

平面シリセンナリボンの理論設計と新しい動作原理の探究

Theoretical design of planar silicene nanoribbons and search for new operating principles

京都大学 化学研究所 物質創製化学研究系 有機元素化学研究領域 高橋まさえ

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、Materials Studioを用いて、二次元に拡張した平面構造のナノスケール帯状物質シリセンナリボンを構築し、既存の動作原理とは異なる新しい動作原理を探究することを目的としています。第一原理計算による物質設計では、最適化構造を求めたのちに、その構造がポテンシャル曲面上で極小点にある安定な構造であることを振動解析により確認する必要があります。周期系の第一原理計算において、格子定数も含めた構造最適化とその振動解析の可能なアプリケーションは限られています。京都大学化学研究所のスーパーコンピュータにはこの目的にかなったアプリケーション (Materials Studio) が公開されています。

「ケイ素版グラフェン」とも呼ばれる新材料「シリセン」は、炭素原子の代わりに同じ 14 族であるケイ素原子を使ったシートです。グラフェンは電子構造にエネルギーギャップがないため論理回路への応用が望めなく、シリセンの実現が切望されています。しかし、平面構造のグラフェンとは異なり、シリセンは一部の原子が浮き上がって座屈した凹凸構造をとるため空気中できわめて不安定です。シリセンとグラフェンの構造の違いはその構成要素六員環の構造の違いに起因します。グラフェンの構成要素ベンゼンは平面構造ですが、シリセンの構成要素は椅子型です。研究代表者は、理論的にも実験的にも得られていなかった平面構造ケイ素六員環を含むシリセン分子の理論設計に成功しています[M. Takahashi *Sci. Rep.* 2017, 7, 10855.]。

2018 年度より本共同利用に採択していただき、研究代表者が見出した平面構造のシリセン分子をもとに平面ケイ素 2 次元シートの設計を進めてまいりました。研究代表者が見出した平面シリセン分子を単純に二次元へ拡張しただけでは目的とする平面二次元シートは得られず難航しました。しかし、新しい着想によりようやく平面構造のナリボンの設計にたどりつきました。2020 年度はコロナ感染症拡大のため、思うように共同研究を進めることができませんでしたが、解析をすすめる中で、この平面シリセンナリボンが興味深い物性を有することがわかってきました。バンド構造から、得られた平面シリセンナリボンは負の間接バンドギャップを有する半金属であることがわかりました。非平面のジグザグシリセンナリボンが磁性を有するのは異なり、今回設計した平面シリセンナリボンは非磁性を示しました。ケイ素の 3p 軌道に由来する面外の  $\pi$  および  $\pi^*$  軌道による明瞭な直線的分散特性がバンド構造に観測され、フェルミ準位のわずかに上にディラク点の存在が見出されました。

発表論文(謝辞なし)

M. Takahashi, M. Kowada, H. Matsui, E. Kwon, Y. Ikemoto, *J. Phys. Chem. A* 2021, in press.