

2023 年度年次報告書

未踏探索空間における革新的物質の開発

2021 年度採択研究代表者

松田 巖

東京大学 物性研究所
教授

2 次元ホウ素未踏マテリアルの創製と機能開拓

主たる共同研究者:

安藤 康伸（産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 主任研究員）

小飼 真人（東京理科大学 先進工学部 教授）

近藤 剛弘（筑波大学 数理物質系 教授）

吹留 博一（東北大学 電気通信研究所 准教授）

研究成果の概要

本研究では無数の多形体を成す 2 次元ホウ素未踏マテリアルについて物質合成と機能性開拓を行っている。研究者による学理と理論計算に基づく従来アプローチに加え、インフォマニティクスやロボットを組み合わせることで、自動かつ自律的に合成法開発が可能なシステムの建設を行っている。システムは合成プラント、試料搬送ロボット、測定チャンバーなどから構成されており、これまでメンバーが各地で要素技術を開発してきた。2023 年度にこれらは放射光施設 NanoTerasu に集約されてシステム全体の構築が行われ、さらにファースビームが確認された。本システムでは試料の元素・化学状態分析が可能な X 線吸収分光(XAS)測定が実施される。それに合わせて、インフォマニティクスを活用した XAS スペクトル解析法が開発され、データから試料の結晶系および電子状態も特定できることが実証された。

本研究では並行してホウ化水素 (HB) シートの合成法を洗練させてきた。HB シートは紫外線照射によって水素放出し、その放出速度はシート内の 3 中心 2 電子(B-H-B)結合と 2 中心 2 電子(B-H)末端結合の数比で決まる。水素含有量を変えることなく HB シートの BHB/BH 結合比の制御法が開発され、水素貯蔵や光触媒などの用途に合わせて試料を最適化できるようになった¹⁾。また、より安定な HB シートが合成できるようになり、実際に 9 か月にわたる長期安定性を確認した²⁾。一方、HB シートはこれまでマイクロフレックから成る粉末が合成されてきたが、後処理でセンチメートルサイズのシート作製もできるようになった。このように 2023 年度は試料合成や調整を中心に 2 次元ホウ素マテリアルの研究が進められた¹⁻⁷⁾。

本機能性物質の社会実装に向けたコンソーシアム構築のために「第 16 回日本ホウ素・ホウ化物研究会」を 2024 年 2 月 16,17 日に対面開催(参加者:約 60 名)し、さらにセミナー「カーボンニュートラルを切り開く表面真空科学」を 3 月 26 日にオンライン開催(参加者:約 110 名)した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) M. Hikichi, J. Takeshita, N. Noguchi, S. Ito, Y. Yasuda, L. T. Ta, K. I. M. Rojas, I. Matsuda, S. Tominaka, Y. Morikawa, I. Hamada, M. Miyauchi, T. Kondo, Controlling Photoinduced H₂ Release from Freestanding Borophane Sheets under UV Irradiation by Tuning B-H bonds, *Advanced Materials Interfaces*, 10, 2300414 (2023)
- 2) S. Ito, M. Hikichi, N. Noguchi, M. Yuan, Z. Kang, K. Fukuda, M. Miyauchi, I. Matsuda, T. Kondo, Effective treatment of hydrogen boride sheets for long-term stabilization, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 25, 15531 (2023)
- 3) Xiaoni Zhang, Yuki Tsujikawa, Kazuki Yamaguchi, Masashige Miyamoto, Masafumi Horio, Kunio Yubuta, Hiroshi Ando, Mei Yuan, Kenichi Ozawa, Kazumasa Sugiyama, Takahiro Kondo, and Iwao Matsuda, Millimeter-scale growth of YCrB₄ single crystals and observation of the metallic surface state, *Phys. Rev. Materials* 8, 054001 (2024)
- 4) Y. Guan, F. Komori, M. Horio, A. Fukuda, Y. Tsujikawa, K. Ozawa, M. Kamiko, D. Hamane, T. Kawauchi, K. Fukutani, Y. Tokumoto, K. Edagawa, R. Tamura, I. Matsuda, Pioneering preparation and analysis of a clean surface on a microcrystal, mined by focused ion beam, *Jpn. J. Appl. Phys.* 63, 030906 (2024)

- 5) Y. Tsujikawa, X. Zhang, K. Yamaguchi, M. Haze, T. Nakashima, A. Varadwaj, Y. Sato, M. Horio, Y. Hasegawa, F. Komori, M. Oshikawa, M. Kotsugi, Y. Ando, T. Kondo, I. Matsuda, Quasi-Periodic Growth of One-Dimensional Copper Boride on Cu(110), *Nano Letters* 24, 1160 (2024)
- 6) Y. Tsujikawa, X. Zhang, M. Horio, F. Komori, T. Nakashima, Y. Ando, T. Kondo, I. Matsuda, Structure and Electronic State of Boron Atomic Chains on a Noble Metal (111) Surface, *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology*, 22, 1 (2024)
- 7) Takeru Nakashima, Ikuma Tateishi, Yuki Tsujikawa, Masafumi Horio, Takahiro Kondo, Iwao Matsuda, and Yasunobu Ando, Phase stability and band degeneracy of quasi-one-dimensional boron chain polymorphs embedded in LiB crystals, *Phys. Rev. B* 109, 165104 (2024)