

ハイスループット第一原理計算による二次元エレクトライド探索

High-throughput DFT screening for two-dimensional electride materials

東工大 [○]多田朋史、竹本整司、松石聡、細野秀雄Tokyo Tech., [○]Tomofumi Tada, Seiji Takemoto, Satoru Matsuishi, Hideo Hosono

E-mail: tada.t.ae@m.titech.ac.jp

エレクトライドはアニオンのように振舞う裸の電子を内包する大変ユニークな材料である。2003 年にアルミナセメントベースのエレクトライド $C12A7 \cdot e^-$ ($12CaO \cdot 7Al_2O_3 \cdot e^-$)[1]が発見され、三次元的に分布するナノサイズ空隙にゆるく束縛されたアニオンの電子の存在が明らかとなった。アニオンの電子による高い電子伝導性、低い仕事関数に加え、水素被毒耐性といった化学的安定性により、Ru 担持型 $C12A7$ エレクトライドによるアンモニア新合成経路の発見[2]もなされ、触媒材料としての応用も期待されている。一方 $C12A7$ エレクトライドとは対照的に、アニオンの電子が二次元的に分布する二次元エレクトライド Ca_2N も昨年発見された[3]。 Ca_2N 二次元エレクトライドは、窒素層 (アニオン層) をカルシウム層 (カチオン層) が上下から挟み込んで Ca_2N 層を形成し、隣接する 2 つの Ca_2N 層の間には明らかな二次元空隙層が発達している。この二次元空隙層にアニオンの電子がゆるくトラップされアニオン層である二次元電子層を形成し高い伝導性が発現する。二次元電子系の発達、グラフェン等のディラック電子系、トポロジカル絶縁体、高温超伝導材料において鍵となる特徴であり、それゆえ二次元電子面を有する二次元エレクトライド材料はさまざまな分野において応用される可能性を秘めている。しかしながら、現時点において発見されている二次元エレクトライドは Ca_2N のみである。よって本研究では、二次元エレクトライドの材料候補郡の所在を明らかにすることで、新規二次元エレクトライド合成への足がかりとすべくハイスループット第一原理計算を用いて二次元エレクトライドの材料探索を実行した。

本研究ではハイスループット第一原理計算用プラットフォームである Materials Project[4]を用いて二次元エレクトライドの材料探索を行った。約 34,000 の材料データベースを用いたスクリーニングによる結果と、そこから導かれた二次元エレクトライド設計指針を用い、候補化合物としての炭化物、窒化物、酸化物、ハロゲン化合物を得た。それらのアニオンの電子のバンド幅を化合物の相対的安定性に対してプロットした相関図が図 1 である[5]。酸化物は合成の極端な困難さという面で他の化合物群より劣っているが、バンド幅は広範囲に分布しておりそのポテンシャルの高さを示している。当日の発表では、これらの結果に加えスクリーニングの詳細について述べる。

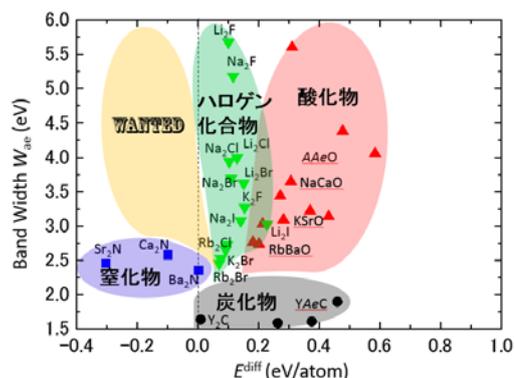


図 1 : バンド幅と安定性の相関図

という面で他の化合物群より劣っているが、バンド幅は広範囲に分布しておりそのポテンシャルの高さを示している。当日の発表では、これらの結果に加えスクリーニングの詳細について述べる。

[1] S. Matsuishi et al., *Science* **2003**, 301, 626–629. [2] M. Kitano et al., *Nature Chem.* **2012**, 4, 934–940.

[3] K. Lee, S. W. Kim, Y. Toda, S. Matsuishi, and H. Hosono, *Nature* **2013**, 494, 336–341. [4]

<https://materialsproject.org/> [5] T. Tada, S. Takemoto, S. Matsuishi, and H. Hosono, submitted.