



周期表の金属元素の新しい同素体を理論予測 金属同士の相性に基づく合金構造探索に新たな道

計算物質科学¹⁾は、計算機を利用して新物質の存在を予言し、その物性を予測する学問です。岐阜大学工学部応用物理コースの小野頌太助教は、計算物質科学の手法に基づき、周期表の金属元素（リチウムから鉛までとポロニウム）が「原子層」として安定に存在することを理論予測しました。また、安定な原子層金属を積層させることで安定な3次元結晶が形成されることを示し、この考えに基づき新しい合金の構造を予測する方法を提案しました。本研究成果は、日本時間2020年10月27日（火）に米国物理学会発行のPhysical Review B誌のオンライン版で発表されました。なお、原子番号84のポロニウムの原子層を「ポロニウムメン（poloniumene）」と名付けた研究成果については、日本時間2020年7月16日（木）にScientific Reports誌のオンライン版で発表されました。

【研究背景】

2004年に炭素の同素体である単層グラフェンの合成が報告されて以来、原子数層分の厚さを持つ「原子層」または「2次元物質」に関する研究が盛んに行われてきました。原子層は、電子分布が2次元面内に閉じ込められているため3次元結晶とは異なる物性を示します。また、様々な原子層をブロックのように積層させることで、様々な物性を示す構造を実現することができます。しかし、その物性研究の多くは原子層半導体に関するものであり、原子層金属はほとんど注目されておりません。さらには、原子層金属は安定に存在するかどうか、という基本的な問題にも未着手のままでした。

物質が安定に存在するかどうかを明らかにするためには、その物質の格子振動²⁾を調べる必要があります。物質の格子振動は、縦波や横波、波長の大小など様々な振動パターンに分類されます。この全ての振動パターンの振動数が正であれば、その物質は安定であると定義されます。近年では、計算物質科学の手法を用いることで、物質の格子振動パターンとその振動数を精密に計算することができます。すなわち、物質の安定性を理論的に予測することができます。

【研究成果】

本研究では、計算物質科学の手法を用いて、周期表のリチウムから鉛までの金属元素が原子層として安定に存在するかどうかを調べました。そのために、力定数行列³⁾を計算する手法が実装された第一原理計算ソフト（Quantum ESPRESSO）を用いました。具体的には、各金属元素の原子層として、三角格子構造、歪んだ蜂の巣格子構造、歪んだ正方格子構造、その他の多層構造を仮定して、その格子振動数を計算することでどの構造が安定であるかを網羅的に調べ上げました。この計算結果を整理し、図1のように金属元素を似たもの同士でグループ分けしました。室温下で取り得る3次元結晶構造との関係も示しています。この関係を詳細に解析すると、安定な原子層の積層構造が安定な3次元結晶に一致することがわかりました。例えば、銀（Ag）、金（Au）、ベリリウム（Be）、マグネシウム（Mg）の安定構造は、三角格子構造と歪んだ蜂の巣格子構造であり、これらの積層構造は面心立方格子構造（FCC）や六方最密構造（HCP）であり、実験で得られる3次元結晶構造と一致しています（図2）。

この関係を、2種類以上の金属元素からなる合金系に応用しました。例として、歪んだ蜂の巣格子構造を安定構造に持つアルミニウム（Al）と銅（Cu）に注目しました。歪んだ蜂の巣格子は2つの三角格子を積層させたものであり、積層方向に周期的境界条件を課すとタングステンカーバイド（WC）構造が形成されます（図2）。そこでWC構造の合金AlCuの格子振動計算を行い、この構造が安定に存在し得ることを確認しました。

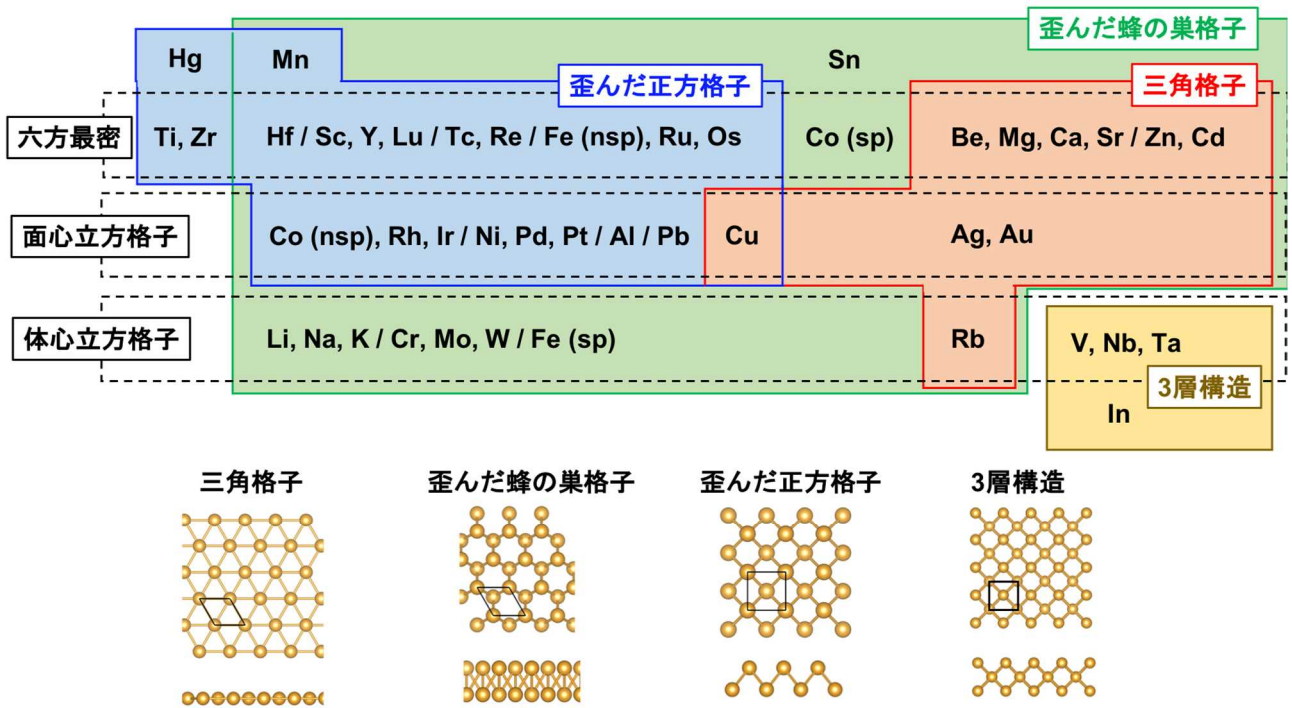


図1上：安定構造についての相関関係。下：原子層構造。

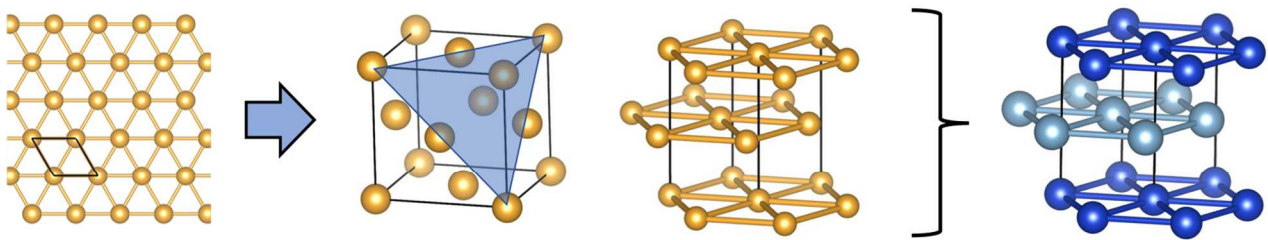


図2：安定構造に関する相関関係の例。三角格子を積層することで、面心立方格子構造または六方最密構造が作られる。この考えを合金構造の理論予測に応用することができる（右図はWC構造の概念図）。

さらに本研究では、原子番号84のポロニウムの原子層に対しても格子振動計算を実行しました。キュリー夫人が発見したことで有名なポロニウムは、単純立方格子構造を持つ唯一の金属元素として知られています。その安定性の起源を理解するためには、相対論効果を考慮に入れた計算をする必要があります。本研究では、相対論効果を取り入れた格子振動計算を行うことで、正方格子構造のポロニウムが安定に存在することを予言し、この原子層をポロニウムメン (poloniumene) と名付けました。

【今後の展開】

本研究では、計算物質科学の手法に基づき原子層金属の安定構造を明らかにしました。その安定構造に基づき金属元素をグループ分けし、同じグループに属する金属の原子層を積層することで安定な合金の構造を予測できることが明らかになりました。今後は、この考えに基づき新しい合金構造を理論予測すること、その特異な電子物性を明らかにすること、またその合成可能性を明らかにすることなどが課題となります。

【論文情報】

(1) ポロニウムメン：原子番号84のポロニウムの原子層

雑誌名：Scientific Reports 誌

タイトル：Two-dimensional square lattice polonium stabilized by the spin-orbit coupling

著者：Shota Ono

DOI 番号：10.1038/s41598-020-68877-4

論文公開URL：https://www.nature.com/articles/s41598-020-68877-4

(2) 原子層金属の動的安定性

雑誌名：Physical Review B 誌

タイトル：Dynamical stability of two-dimensional metals in the periodic table

著者：Shota Ono

DOI 番号：10.1103/PhysRevB.102.165424

論文公開URL：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.165424

【用語解説】

- 1) 計算物質科学：原子種類と原子位置の情報だけから物質の電子状態を計算する第一原理的手法を用いて、新物質予測（マテリアルデザイン）やその物性解明を目的とする学問。近年の計算機性能の向上に伴い、物質中の電子が従う方程式を短時間で解くことが可能になり、計算に基づく物質科学の研究が活発に行われている。
- 2) 格子振動：結晶中の原子が近くにいる他の原子と力を及ぼし合うために生じる集団的な振動のこと。結晶中では格子振動は「波」のように振舞い、縦波や横波、波長の大きさなどにより振動パターンが分類される。
- 3) 力定数行列：結晶の全エネルギーを原子位置に関して2階微分することで得られる行列のこと。この行列の固有ベクトルと固有値は、それぞれ格子振動パターンとその振動数の2乗に対応する。ある固有振動に対応する固有値が負の場合、結晶はその格子振動に対して不安定であり、エネルギー的により安定な別の結晶構造に転移する。

【研究者プロフィール】

小野 頌太（おの しょうた）

岐阜大学工学部 電気電子・情報工学科 応用物理コース

<略歴>

2012年 北海道大学大学院工学研究科応用物理学専攻博士後期課程 修了（工学）

2012年 横浜国立大学大学院工学研究院 研究教員、同助教

2016年 岐阜大学工学部電気電子・情報工学科 助教



【本件に関する問い合わせ先】

<研究に関すること>

岐阜大学工学部 助教 小野頌太

電話：058-293-2805

E-mail：shota_o@gifu-u.ac.jp

<報道担当>

岐阜大学管理部総務課広報係

電話：058-293-3377

E-mail：kohositu@gifu-u.ac.jp