

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、2023 年には、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[M. Takahashi, Sci. Rep. 2023, 13, 13182]。

これまでは一次元に繋がった鎖を二次元シートに埋め込んだ二次元シートについて安定構造設計とその異方性を活かした新規物性探索を行ってきました。今年度は、4 種類のシリセン分子を単位とし、ベリリウムで架橋して二次元に敷き詰めたシートについて安定構造と電子物性を調べました。得られた 4 種類のシートはすべて、平面構造が安定構造となりました。これらの平面二次元シートについて、電子バンド構造を調べた結果、単位としたシリセン分子の大きさが大きくなるにともないバンドギャップが小さくなる傾向が得られました。バンドギャップ 1 eV 程度の通常のケイ素半導体に近い半導体二次元シートから、0.2 eV 程度のナローギャップ半導体、さらには負のバンドギャップを持つ半金属まで様々な電子的特性を有する平面二次元シートが得られました。今後は得られたこれらの二次元シートについて、様々な物性(機械特性、熱安定性、熱伝導性等)を調べていきます。

発表論文(謝辞なし): H. Matsui, Y. Takebe, M. Takahashi, Y. Ikemoto, Y. Matsuo, *J. Chem. Phys.* **2024**, *161*, 64901.