

完璧な  $\pi$  共役二次元シートを持つフラットシリセンの設計

Design of flat silicene with perfect  $\pi$ -conjugate 2D sheet

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

「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二次元単原子層シートです。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、平面構造のグラフェンとは異なり、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。研究代表者は、極最近、平面構造のシリセン分子の理論設計に成功し、論文発表しました[M. Takahashi *Sci. Rep.* **2017**, 7, 10855.]。

本研究は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。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。

2018年度は、分子の第一原理計算ソフトにより設計発表したシリセン分子の結果と、Materials Studio のような周期系の第一原理計算ソフトを用いた結果について、いくつかの条件をクリアしすり合わせを行いました。2019年度は、2018年度に確立した条件で、平面ケイ素 2 次元シートの設計に着手しました。2019年6月には国際会議 ICMAT 2019 で、11月には ICMS 2019 で招待講演を行いました。ケイ素を 2 次元に敷き詰めたシリセンは凹凸構造をとり、空気中できわめて不安定です。平面構造に制限し、平面構造を有するシリセン分子の理論設計において研究代表者が示した指針に基づき、考えられる限りの二次元シートを設計し計算しました。しかし、単純な二次元への拡張では目的とする平面構造は得られず難航しました。現在、一つの系について、平面構造が安定となるシリセンシートの設計に成功しました。ディラックコーンは相対論的效果を入れなくても僅かにギャップが開き、バンド構造は半金属の性質を示唆していました。今後、相対論的效果、スピン密度および他の系の可能性について検討します。

発表論文 (謝辞なし)

• M. Takahashi, H. Matsui, Y. Ikemoto, M. Suzuki, N. Morimoto, *Sci. Rep.* **2019**, 9, 13104.