

トポロジカル材料科学に基づく革新的機能を  
有する材料・デバイスの創出  
2020年度採択研究代表者

2022年度  
年次報告書

越野 幹人

大阪大学 大学院理学研究科  
教授

トポロジカル超精密原子層物質の創成

主たる共同研究者:

植村 卓史 (東京大学 大学院工学系研究科 教授)  
一杉 太郎 (東京工業大学 物質理工学院 特任教授)  
一杉 太郎 (東京大学 大学院理学系研究科 教授)

## 研究成果の概要

本プロジェクトでは、多孔性金属錯体(MOF)の一次元細孔を利用することで、ポリアセンの合成に取り組んできており、昨年度までにポリアセンの前駆体高分子の合成に成功している。今年度は、前駆体に加熱処理を施すことで、ポリアセンに変換し、その構造・物性評価を行った。各種分光測定的手法によってポリアセンの構造を詳細に解析したところ、長いものではベンゼン環が数十個以上繋がっていることが示唆され(平均個数は 19 個)、これまでの最長記録を大幅に更新することに成功した。さらに、一杉グループと協力し、ポリアセンの安定性と磁性の一端を明らかにした。今後は、越野・一杉グループと協力しながら、ポリアセンのトポロジカル物性を解明していく。

また、MOF とゲスト分子の特性が協奏的に作用することで、新規なナノハイブリッド材料創製が可能になる。今年度は、キラルな MOF に GNR を取り込ませることで、MOF のキラル情報を GNR へと転写することに成功した。今後は、キラル選択スピン輸送能など、キラル複合材料のキラル特性を明らかにし、デバイス応用も視野に入れて、研究を推進する予定である。

また GNR デバイスを基板上に実現のため、本プロジェクトでは鑄型となる MOF を基板上に薄膜合成の実現に取り組んでいる。今年度は、赤外パルスレーザー堆積法と溶媒雰囲気でのアニール処理を組み合わせ、真空下の安定性の高い MOF である HKUST-1 の配向膜合成、また電気伝導性 MOF である  $\text{Cu}_3(\text{HHTP})_2$  の配向膜合成を達成した。さらに、ミスト化学気相成長法(ミスト CVD 法: 液相法と気相法の特徴を合わせ持った手法)により、ガラス基板上に HKUST-1 多結晶薄膜を合成することに成功した。今後、MOF 薄膜への分子導入やポリアセン合成に用いる MOF の薄膜合成への展開を予定している。

将来実現を目指す GNR ネットワーク構造について、基底状態を理論的に解析する取り組みも進展している。GNR ネットワークは接合部のトポロジカル局在状態の数によって特徴づけられるが、 $N=2$  の場合は平坦バンドを含む新規な砂時計型のバンドが生じる。本年度はハートリーフォックハバードモデルを用いて、電子数に応じて多様な秩序状態が生じることが確かめられた。また原子層超格子系として関連の深いモアレグラフェンや hBN 系での電子状態およびフォノン状態についての理論を構築した。今後はモアレグラフェンのリボンの新規物性の理論開拓に挑む。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) “Nanoconfined synthesis of conjugated ladder polymers”, *Polym. Chem.*, vol. 13, No. 35, pp. 5003-5018, 2022
- 2) “Thermal Transformation of Polyacrylonitrile Accelerated by the Formation of Ultrathin Nanosheets in a Metal-Organic Framework”, *ACS Macro Lett.*, vol. 12, No. 4, pp. 415-420, 2023
- 3) “Synthesis of polyacene by using a metal-organic framework”, *Nat. Synth.*, accepted
- 4) “Moiré phonons in graphene/hexagonal boron nitride moiré superlattice”, *Phys. Rev. B* 107, 115301, 2023
- 5) “Moiré disorder effect in twisted bilayer graphene”, *Phys. Rev. B* 105, 245408, 2022