

平面シリセンナノ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、平面構造のナノスケール帯状物質シリセンナノリボンを構築し、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、最適化された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。格子定数も含めた構造最適化とその振動解析の可能な第一原理計算の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 **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、炭素の代わりに同族のケイ素を使った二次元シートです。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、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。これは、シリセンの構成要素六員環が平面ではなく椅子型であることに起因します。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からなるシリセン分子を、**BeH** で末端修飾することで、理論設計に成功しています[M. Takahashi *Sci. Rep.* 2017, 7, 10855.]. 六員環数6のコロネンでも平面構造が保たれており、無限に拡張できる可能性が示唆されます。

理論的に設計可能な、末端修飾シートとして帯状物質が考えられます。本研究では、まず、末端を **BeH** で修飾したシリセンナノリボンの設計を試みましたが、安定な平面構造が得られませんでした。そこで、二次元シートにシリセンナノリボンを埋め込み、リボン同士を **Be** で架橋したところ、平面構造のシートが得られました。埋め込まれたシリセンナノリボンを構築する六員環はベンゼンと同じ  $D_{6h}$  対称を有していました。バンド構造から、得られた平面シリセンナノ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ノ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ノ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（謝辞あり）：[M. Takahashi, ACS Omega, 2021, 6, 12099–12104.](#)

発表論文（謝辞なし）：[M. Takahashi, M. Kowada, H. Matsui, E. Kwon, Y. Ikemoto, Appl. Phys. Lett. 2022, 120, 051104.](#)