3 からシリセンに電子が移動した事を示す。

図 2 の(b), (c)は印加電場による電子密度の変化である。正の電場(b)を印加すると NH_3 からシリセンへの電子移動が促進される一方で、負の電場(c)では逆にシリセンへの電子移動が弱められている。これらの化学結合並びに外部電場による電子分極が組み合わさり、バンドギャップに対する電界効果が決定づけられる事が明らかとなった。

[1] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, et al., *Nature Nanotech.*, **10**, 227 (2015). [2] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, et al., *Nano lett.*, **12**, 113 (2012). [3] T. P. Kaloni, G. Schreckenbach, M. S. Freund, *J. Phys. Chem. C*, **118**, 23361 (2014).

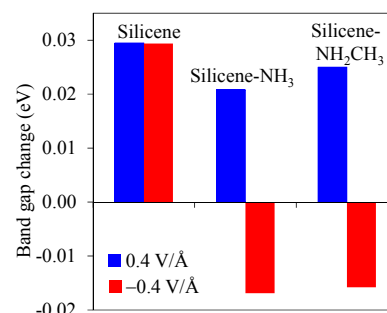


図 1. 電界効果によるバンドギャップ変化

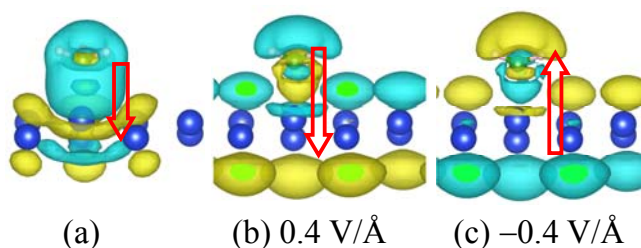


図 2. Si-N 結合と印加電場による電子密度の変化