

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、平面構造を維持した二次元シートとして、2021 年には半金属 [M. Takahashi, *ACS Omega* **2021**, 6, 12099] を、2023 年には、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]。

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の設計に続き、昨年度より、以前我々が設計した 5 種類の平面シリセン分子 [M. Takahashi, *Sci. Rep.* **2017**, 7, 10855] を、ベリリウム架橋し二次元に敷き詰めたシートの設計、安定構造と電子物性の探索を開始しました。。5 種類のシートのうち 4 種類が平面構造で安定となりました。特筆すべきは、4 種類のひとつが約 1 eV の中程度直接バンドギャップを有する半導体の特性を示したことです。これは、バルクシリコンの間接バンドギャップやシリセンのゼロギャップ特性とは対照的です。これらのシートについて、今年度は機械特性、熱安定性、熱伝導性等を調べました。フォノン分散と第一原理分子動力学シミュレーションにより、この直接ギャップ半導体の動的および熱的安定性が確認されました。さらに、この直接ギャップ半導体は小さい面内ヤング率とグラフェンと同等の熱伝導率を持っており、高い機械的柔軟性と効率的な放熱性が示唆されました。

発表論文(謝辞あり): [1] M. Takahashi, *Discover NANO* **2026**, 21, 50.

発表論文(謝辞なし): [1] M. Takahashi, *Chem. Phys. Impact* **2025**, 11, 100977.

[2] M. Takahashi, *Molecules* **2025**, 30, 1158.