

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

2022 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

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テーショナルデザイン研究センター 研究チーム付)

小嗣 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

本研究では現代社会を支える機能性材料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)」を開拓している。学理と理論計算に基づいて軽元素原子層を設計し、それぞれに適した合成法を開発してその物性評価と共にライブラリー化することを目的としている。

合成法では革新的なアプローチとして、本研究では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の開発技術を構築してきた。システムは合成プラント・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ており、ロボットを用いた試料搬送や自動的な X 線分光実験などが実施される。これまで順調に整備が進められ、特に測定チャンバーではナノ集光 X 線分光を放射光施設 SPring-8 にて実現しその成果を論文発表した<sup>1)</sup>。

革新的な合成法の開発技術と並行して、各グループでは 2 次元ホウ素マテリアルの新物質や新物性の理論・実験的探索を実施してきた。トポロジカルな電子状態を成す 5,7 員環型の HB シートについて市販原料からの合成法を確立すると共に、酸添加による反応加速を実現した<sup>2,3)</sup>。ハニカム格子型を成す 6 員環型のシート上は、CO<sub>2</sub>の C-C カップリング反応<sup>4)</sup>や Ni ナノクラスター生成<sup>5)</sup>など表面化学的特性を明らかにしたと共に、水素吸蔵物質としての安定性も確認した<sup>6)</sup>。さらに 6 員環型から 5,7 員環型の HB シートの電子状態の総括的な理解が可能な 2 次元多形体の数理モデルを構築し<sup>7)</sup>、5,7 員環型の HB シートでは構成ブロックをもとに新規の環状ホウ素分子の理論的予言を行なった<sup>8)</sup>。これら化学及び物理学の成果は、本研究が中心的に取り組んでいる HB シートの物性理解だけでなく機能開拓の研究へ役立つ。これらホウ素化合物シートの複合材料の作製法開発も実施してきており、本年度は h-BN 上へのグラフェンのヘテロ・エピ成長を実現した。

本研究では 2 次元ホウ素マテリアルの社会実装に向けたコンソーシアム構築のために、研究会「深化するデータ科学と表面科学」を 2023 年 3 月 28 日に主催し、168 名の参加者があった。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) “Developing a simple scanning probe system for soft X-ray spectroscopy with a nano-focusing mirror”, H. Ando, M. Horio, Y. Takeo, M. Niibe, T. Wada, Y. Ando, T. Kondo, T. Kimura, I. Matsuda, e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. <https://doi.org/10.1380/ejssnt.2023-020>
- 2) “Accelerating synthesis of topological borophane by the HCl assisted ion exchange reaction”, X. Zhang, M. Hikichi, T. Iimori, Y. Tsujikawa, M. Horio, K. Yubuta, F. Komori, M. Miyauchi, T. Kondo, I. Matsuda, *Molecules* **28**, 2985 (2023).
- 3) “Electronic topological transition of 2D boron by the ion exchange reaction”, X. Zhang, Y. Tsujikawa, I. Tateishi, M. Niibe, T. Wada, M. Horio, M. Hikichi, Y. Ando, K. Yubuta, T. Kondo, I. Matsuda, *J. Phys. Chem. C* **126**, 12802 (2022).
- 4) “Carbon Dioxide Adsorption and Conversion to Ethane on Hydrogen Boride Sheets”, T. Goto, S. Ito, S. L. Shinde, I. Matsuda, I. Hamada, H. Hosono, T. Kondo, *Comm. Chem.* **5**, 118 (2022).
- 5) “Highly dispersed Ni nanoclusters spontaneously formed on hydrogen boride sheets”, N. Noguchi, S. Ito, M. Hikichi, Y. Cho, K. Goto, A. Kubo, I. Matsuda, T. Fujita, M. Miyauchi, T. Kondo,

Molecules **27**, 8261 (2022).

- 6) “Effective treatment of hydrogen boride sheets for long-term stabilization”, S. Ito, M. Hikichi, N. Noguchi, M. Yuan, Z. Kang, K. Fukuda, M. Miyauchi, I. Matsuda, T. Kondo, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **25**, 15531 (2023).
- 7) “Homotopic analysis of quantum states in 2D polymorphs by a herringbone lattice model”, Y. Ando, X. Zhang, Y. Tsujikawa, Y. Sato, M. Horio, J. Haruyama, O. Sugino, T. Kondo, I. Matsuda, *Phys. Rev. B* **106**, 195106 (2022).
- 8) “In search of a cyclic hydrogenated boron molecule and the prediction of 2,4,6,8-2H-1,5:1,5- $\mu$ H –  $B_8H_{10}$ ”, Y. Ando, T. Nakashima, Y. Heming, I. Tateishi, X. Zhang, Y. Tsujikawa, M. Horio, N. T. Cuong, S. Okada, T. Kondo, I. Matsuda, *Molecules* **28**, 1225 (2023).