

フラットで完璧な π 共役二次元シート「シリセン」の理論設計とその物性探索
Theoretical design of flat and perfect two-dimensional π -conjugated “silicene” and the search of
their solid-state properties

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

フラットなグラフェンと異なり、グラフェンのケイ素版シリセンはジグザグ構造をとり不安定であることが知られています。これは、グラフェンの構成単位ベンゼンがフラットであるのに対し、シリセンの構成単位ヘキサシラベンゼンが椅子型であることに起因しています。フラット構造のヘキサシラベンゼンの実現は長い間ケイ素化学分野の課題でした。安定でフラットなシリセン実現には、まずフラットな構成単位の構築が鍵となります。研究代表者は、昨年度 9 月、ジグザグ構造をとるケイ素二次元シート『シリセン』を、グラフェンと同じようにフラットにできる構成単位の構築に成功し、論文発表しました[M. Takahashi *Sci. Rep.* **2017**, 7, 10855.]。

本研究では、京都大学化学研究所のスーパーコンピュータを利用し、研究代表者が設計したフラットな構成単位をベースに二次元に拡張したフラットなシリセンを構築し、その物性を探索することを目的としています。分子の場合には、Gaussian シリーズの汎用ソフトが広く使われていますが、周期的に配列したシート状シリセンの計算には適していません。また、第一原理計算による物質設計では、最適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確認する必要があります。そのためには振動解析を行う必要があります。周期系の構造の決定において格子定数も含めた最適化と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。

今年度は、まず、このアプリケーションを利用し、昨年度設計した分子がこの計算方法においても安定構造として得られるか、また、通常いわれているシリセンが確かに平面構造では安定ではなく虚の振動数を有するかなどを通常の方法でレベルを上げて確認しました。Materials Studio は使い慣れておりましたが、システムが異なることや、バージョンが上ったため、以前可能であった計算がうまく走らないというトラブルに見舞われ難航しました。まだ期待する計算が完全に走るシステムにたどりついていません。今後、いくつかの方法で、基本分子の確認に加え、あらたな二次元シートの設計に挑戦する予定です。6 月に、グラフェンでノーベル賞を受賞したアンドレ・ガイムが基調講演を行う 10th ICMAT 2019 での招待講演を依頼されており、それまでには、フラットで完璧な π 共役二次元シート「シリセン」の構築にたどりつきたいと考えています。