

令和3(2021)年度学術変革領域研究(A)

2.5次元物質科学：
社会変革に向けた物質科学のパラダイムシフト

公募班メンバー特別対談 6

A01班

物質創製班 公募班

(環状中空分子の二次元集積化に基づく
2.5次元ナノ空間の創製と機能化)

田代 省平

先生方がこれまで進めてきた研究と、公募班へ
のご応募の理由を教えてくださいませんか？

石井 院生時代から理論分野で研究をしていました。物質の電子状態を明らかにするという研究室で、電子状態計算いわゆる第一原理バンド計算という手法を用いた研究です。その後、金沢大学に赴任した際、所属した研究室で岡田さん(A01)のグループと一緒に、グラフェンナノリボンに関する共同研究を行いました。コンパクトな系ですが多彩な磁性を持ち、ノンコリア磁性というスピンの平行や反平行ではない不思議な磁性があり、大変興味深く感じました。その後、スピントロニクスに強く興味を持ち、そちらの研究を進めていきました。

研究対象はこれまで、二次元物質だけでなく、三次元物質である結晶も扱ってきています。結晶には並進対称性があり、無限に、周期的に並んでいるということがとても大事ですが、2.5次元ではその周期性を少し壊して、回転等によるずれを加えています。そういった特殊な系はこれまで取り組んでいなかったため、新鮮さを感じ、この領域に応募しました。また今回の2.5次元領域活動では、初めて見るスピントロニクス的な側面や熱電材料的な側面にも期待しています。

田代 博士号を取るまでは、超分子化学、錯体化学の研究室にいました。溶液の中に溶けているので、0次元のナノキャピティのようなものを作り、その中で分子認識をするという研究です。そこでは、生物中で見られる分子認識を人工的にデザインすることは面白いなと感じていました。その後、現在のポストで助手になり、引き続き錯体化学と超分子化学を研究しています。

今現在は、金属イオンと配位子を組み合わせて結晶を作るプロジェクトにどンドンシフトし、主に孔の開いた結晶を作ることが多いです。結晶を作る中で、材料としては

A05班

機能創出班 公募班

(不整合ファンデルワールスヘテロ構造の熱電効果と
スピン軌道結合係数の第一原理計算)

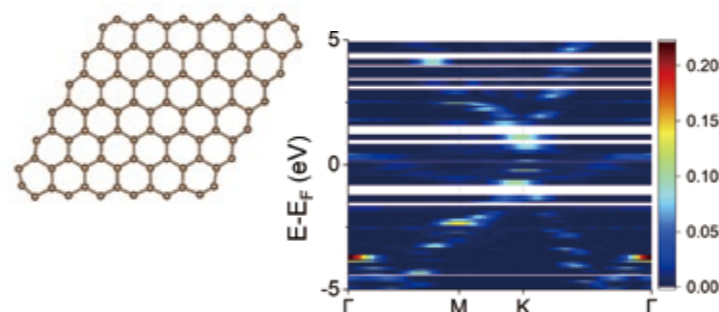
石井 史之

錯体で三次元に繋がるものがよくあるのですが、金属と配位子が二次元状に繋がった構造も期せずできることがあります。そこから二次元物質って面白そうだなと興味を湧いたのです。もともと僕自身、何か新しい物質を作りたい、手法も試してみたいという思いがありました。生み出した新しい物質は、こんな面白いことに使えるかもしれないというモチベーションも。これまで生み出せていなかった二次元物質が得られるようになり、そのタイミングで2.5次元の理念を読ませていただき、何かコントリビューションできそうだなと考えて応募につながりました。

現在の研究内容や、2.5次元的ポイントは？

石井 基本的には今までずっと結晶を研究してきました。並進対称性があるもの、例えば数オングストロームいったら、また同じ構造が繰り返されるものです。二次元だと完全に二次元方向に数オングストロームいったらの繰り返りで、同じ構造が繰り返されて結晶になります。2.5次元と言うと少し分かりにくいのですが、三次元ではないので二次元に直行する方向に無限に繋がっていかず、何らかの厚みがあるというイメージになります。ただ厚みがあるだけではなく、最近の研究動向を考えると、回転等のずれを加えることが重要です。層状物質をずらして重ねることによって既存の周期性が壊れ、新しく長い周期性が見られるようになる。このようにして、周期性が壊れた中で出てくる新しい物性に強く興味をひかれます。そしてそのような現象をいかに理解するか、基礎的な部分もとても興味深いです。さらに応用的な観点では、2.5次元を考えることで初めて出てくるような物性、磁性や熱電物性、輸送特性がどのように変わるのか、それらに非常に強い興味を持っています。

現在少しずつ進めているのは、分子のような系で作



6×6のグラフェンフレークとそのディラック電子状態 (石井)

結晶の電子状態などを再現する、そのような理論の計算をまず最初にやっています。それがあれば、例えば上図に示す6×6程のグラフェンフレークで、ディラックコーンという電子状態が再現できるようになります。その後は有限サイズの二次元物質を貼り合わせて、それを回転していくことを考案中です。これはグラフェンに限らず、遷移金属ダイカルコゲナイトでも進めています。

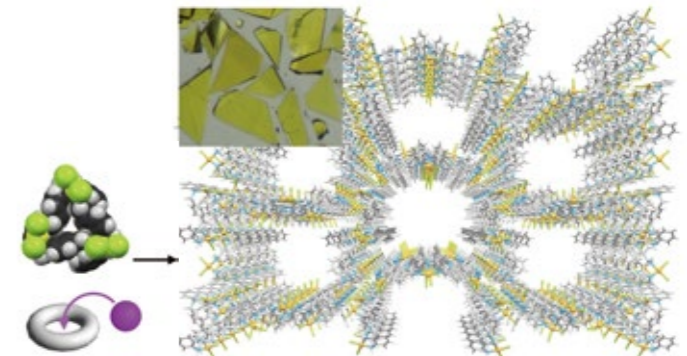
田代 領域の理念に書かれていた2.5次元の定義の中で一番近いなと思ったのは、二次元と二次元の間の空間は二次元だが、そこにも何か分子が並ぶことができる。それはある意味三次元かもしれないのですが、やはりこの層と層の間にある空間が、僕の中の2.5次元というイメージです。

自分の研究では色々な錯体で結晶を作っており、最近特に扱っているのはクラウンエーテルのような環状分子です。それら分子は輪の真ん中に様々な分子を効果的に置くことができるので、そのような環状分子を錯体で集積化して二次元の構造を作っています。僕が作っているのは、環がフラットに繋がっていないため、波打った凸凹状の二次元物質です。波と波が重なるように積層し、結晶になっています。グラフェンのようにフラットでなく、でこぼこの凸と凹の間に明確な空間があります。その空間は普通の二次元の層間よりも、もっと積極的に色々な分子やイオンを自在に並べることができる空間になるのではと考えているところです。様々なバージョンの二次元構造を作り、それらにおける層間を使い、色々な機能を出していけたらと考えています。

領域での共同研究について教えてください。

石井 電子状態計算を行っているの、何か新しい物質の物性を明らかにすることで共同研究していきたいと考えています。そこで、黒澤さん(A05)とは熱電効果についての共同研究を、坂野さん(A03)とは遷移金属ダイカルコゲナイドの電子状態についての共同研究を進めています。

田代 二次元物質と我々の結晶をハイブリッドすることで新しい機能を出すことが、切り口の1つと考えています。これまで進めてきた共同研究は、A04友利さんグループ(R4年度在籍)およびA01吾郷さんグループと、多孔性結晶の劈開と基板への転写、およびその機能化について、A01櫻井さんグループと、多孔性結晶と金ナノ粒子の複合化についてです。



環状分子が集積化した多孔性結晶 (田代)

領域の皆様へメッセージをお願いします。

石井 成果を出していくっていうのは当然なのですが、なるべく領域の方々と共同で面白いテーマにあたって、何かしら面白いことを明らかにしていきたいです。

田代 この領域で共同研究をして、何か成果を出すことが第1目標です。自分のフィールドに寄ったものより、2.5次元領域に寄せた中での共同研究として、一緒に進めることができたら一番嬉しい。そして、それがきっかけとなり、自分の研究の興味や方向性、可能性が広がっていくように思います。領域会議はすごくいい機会ですし、領域内で定期的に開催している金曜日お昼のセミナーもとても勉強になっています。分野が違う私には初めて聞くような話が多く、純粋に興味深く聞かせていただいています。ただ分野が異なるので、私の研究をそこで20〜30分説明するのはちょっと気が引けるなど...

石井 大丈夫だと思いますよ(笑)、物理半分、化学半分ですから。同じ大学内で物質科学の化学の方がいらっしゃって、日頃からお話聞きたいなと思っていますが、なかなか聞く機会がなかったりするものです。ですので、ぜひ発表していただければと思います。

田代 そうですね、前向きに頑張りたいと思います！



田代 省平

東京大学

大学院理学系研究科
准教授

石井 史之

金沢大学

ナノマテリアル研究所
教授

(活動班順、五十音順 敬称略)

ライター：柏田 百代 (広報担当)

領域ホームページ <https://25d-materials.jp>

(ニュースレター公開日: 2023年11月6日)