

単層から二層シリセンへの相変態

Monolayer-to-bilayer transformation of silicenes

○八百川律子¹、大砂哲¹、中野秀之^{1,2} (1. 豊田中研、2. JST さきがけ)

°Ritsuko Yaokawa¹, Tetsu Ohsuna¹, Hideyuki Nakano^{1,2}

(1. TOYOTA CENTRAL R&D LABS., 2. JST PRESTO)

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

【諸言】 グラフェンのような六員環構造のモノレイヤーSi はシリセンと呼ばれ、近年盛んに研究が行われており、ごく最近、シリセンのトランジスタ作製が報告された¹。シリセンの電子状態はグラフェンと類似であることが理論計算からは期待されているが、実験的にはほとんどのシリセンは金属基板に形成するため、基板との強い相互作用によってシリセン本来の電子状態は消えてしまう。更に、大気中で非常に不安定であるという問題がある。そこで、我々は表面当たりのダングリングボンド密度を低減し、より安定した Si の二次元結晶とするために、二層構造の Si の合成を試みた。二層 Si の合成方法は、一層の Si と Ca が交互に積層した層状物質である CaSi_2 単結晶に Si よりも電気陰性度が大きいフッ素を拡散させ、 CaF_2 相と Si 相に相分離させるものである。

【結果】 CaSi_2 単結晶をイオン液体[BMIM][BF₄]中でアニールすると、イオン液体が分解し、フッ素イオンが結晶中に拡散して CaSi_2F_x ($0 \leq x \leq 2.3$) 化合物が形成された (図 1)。化合物中では単層 Si は二層 Si へと変態していた。変態過程において二層 Si は 3 種類確認され、そのうちの一つは新規構造のバイレイヤー Si (w-BLSi: wavy bilayer silicene)であった (図 2)。HRTEM 及び HAADF-STEM 観察によって、w-BLSi は四、五及び六員環の四配位結合から形成されていることを明らかにした²。この構造から、w-BLSi は単層 Si と比較するとダングリングボンド密度が低減していることが確認された。

¹ L. Tao, et al. *Nature Nanotech.* **10**, 227-231 (2015).

² R. Yaokawa, et al. *Nat. Commun.* in press.

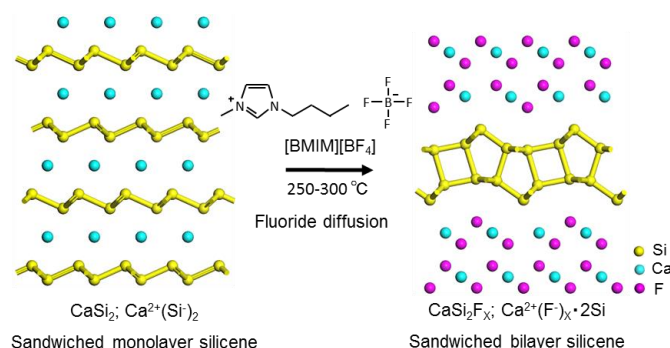


図 1 単層 Si から二層 Si への相変態

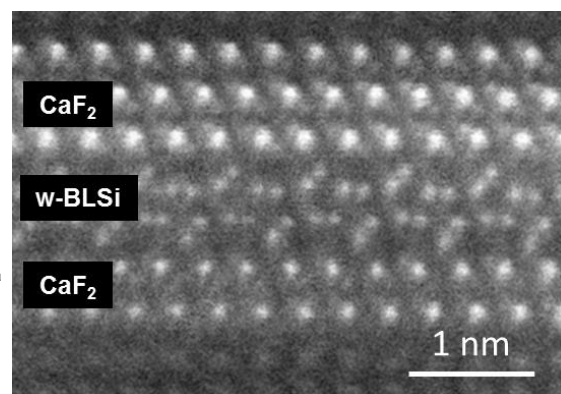


図 2 CaSi_2F_2 組成の HAADF-STEM 像