令和4年度　　京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

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、熱力学的にも動力学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、空気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 2021 年度まで本共同研究に採択していただき、研究代表者が理論設計した平面構造のシリセン分子 [M. Takahashi, *Sci. Rep.* **2017**, *7*, 10855.] を基盤に、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を理論設計いたしました[M. Takahashi, *ACS Omega*, **2021**, *6*, 12099]。

今年度は、昨年度の結果をもとに、平面構造を維持し低次元ケイ素材料を埋め込んだタイプ1ディラク材料の理論設計に成功いたしました。二次元ディラク材料は線形分散ディラ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。今回設計したディラク材料のグラフェンとの顕著な違いは、van Hove 特異点がグラフェンよりはるかにフェルミ準位の近くにあることです（フェルミ準位からのエネルギー間隔は、グラフェンが約 2 eV、今回設計されたディラク材料は約 0.3 eV）。極最近、化学ドーピングによりグラフェンのフェルミ準位を 0.5 eV シフトさせたという報告があり、0.3 eV のシフトは実現化可能と推測されます。得られた二次元材料は、異方性キャリア移動度を誘導する異方性のディラックコーンを備えたシリコンベースの空気中で安定なディラック材料であり、様々な新しいケイ素電子デバイスへの応用に対し高い可能性を秘めています。

発表論文（謝辞なし）: M. Takahashi, S. Chen, H. Matsui, N. Morimoto, Y. Ikemoto, *Sci. Rep.* **2022**, *12*, 20393.