

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

水津 理恵

名古屋大学 大学院理学研究科

特任助教

強相関ラジカル分子構造体のライングラフ物性

研究成果の概要

本研究では、優れた性質を示す元素の構造(グラフェン)を、同じトポロジーを持つ分子でつくることで、ディラックコーンのような特異なバンド分散をもつ分子性ハニカム構造の構築を目指す。

これまでに、分子間および分子-基板相互作用を利用することで、3 回対称をもつトリプチセン誘導体 Trip-Phz 分子が Ag(111)基板上に、単結晶と同様のハニカム格子を形成することを走査トンネル顕微鏡 (STM) による観測にて明らかにしているが、他にもいくつかの構造も形成されてしまうことから、ハニカム格子のみが形成される条件を模索した。今年度はさまざまな基板を検討したところ、共同研究先のドイツ・キール大学で行った STM 実験で、Pb(111)基板上でハニカム格子のみが形成される条件を確立することが出来た。このハニカム格子は、基板上で発現するキラリティをもつ。また端はアームチェア型よりもジグザグ型の方が優勢であり、エッジ状態の電子構造を走査トンネル分光 (STS) にて明らかにした。得られた分子性二次元構造体のバンド構造を明らかにするため、角度分解光電子分光システムのセットアップが終了し、十分な分解能での測定が可能となった。その後、スピン分解光電子分光のためのスピン検出器の作製および調整を行った。

また、トリプチセン誘導体は結晶中でハニカム格子だけでなく、しばしば三角格子を形成する。この三角格子のバンド計算を行ったところ、分子の対称性を反映してディラックコーンおよびトポロジカルフラットバンドを持つことを明らかにした。またスピン軌道相互作用を入れることで、Zeeman 型のスピン偏極バンドを示すことがわかった。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Yoshiaki Shuku, Rie Suizu, Saya Nakano, Masahisa Tsuchiizu, and Kunio Awaga, “Engineering Dirac cones and topological flat bands with organic molecules”, *Physical Review B*, 107, 155123 (2023).
- 2) Yoshiaki Shuku, Rie Suizu, Masahisa Tsuchiizu, and Kunio Awaga, “Ideal trigonal prismatic coordination geometry of Co(II) in a honeycomb MOF with a triptycene-based ligand”, *Chemical Communications*, 59, 10105-10108 (2023).
- 3) Akihiro Tomimatsu, Rie Suizu, Miyabi Nakazawa, Takashi Shirahata, Yohji Misaki, Naoya Kinoshita, and Kunio Awaga, “Optoelectronic conversion and polarization hysteresis in organic MISM and MISIM devices with DA-type single component molecules”, *Faraday Discussions*, 250, 96-109 (2024).
- 4) Chaoqun Cao, Qi Chen, Rie Suizu, and Kunio Awaga, “Critical transition to a highly conductive state through PEDOT oligomer percolation in redox-active COFs”, *Journal of Materials Chemistry C*, 12, 3072-3076 (2024).
- 5) Rie Suizu, Yoshiaki Shuku, Vincent Robert, Pablo Roseiro, Nadia Ben Amor, Zain Khawar, Neil Robertson, and Kunio Awaga, “X-ray crystallographic analysis of the antiferromagnetic low-temperature phase of galvinoxyl: Investigating magnetic duality in organic radicals”, *Dalton Transactions*, 53, 1961-1965 (2024).