

## 研究課題名 分子性強等方性構造の化学構築と機能開拓

名古屋大学・理学研究科・教授

あわが くに  
阿波賀 邦夫

研究課題番号： 20H05621 研究者番号：10202772

キーワード： 強等方性構造、幾何学的トポロジー、バンドフィリング制御

## 【研究の背景・目的】

近年、グラフ理論によって炭素の新しい同素体「 $K_4$ 炭素」が提案された。この $K_4$ 炭素は、炭素同素体としてよく知られているダイヤモンド、グラフェンとともに、幾何学において「強等方性」と呼ばれる性質をもっている。これらは、その構造トポロジーを反映した極めて特異なバンド構造を有しており、もしそのフェルミ準位を自由制御できれば、Dirac 電子系を人工構築できる。しかしながら、これを炭素同素体で実現することは不可能に近い。そこで我々は、炭素同素体の結晶構造、つまり強等方性格子をもつ分子結晶でつくる着想を得た。このような分子性強等方格子には、炭素同素体にはない巨大内部空間や Flat Band、酸化還元能などの電子機能が期待される。本研究では、分子性強等方構造の合理的な構築を達成した上で、電気化学的バンドフィリング制御法を確立し、強等方性トポロジーに起因する多彩な電子・スピン機能を引き出し、電子とイオン輸送の協奏する固体電気化学機能を開拓する。

## 【研究の方法】

本研究の目的を達成するために、以下の「つくる」「ひきだす」「てらす」の3戦略を立てた。

## 1. 【つくる】分子性強等方性物質の自在合成

炭素同素体の素構造は、 $sp^2$ あるいは  $sp^3$ 炭素のような  $C_3$ あるいは  $T_d$ 対称性をもつ。そこでこの対称性を取り入れた分子によって合理的に構築する。

## 2. 【ひきだす】電気化学的バンドフィリング制御

分子性強等方性物質のバンド構造は、Dirac cone や Flat Band のような特異なバンド分散を必然的に有する。これらの実験的証拠を得た後、分子性強等方性物質がもつ酸化還元能と巨大内部空間を利用して、固体電気化学反応によるフェルミ準位の自在制御を試みる。

## 3. 【てらす】Operando 計測システム

我々は、X線吸収スペクトル測定や粉末X線回折、SQUID 磁気測定において、固体電気化学反応下、試料を系外に取り出すことなく計測可能な Operando 計測システムを実装している。やみくもに進むのではなく、これらによって足元を照らしながら研究を進める。

## 【期待される成果と意義】

本研究では、「強等方性」の数学と物理を化学の力によって繋ぐことにより、トポロジー物質科学の一翼を担う新学術の確立を目指す。具体的には、上記の方法論によって、世界に先駆けて Dirac Cone ならびに Flat Band の自在構築論を確立する。この上で、物性化学の夢と言っても過言ではないバンドフィリング制御の技術を確立し、特異な電子系を自在に創出する。さらに、分子性強等方構造の巨大ポーラス構造を利用し、電子とイオン協奏効果を演出して、既存の蓄電デバイスを凌駕する特性を得る。

## 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ A. Mizuno, Y. Shuku, M. M. Matsushita, M. Tsuchiizu, Y. Hara, N. Wada, Y. Shimizu, and K. Awaga, "3D Spin-Liquid State in an Organic Hyperkagome Lattice of Mott Dimers", *Phys. Rev. Lett.*, **119**, 057201 (2017).
- ・ A. Mizuno, Y. Shuku, and K. Awaga, "Recent Developments in Molecular Spin Gyroid Research", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **92**, 1068-1093 (2019).

## 【研究期間と研究経費】

令和2年度～6年度 426,500千円

## 【ホームページ等】

<http://advmat.chem.nagoya-u.ac.jp>  
awaga.kunio@b.mbox.nagoya-u.ac.jp

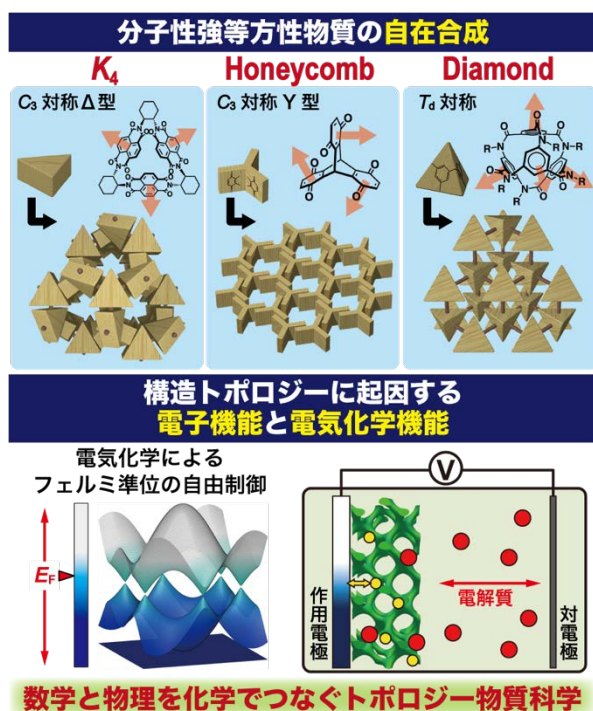


図1 本研究のコンセプト