

原子・分子の自在配列と特性・機能
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

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

§ 1. 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を、同じトポロジーを持つ分子でつくることで、その性質を再構築する、あるいはさらに発展させるという『等結晶トポロジー』という概念に基づき、分子間および分子-基板相互作用を利用することで、基板上に自己集積的に二次元構造体を構築し、その電子状態を明らかにする。さらにバンドフィリング制御により、その構造トポロジーに起因したライングラフ物性の開拓を行う。

今年度は、二次元構造体の構成要素である強相関ラジカル分子を 10 種類合成し、その結晶構造を明らかにした。フェナジン部位をもつトリプチセン誘導体 Trip-Phz は、THF 溶液から得られた結晶中においてハニカム格子を形成すること、またバンド計算結果から、価電子帯および伝導帯のいずれにもディラックコーンおよびフラットバンドが含まれることを報告している。この Trip-Phz 分子を真空下 Ag(111)表面上に蒸着させ、走査トンネル顕微鏡による観察を行ったところ、結晶中と同様のハニカム格子が形成されていた。また、Trip-Phz 分子は炭素材料との親和性が高く、C₆₀と共結晶をつくることがわかっている。この性質を利用して、Ag(111)表面上に Trip-Phz と C₆₀を共蒸着させたところ、ハニカム格子の空孔に C₆₀が取り込まれた構造が得られた。この構造体の電子構造を調べるために、既存の光電子分光および電子線回折材料評価システムの改良を行い、来年度 VLEED 型スピン検出器を導入する。

さらに、分子性結晶における格子のライングラフ変換について報告した。分子間相互作用が大きな分子が格子をつくった場合、電子は分子間に存在し、元の格子の midpoint を結んだ格子を形成する。この関係を幾何学においてライングラフと呼ぶ。その結果、電子がつくる格子に由来した電子物性を示すことを明らかにした。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Line graph theory reveals hidden spin frustration and bond frustration in molecular crystals with strong isotropy”, J. Mater. Chem. C, vol. 10, No. 4, pp.1196-1203, 2022.