

## 量子化学に基づくSiCナノシートの層間相互作用についての研究

横浜国立大院工

○木梨 佑哉、佐藤 浩太

### Quantum chemical study on interlayer interaction of SiC nanosheet

○Yuya Kinashi, Kota Sato

*Department of Advanced Materials Chemistry, YOHOHAMA National University, Japan*

**【Abstract】** Because of its unique physical properties, graphene, a 2D honeycomb arrangement of carbon atoms, has attracted tremendous attention. In addition, our laboratory also conducts theoretical research on SiC nanosheet in which half of the C atoms of graphene are replaced with Si atoms. And we obtained the result of its stable structure in the monolayer is a completely planer like graphene. In this study, we aimed to clarify the stable structure of multilayered SiC nanosheet with calculations based on density functional theory. As a model of SiC nanosheet, cluster model and periodic boundary condition were used. In conclusion, it was found that the two layers of SiC nanosheet stabilize with a hexagonal structure in which each sheet is completely planer like graphene.

**【序】** グラフェンはC原子が平面六方格子状に配列されたハニカム構造をとっており、その電子的特性から近年注目されている。また、当研究室ではこのグラフェンのC原子の半分を同族元素であるSi原子で置き換えたSiCナノシートについての理論研究も行っており、単層における安定構造はグラフェンと同様に完全な平面となる研究結果が得られた<sup>[1]</sup>。しかしこれまでに、SiCナノシートが多層になった場合にも層構造を保ちつつ安定できるかなど、それぞれの層に及ぼし合う影響についての報告はなされていない。そのため、本研究では密度汎関数法による量子計算によって多層のSiCナノシートの安定構造を明らかにすることを目的とした。

#### 【方法 (実験・理論)】

SiCナノシートのモデルとして、クラスターモデルと周期的境界条件を用いた2種類のモデルを作成した。計算手法に、プログラムとしてGaussian09、近似法として密度汎関数法(DFT)、汎関数としてMPW1PW91、基底関数として6-31G(d)を用いた。

##### ・クラスターモデル

SiCナノシートのクラスターモデルとして終端を水素で置換した $\text{Si}_{12}\text{C}_{12}\text{H}_{12}$ を作成した。単層での最安定構造を求め、得られた結果を2枚、①2層を六方晶系かつ、Siの同軸上にCがくるように配置②どの原子も重ならないように配置③Siがもう一方の層のCと完全に重なり合うように配置し、構造最適化を行うことで層間での相互作用について調査した。

##### ・周期的境界条件モデル

クラスターモデルでの計算を参考に、周期格子を $(3 \times 3)\text{SiC}(\text{Si}_9\text{C}_9)$ とし、2層の初期配置を六方晶系かつ、(1)Siの同軸上にCがくるように配置、(2)Siの同軸上にSiがくるように配置、(3)Cの同軸上にCがくるように配置したもので構造最適化を行った。また、シリセン/SiCナノシートの2層間ではSiCナノシートが歪むことによりその安定性を高めるとの報告がなされているため<sup>[2]</sup>、条件(1)について、周期格子を $(5 \times 5)\text{SiC}(\text{Si}_{25}\text{C}_{25})$ まで大きくした場合での構造最適化を行った。

## 【結果・考察】

### ・クラスターモデル

クラスターモデルを用いたモデルで求められた安定構造の結果を図 1 に示し、各構造における層間距離と単層 2 枚分エネルギーの差  $\Delta E$  を表 1 に示す。図中の水色の球は Si、灰色の球は C、白色の球は H を表す。結果より、層間では Si と C は引き合い、Si 同士 C 同士では反発しあう傾向が見られた。また、その相互作用は層の外側の原子程大きかった。エネルギー的に最も安定となるものは層間で結合を作る③であったが、①の結果である 2 層が六方晶系の配置をとる場合に層構造を保ちつつ安定化の相互作用が働くことが見受けられた。その為、以下の周期的境界条件での計算は①同様六方晶系での条件下で計算を行った。

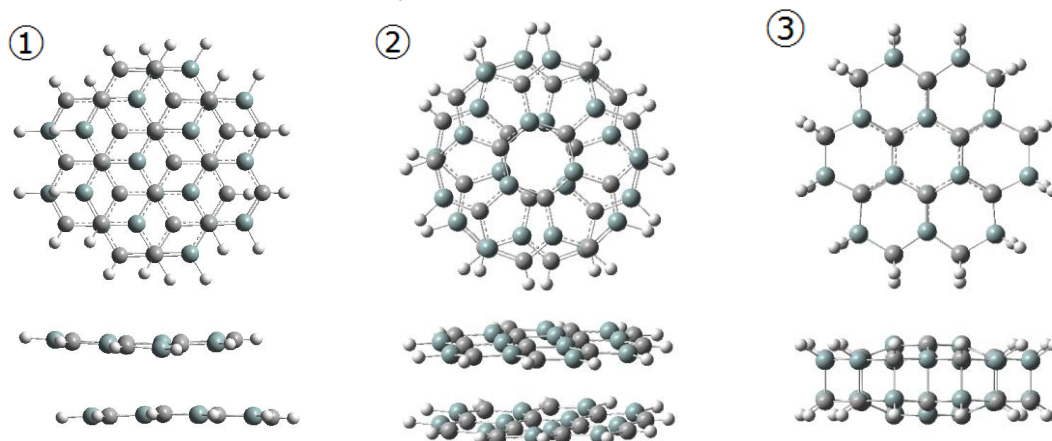


Fig. 1. Calculation results of cluster model.

Table 1. Calculation results of cluster model.

	①	②	③
層間距離[Å]	3.52~3.70	-	1.93~3.29
$\Delta E$ [eV]	-0.49	-0.44	-15.18

### ・周期的境界条件モデル

周期的境界条件を用いたモデルで求められた安定構造の結果を表 2 に示す。クラスターモデルでの計算結果とは異なり、いずれの条件でも各層が完全な平面を保ちつつ安定構造を示した。中でも、(1)2 層の関係が六方晶系かつ、Si の同軸上に C がくるように配置された場合に最もエネルギーが安定となる上に層間距離も近い状態を保った結果が得られた。同条件で周期格子を  $(5 \times 5)\text{SiC}(\text{Si}_{25}\text{C}_{25})$  まで大きくした場合での結果も完全な平面構造を示し、また、層間距離も  $(3 \times 3)\text{SiC}(\text{Si}_9\text{C}_9)$  の場合と同様の結果が得られた。結論として、グラフェンと同様、六方晶系の構造でなら 2 層が完全な平面の層を保ったまま安定化するとわかった。

Table 2. Calculation results of periodic boundary condition

	(1)	(2)	(3)
層間距離[Å]	3.54	3.93	4.49
$\Delta E$ [eV]	-10.67	-10.34	-10.26

## 【参考文献】

- [1] 平見拓哉、高橋遼太郎、佐藤浩太、第9回分子科学討論会、1P118(2015).  
 [2] Nigam, S; Majumder, C ; Pandey, R ,RSC Adv,(2016),6,21948