

2023 年度年次報告書

原子・分子の自在配列と特性・機能

2021 年度採択研究代表者

北尾 岳史

東京大学 大学院工学系研究科

助教

ナノ空間・界面情報の転写による超精密単原子層物質の創製

## 研究成果の概要

昨年度、我々は結晶性のナノ多孔性材料(MOF)を鋳型とすることで、世界で初めてポリアセンを合成することに成功した。今年度は、本成果を論文誌で報告するとともに、ポリアセンの物性について調査を行った。MOF 鋳型法は、これまでのアセン合成で用いられてきた表面合成法とは異なり、バルク量のサンプルを得ることができるため、様々な解析手法を用いることが可能である。ポリアセンの温度可変 ESR 測定の結果、温度上昇に伴う磁化率の増加が観測された。Bleaney-Bowers 式を用いたフィッティングによって、ポリアセンのビラジカル性を実証することに成功した。しかし、そのビラジカル数は、理論予測されているものよりも数桁小さいことが分かった。粉末 X 線回折測定や分子動力学計算によって、ポリアセンは分子同士がπスタックした構造をとっていることが示唆され、(見かけ上の)ビラジカル性の減少には、分子間のスピン-スピン相互作用が寄与していることが予想される。ポリアセンの予想外の磁性を解明するために、現在、密度汎関数法による凝集ポリアセンのビラジカル性の理論計算とともに、モデル化合物として長さが明確に定まったアセンの合成・磁性評価に取り組んでいる。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Takashi Kitao, Takumi Miura, Ryo Nakayama, Yusuke Tsutsui, Yee Seng Chan, Hironobu Hayashi, Hiroko Yamada, Shu Seki, Taro Hitosugi, and Takashi Uemura, “Synthesis of polyacene by using a metal-organic framework”, *Nature Synthesis*, 2, 848-854 (2023).