

## 【理工系(化学)】

研究課題名	ナノグラフェンの端の精密科学: エッジ状態の解明と機能
研究代表者名	えのき としあき 榎 敏明 ( 東京工業大学・理工学研究科・教授 )

### グラフェンの端の電子の働きの解明とその電子・磁気機能の応用へ

グラファイトの一枚のシート(グラフェン)を切ってその大きさを小さくしてゆくと、最後はアントラセン、ナフタレン等の縮合多環系芳香族炭化水素分子となり、最後は1個の6員環からなるベンゼンに至る。ナノグラフェンは、このようなグラフェンと縮合多環芳香族炭化水素分子の間にあり、端形状の幾何学構造に大きく依存した電子構造を有する。一般に任意形状のナノグラフェンの端はジグザグ端とアームチェア端の組み合わせで記述され、ジグザグ端には、エッジ状態と呼ばれる局在した非結合 $\pi$ 電子状態が存在し、特異な電子的性質を有するとともに、この状態のもつ局在スピンのため強い磁性を発現する。このようなエッジ状態の存在は、縮合多環系芳香族炭化水素分子における非ケクレ構造の構造有機化学の問題として、また、物理の観点からはDirac型電子のグラフェン端での振る舞いとして理解され、ここに、化学と物理を跨ぐ基礎科学の重要な未開拓の分野が存在する。このようなエッジ状態は、電子授受機能を持ち、電子輸送現象の特異状態発現の場として働き、また、化学反応活性点として多様な化学現象の場を提供する。さらに、エッジ状態の有する局在スピンは端の幾何学構造と端炭素原子の終端構造の違いにより多様な磁氣的挙動を示すことから、炭素を基礎とした分子磁性体設計の重要な要素となり得る。本研究では、ナノグラフェンの電子状態解明とその機能発現、新現象の発見を目的として、実験と理論の両側面から、以下の課題に取り組む。①正確に定義されたグラフェン端を用いてマイクロプローブ顕微鏡での原子分解能観測により、ナノグラフェン端の幾何学構造に依存した特異な電子構造の解明を行う。②ナノグラフェンをホストとするホスト-ゲスト相互作用の研究を通して、グラフェン端での電子授受機能・化学反応のメカニズムの理解をおこなう。③エッジ状態スピンを用いた多様な分子磁性体の構築をおこなう。④ナノグラフェンの化学・電子・磁気機能を基礎に、新しい分子素子の開拓をおこなう。

本プロジェクトの成果は、ナノグラフェンに関する化学と物理に跨る学際的新領域の創成に貢献すると共に、従来、経験にのみ頼っていた炭素2次電池、キャパシタ、触媒機能等の炭素研究を基礎科学の視点から捉え直し、新たな研究発展をもたらすことが期待される。

#### 【キーワード】

**ナノグラフェン**：ナノサイズのグラファイトの一枚のシートであり、端の幾何学構造に大きく依存した電子的性質をもつ。

**エッジ状態**：ナノグラフェンの端に存在する化学的・電子的・磁氣的に活性な電子状態

#### 【部会における所見】

本研究は、グラフェンのエッジ状態の解明、グラフェンの電子、スピン状態の解明と素子開発を目的とする。これまで研究代表者は世界に先駆けて独自の立場からグラフェンの研究を進め、直接的エッジ観測や精密磁性解明など、国際的に最先端の研究成果を発表している。研究計画も、申請者の高い研究遂行能力から実現が可能で、大きな研究成果が期待でき、この研究を推進することにより、グラフェンの端の精密科学の新たな領域を開きスピントロニクスに大きく寄与する可能性がある。このように、本研究は、当該研究分野をリードし、日本が世界に誇れる研究であり、特別推進研究として採択すべき課題であると判断した。