

# 科学研究費助成事業（基盤研究（S））公表用資料 〔令和5（2023）年度 中間評価用〕

令和5年3月31日現在

研究期間：2021～2025  
課題番号：21H05012  
研究課題名：スマート社会基盤素子に向けた最軽量原子層材料の開発  
研究代表者氏名（ローマ字）：松田 巖（MATSUDA Iwao）  
所属研究機関・部局・職：東京大学・物性研究所・教授  
研究者番号：00343103

## 研究の概要：

物質として究極な薄さを有する単原子層材料の中で「2次元ホウ素化合物」は次世代通信や電池の材料としての機能が期待されているだけでなく、軽量性・豊富な資源・環境負荷フリーなどの特徴も有するため未来のスマート社会基盤素子として理想的である。本研究ではその合成法を確立すると共に、量子ビームを用いた先端計測と理論計算を実施して本物質に潜む学理を追求すると共に材料開発を速やかに行う。

研究分野：原子層、薄膜、表面界面、機能物性

キーワード：単原子層、表面、界面、ホウ素、ポロフェン、ポロファン

## 1．研究開始当初の背景

我々の社会を支える科学技術はナノテクノロジーおよびナノサイエンスの発展と共にデバイスの微細化および多機能化により促進されてきた。最近では情報に対するニーズが特に高まっており、第5世代(5G)を超えた通信だけでなく、IoTのコンセプトにおける「ヒト」と「モノ」のネットワークを介したつながりから、Society 5.0 for SDGsの目標である「モノ同士」のコミュニケーション技術も必要とされている。すなわち、今後のスマート社会ではヒト同士でより多くの情報を高速で交わすだけでなく、遠隔医療機器・工場内の機械・家畜の動物・農園の植物など、その対象も爆発的に広がっていく。この未来を実現するためには膨大な量の通信素子が必要であるだけでなく、その動作を可能にする電力も不可欠である。そのため、次世代の情報およびエネルギーを担うキャリア素子は機能性があるだけでなく、i) 軽量、ii) 豊富な材料資源、iii) 環境負荷フリーでなければならない。我々はこのような条件を満たす物質として、ホウ素の原子層「ポロフェン(B)」および水素化誘導体シート「ポロファン(HB)」に注目し、これまでに金属相や珍しいディラック電子系を発見してきただけでなく、水素輸送材料や化学センサーなども開発してきた。しかしながらこれらの成果はごく最近のことであり、その物性や機能性の起源を探る研究は未開拓分野であり、材料開発と共にこれらの学理創成も急務となっていた。

## 2．研究の目的

本研究では、ポロフェンおよびポロファンのパイオニアとして機能が期待される2次元ホウ素化合物の合成法を確立し、その原子構造と電子状態を精密に評価して本物質に潜む物理と化学を明らかにする。さらにスマート社会基盤素子としての動作環境下における電子状態変化をホウ素の化学状態と合わせて「その場」観測し、その学理の追求と具体的なデバイスの開発を本研究の目的とする。2次元ホウ素化合物の多種多様な電子(化学)状態が機能発現時にどのように「応答するのか」「変化すべきか」が本研究の核心となる「問い」であり、そして本研究を通じて実用に向けた物質設計および合成の最適化を図る。

ポロフェンやポロファン(HB)などの2次元ホウ素化合物では高い電池特性も理論的に予測されており、さらにその新奇なディラック電子系が次世代通信帯域において大きな応答感度を持つことも期待されていることから電気化学や光応答の材料開発を中心に研究を行う。

## 3．研究の方法

本研究では2次元ホウ素化合物について、微視的な解析が可能な大面積合成試料と、実用化に向けた巨視的な材料評価が容易な大量合成試料の2種類で実験を行う。原子構造は陽電子・電子線の回折法を用いて調べ、電子状態は放射光を利用した光電子分光法で精密に明らかにする。各試料に対してデバイス動作環境下における電子状態変化をホウ素の化学状態と合わせて「その場」観測を行う。このような「その場」実験は「オペランド計測」と呼ばれ、我々が開発したオペランドX線分光装置を用いて実験を行う。これらの測定によって得られた物質情報を総合的かつ相補的に収集し、さらに理論計算やシミュレーションとも組み合わせたデータ科学を展開する。そして機能性の起源を正確に明らかにすると共に、スマート社会基盤素子としての材料開発を行う。

## 4．これまでの成果

2次元ホウ素化合物の大量合成法では作製条件に対する実験を重ねることで、反応機構の解明をしつつ反応時間の効率化や高品質試料の収率を上げてきた。大面積合成では、結晶基板を用いることでcmサイズのホウ素化合物の二次元結晶の作製を実現し、表面分析法によって精密に原子構造や化学状態(電子状態)を明らかにした。これらの研究を通じて、ホウ素の低次元物質の化学を中心とした理解が深まり、新物

質の発見[発表論文 1]や新分子の予言[発表論文2]、新しいホウ素化学の概念形成[発表論文6]に至った。多くの成果をあげてきたが、一例を紹介する。本研究では電池研究の一環として代表的な電極物質である銅(Cu)を対象に結晶表面上にホウ素(B)の二次元結晶を作製し、その原子構造を決定し、さらに電子状態を精密に分析した。その結果、B/Cu界面ではB原子とCu原子の一次元鎖が交互に配置した二次元構造を有していることが分かった。3次元物質ではBとCuは完全に分離することが知られており、本研究にて界面二次元系では化合物が形成されることが初めて明らかとなった[発表論文6]。新物質の先端計測によって新たな物質科学が展開されると共に、本物質群の適切な理解の下、共にスマート社会基盤素子への材料開発が迅速に進められている。

## 5. 今後の計画

本研究ではこれまでに培った物理と化学の理解に基づいて機能性物質の設計と合成を行っており、実際に新しい二次元ホウ素化合物の発見にも至っている[発表論文 1]。そこで新物質の実際の物性を評価し、理論計算と合わせてその学理をさらに深める。通信および電池材料の開発については、二次元ホウ素化合物の電気伝導や電気化学の測定データをこれまで蓄積してきた。今後は計画通りに、これらの物質群のオペランド X 線分光実験を実施し、機能発現時における電子状態変化を直接検証する。そしてそれらの情報をもとに具体的な素子の開発を行う。

## 6. これまでの発表論文等 (受賞等も含む)

### 〔受賞〕(計 5 件)

- 1) 日本表面真空学会 **学会賞** (2022 年度): 松田巖
  - 2) 日本ホウ素・ホウ化物研究会 **学術賞** (2022 年度): 近藤剛弘
  - 3) 日本物理学会 **学生優秀発表賞** (2022 年度): 辻川夕貴 (院生)
  - 4) KEK-IMSS\* 量子ビームサイエンスフェスタ **学生奨励賞** (2022 年度): 辻川夕貴 (院生)
- \* KEK-IMSS: 高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所
- 5) 国際会議 The 22nd international vacuum congress IVC-22 **IUVSTA-Elsevier Student Award** (2022): 吉岡ひかり (院生)

### 〔雑誌論文〕(計 9 件)

- 1) **Accelerated synthesis of borophane (HB) sheet through HCl-assisted ion-exchange reaction with YCrB<sub>4</sub>**, X. Zhang, M. Hikichi, T. Iimori, Y. Tsujikawa, M. Yuan, M. Horio, K. Yubuta, F. Komori, M. Miyauchi, T. Kondo, and \*I. Matsuda, *Molecules*, in press (2023).
- 2) **Observing an ordered surface phase by B deposition on Cu(110)**, Y. Tsujikawa, X. Zhang, M. Horio, T. Wada, M. Miyamoto, T. Sumi, F. Komori, T. Kondo, \*I. Matsuda, *Surface Science* **732**, 122282-1,-4 (2023).
- 3) **Prediction of a Cyclic Hydrogenated Boron Molecule as a Promising Building Block for Borophane**, \*Y. Ando, T. Nakashima, H. Yin, I. Tateishi, X. Zhang, Y. Tsujikawa, M. Horio, N. T. Cuong, S. Okada, T. Kondo, and \*I. Matsuda, *Molecules* **28**, 1225-1,-13 (2023).
- 4) **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, and \*T. Kondo, *Molecules* **27**, 8261-1,-12 (2022).
- 5) **Soft X-ray Absorption/Emission Spectroscopy and Atomic Hydrogen Irradiation Effect of Ammonia Borane**, \*M. Niibe, Y. Haruyama, A. Heya, S. Ito, *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology* **20**, 226-231 (2022).
- 6) **Carbon dioxide adsorption and conversion to methane and ethane on hydrogen boride sheets**, T. Goto, S. Ito, S. L. Shinde, I. Matsuda, I. Hamada, H. Hosono, and \*T. Kondo, *Communication Chemistry* **5**, 118-1,-10 (2022).
- 7) **Structural and electronic evidence of boron atomic chains**, Y. Tsujikawa, M. Horio, X. Zhang, T. Senoo, T. Nakashima, Y. Ando, T. Ozaki, I. Mochizuki, K. Wada, T. Hyodo, T. Iimori, F. Komori, T. Kondo, and \*I. Matsuda, *Phys. Rev. B* **106**, 205406-1,-9 (2022).
- 8) **Structure of  $\chi_3$ -Borophene studied by Total-reflection high-energy diffraction (TRHEPD)**, \*Y. Tsujikawa, M. Shouji, M. Hamada, T. Takeda, I. Mochizuki, T. Hyodo, I. Matsuda and \*A. Takayama, *Molecules* **27**, 4219-1,-8 (2022).
- 9) **Environmental effects on layer-dependent dynamics of Dirac fermions in quasicrystalline bilayer graphene**, Y. Zhao, T. Suzuki, T. Iimori, H.-W. Kim, J. R. Ahn, M. Horio, Y. Sato, Y. Fukaya, T. Kanai, K. Okazaki, S. Shin, S. Tanaka, F. Komori, H. Fukidome, and \*I. Matsuda, *Phys. Rev. B* **105**, 115304-1,-8 (2022).

## 7. ホームページ等

東京大学 物性研究所 松田巖研究室ホームページ: <https://imatsuda.issp.u-tokyo.ac.jp>