

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

2021 年度 年次報告書
------------------

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

## § 1. 研究成果の概要

現代社会を支える機能性材料への展開を目的に、我々は学理に基づく物質設計で軽元素原子層としてホウ素から成る単原子シート「ボロフェン(B)」やその水素化物シート「ボロファン(HB)」を開発してきた。このような2次元ホウ素材料は無数の多形体を成すが合成パスに応じて作り分けることができ、さらに持続可能社会の基盤を支える機能性物質であることが理論的に予測されている。本研究は、本物質群の学理の追求と共に、物質ごとの物性と機能性を解明、それぞれに応じた革新的合成法を開発し、ライブラリー化することを目的としている。そのため自律的動作が可能なインフォマティクスと物質の機能性を直接評価できるオペランド計測を組み合わせた革新的な合成法開発技術を構築する。合成プラント・中継チャンバー・試料搬送チャンバー・測定チャンバーから構成されるシステムを開発し、試料搬送はロボットで自動的に実施する予定である。これまでに全体設計を完了し、真空チャンバーなどは既に用意されている。

本システムの開発と並行して、2次元材料について合成・複合化・評価・理論計算を実施した。2次元材料の探索は新規材料の開発に向けて重要であり、そのうちホウ素多形体とナリボンの電子構造の研究成果について発表を行った。我々が開拓した新物質、HB シート(ボロファン)は無数の多形体を形成し、さらにシートを細くすることもできる。そこで基本物性である電子構造について系統的に理論計算を実施した。骨格要素として5, 6, 7 員環のHBシートを中心に扱い、これらが半金属の電子構造を有することを示した。また、HBシートを薄くしたナリボン構造は幅やエッジ構造に応じて半金属や半導体に変化することが分かった。本成果を今後のHBシートの物質設計および機能開拓に役立てる。

## § 2. 研究実施体制

### (1) 松田グループ

- ① 研究代表者: 松田 巖  
(東京大学・物性研究所・教授)
- ② 研究項目
  - ・ 学理モデルの洗練化と原子層設計
  - ・ 革新的合成法開発システムの全体設計と要素技術開発
  - ・ 原子層の合成
  - ・ 電池複合材料の作製と評価
  - ・ 2次元ボロンデバイスのコンソーシアムの構築に向けた研究会の実施

### (2) 近藤グループ

- ① 主たる共同研究者: 近藤 剛弘  
(筑波大学・数理物質系・准教授)
- ② 研究項目
  - ・ フロー型原子層合成法の開発
  - ・ 原子層合成

### (3) 安藤グループ

- ① 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)
- ② 研究項目
  - ・ プロセスインフォマティクスによる自律型合成システムの構築
  - ・ フロー合成装置の各種制御パラメータのデジタル取得と活用
  - ・ マテリアルズインフォマティクスによる物質探索と物資同定技術の開発

### (4) 小嗣グループ

- ① 主たる共同研究者: 小嗣 真人  
(東京理科大学・先進工学部・教授)
- ② 研究項目
  - ・ パーシステントホモロジーを用いた原子層材料の機能解析法の開発

### (5) 吹留グループ

- ① 主たる共同研究者: 吹留 博一  
(東北大学・電気通信研究所・准教授)
- ② 研究項目
  - ・ ホウ素化合物シートを用いた複合材料の作製法の開発

【代表的な原著論文情報】

1) “Electronic structures of polymorphic layers of borophane”, I.Tateishi, X. Zhang, I. Matsuda, *Molecules* **27**, 1808 (2022).