

平面二次元シートに埋め込まれた低次元ケイ素材料の理論設計と動作原理の探求
Theoretical design of low-dimensional silicon material embedded in a flat two-dimensional
sheet and exploration for 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、平面二次元シートに埋め込まれた新規低次元ケイ素材料を構築し、既存の動作原理とは異なる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、最適化された構造のフォノン解析を行い、熱力学的にも動力的にも安定な構造であることを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フォノン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 がユーザーに公開されています。

近年新しい二次元量子材料として脚光をあびている二次元シート中の低次元ナノ構造の概念は、原子スケールで明確に定義される立体配置を備えた新しいプラットフォームを与えます。「ケイ素版グラフェン」と呼ばれる新材料「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。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、空气中できわめて不安定です。平面構造が安定なシート作製の鍵となります。2018 年度から本共同研究に採択していただき、2021 年にはシリセンのナノスケール幅帯状物質シリセンナノリボンを二次元シートに埋め込み、平面構造を維持した半金属二次元シート[M. Takahashi, *ACS Omega*, **2021**, *6*, 12099]を、昨年度は、ケイ素一次元鎖ポリシリンを埋め込み平面構造を維持したタイプ I ディラック材料 Si_2Be を理論設計いたしました。

今年度は、昨年度理論設計に成功したタイプ I ディラック材料 Si_2Be について様々な物性（機械特性、熱安定性、熱伝導性）を調べ、論文にまとめて発表いたしました[M. Takahashi, *Sci. Rep.*, **2023**, *13*, 13182]。二次元ディラック材料は線形分散ディラックコーンを持つ特異な量子物質です。タイプ 1 に分類されるディラックコーンは点状のフェルミ面を持ち、傾斜した異方性線形分散を示します。第一原理分子動力学計算の結果から、タイプ I ディラック材料 Si_2Be は 700 K では安定に、また、1000 K でも 1.2 ps 程度まで、ポリシリン構造を保つことがわかりました。機械特性（二次元ヤング率、二次元ポアソン比）と熱伝導率はタイプ I ディラック材料の特性を反映して異方性を示しました。ヤング率からはグラフェンに比べて非常にやわらかいこと、熱伝導率からはグラフェンと同程度の良い熱散逸シートであることが示されました。

発表論文（謝辞あり）：M. Takahashi, *Sci. Rep.* **2023**, *13*, 13182.

発表論文（謝辞なし）：M. Takahashi, H. Matsui, E. Kwon, Y. Ikemoto, *Chemical Physics Impact* **2024**, *8*, 100442.