Ag(111)表面上シリセン√13×√13 R13.9°相の構造決定

Structure determination of silicene √13×√13 R13.9° phase on Ag(111) surface

東大新領域[1]，東大物性研[2]

○籔押 慶祐[1]，馮 凌瑜[1]，小野田 穣[1]，福田 将大[2]，尾崎 泰助[2]，杉本 宜昭[1]

GSFS, Univ. of Tokyo[1], ISSP, Univ. of Tokyo[2]

○Keisuke Yabuoshi[1], Lingyu Feng[1], Jo Onoda[1], Shota Fukuda[2], Taisuke Ozaki[2], Yoshiaki Sugimoto[1]

E-mail: kyabuoshi@afm.k.u-tokyo.ac.jp

シリセンは Si 原子が 2 次元ハニカム状に配列した層状物質である。理論計算によってシリセンが量子スピンホール効果を発現しうることが示されており[1]、２次元トポロジカル絶縁体の候補として注目を集めている。シリセンは Ag(111)表面上に作製されることが多く、その構造は低速電子回折(LEED)や走査トンネル顕微鏡(STM)によって調べられてきた。Ag(111)上シリセンは Si 原子の配置の違いによって 4×4 相、√13×√13 R13.9°相、4/√3×4/√3 相など、さまざまな構造をとることが知られている[2]。近年、我々のグループは原子間力顕微鏡(AFM)を用いて 4×4 相の高分解能観察を行い、得られた AFM 像が提唱されている構造モデルとよく一致することを確認した[3]。

本研究では、AFM と密度汎関数理論(DFT)による計算によって、Ag(111)上シリセンの√13×√13 R13.9°相(以下、単に「(√13×√13)シリセン」)の構造モデルを提唱した。AFM 観察の結果、4×4 相の場合と同様に単位胞内のすべての Si 原子を画像化することに初めて成功した。また得られた AFM 像によって、Si 原子のバックリングが異なる 2 種類の構造が存在することが判明した。そこで、DFT に基づいた計算によりそれぞれの構造モデルを構築し、それらが AFM 像と一致することを確かめた。以上の結果から、1 種類だと考えられていた(√13×√13)シリセンが、実際は 2 種類存在することが明らかになった。

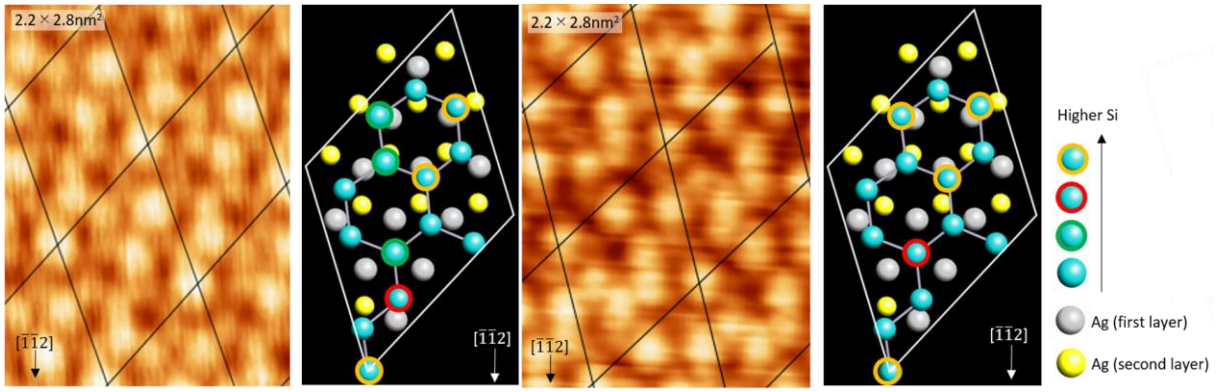

Fig. 1. 2 種類の(√13×√13)シリセンの AFM 像と、それぞれに対応する DFT 計算によって得られた構造モデル。バックリングの違いによって、同じ位置にある Si 原子の高さが異なっている。

[1] C.-C. Liu *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).

[2] B. Feng *et al.*, *Nano Lett.* **12**, 3507 (2012).

[3] J. Onoda *et al.*, *Phys. Rev. B* **96**, 241302(R) (2017).

© 2018年 応用物理学会