

全反射高速陽電子回折を用いた IV 族原子シートの構造決定

Structure determination of group IV atomic sheets using total-reflection high-energy positron diffraction

深谷有喜

日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター

近年、グラフェンの炭素原子を Si、Ge、Sn 原子などの同じ IV 族元素で置き換えた新奇な原子シート(シリセン、ゲルマネン、スタネン)の創製が試みられている。重元素における強いスピン軌道相互作用と、 sp^3 結合性を反映したバックリング配置から、これらの新奇原子シートではグラフェンには見られないトポロジカル絶縁体などの新奇物性の発現が期待されている。グラフェンとは異なりこれらの原子シートは自然界には存在しないが、最近、さまざまな基板上でその合成が可能になってきている。本研究では、原子 1-2 層に極めて敏感な全反射高速陽電子回折 (TRHEPD) を用いて、Al(111)基板上に合成したゲルマネンの原子配置を決定した[1]。

実験は、KEK 物質構造科学研究所低速陽電子実験施設にて行った。入射陽電子ビームのエネルギーは 10 keV に設定した。

実験の結果、 $\langle 110 \rangle$ 方位におけるロッキング曲線(入射陽電子ビームの視射角に対する回折スポット強度)の形状に非対称性が現れた。このことは、ゲルマネンの原子配置が $\langle 110 \rangle$ 方向に対して非対称であることを示唆する。動力学的回折理論に基づく詳細な強度解析から、単位格子内の 8 個の Ge 原子のうち 1 つの Ge 原子だけが真空側にシフトしていることがわかった。この結果は、これまでに提案されていた 2 個の Ge 原子が真空側にシフトし対称的な原子配置となる構造モデルとは異なる。しかし、今回決定した原子配置は、これまでの他の実験結果をよく説明できることがわかった。

[1] Y. Fukaya, I. Matsuda, B. Feng, I. Mochizuki, T. Hyodo, and S. Shamoto, 2D Mater. **3**, 035019 (2016).