

様 式 F - 7 - 2

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）実績報告書（研究実績報告書）

所属研究機関名称		奈良先端科学技術大学院大学	機関番号	1 4 6 0 3
研究 代表者	部局	先端科学技術研究科		
	職	教授		
	氏名	山田 容子		

1．研究種目名 挑戦的研究（萌芽） 2．課題番号 18K19118

3．研究課題名 基板上合成による超高次アセン及びその金属錯体の合成と電子構造の解明

4．補助事業期間 平成30年度～令和元年度

5．研究実績の概要

ナノカーボン材料は次世代材料としての期待が高く、ボトムアップ・トップダウンのグラフェン・カーボンナノチューブ・グラフェンナノリボン(GNR)の合成開発が盛んである。特にジグザグエッジグラフェンナノリボン(ZGNR)は高い導電性が予想されるにも関わらず、エッジがラジカル性を帯びるため不安定で単離が困難であり、理論研究が先行している。本研究では、ZGNRの部分構造ともいべき高次アセンを、超高真空下の基板表面反応により合成し、その電子構造を最先端の走査型トンネル顕微鏡や非接触原子間力顕微鏡を用いて明らかにするとともにその反応性を明らかにし、さらにヘテロ高次アセン合成を実現することを目的とした。

初年度に我々は、独自に展開してきた光前駆体法を超高真空下基板上合成に適応し、これまで理論的に予測されていたヘプタセンやノナセンなどの高次アセンが、開殻ピラジカル性を帯びていることを実証した。またすでに我々は、ヘプタセンのジプロモ前駆体をAu(111)表面上で加熱すると、ヘプタセンGNRが形成されずに、金原子をリンカーとするヘプタセンオリゴマーが形成することを世界で初めて見出した。この原因について明らかにするために、ターフェニレンの様に細いリンカーを用いると、立体障害が解消され、ヘプタセンが組み込まれたナノ構造を構築することを明らかにした。すなわち、芳香族炭化水素の水素同士の立体障害がヘプタセンGNR生成を阻害することを明らかにした。

またヘテロ高次アセンとして、超高真空下での含窒素ウンデカセンのAu(111)基板表面合成を試みた。Au基板表面で加熱すると窒素部位での還元体が観測されると同時に、ペリ位で分子内縮環反応が起こり、逆Diels-Alder反応が段階的に起こっていることが確認された。これらの結果は、金基板上での反応が、溶液反応とは異なる反応性を示すことを示唆している。

6．キーワード

高次アセン グラフェンナノリボン 走査型トンネル顕微鏡 原子間力顕微鏡 金複合体 前駆体法 光反応

7．研究発表

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件／うち国際共著 1件／うちオープンアクセス 0件）

1．著者名 Jose I. Urgel, Marco Di Giovannantonio, Guido Gandus, Qiang Chen, Xunshan Liu, Hironobu Hayashi, Pascal Ruffieux, Silvio Decurtins, Akimitsu Narita, Daniele Passerone, Hiroko Yamada, Shi Xia Liu, Klaus Mullen, Carlo A. Pignedoli, Roman Fasel	4．巻 20
2．論文標題 Overcoming Steric Hindrance in Aryl Aryl Homocoupling via On Surface Copolymerization	5．発行年 2019年
3．雑誌名 ChemPhysChem	6．最初と最後の頁 2360～2366
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） doi.org/10.1002/cphc.201900283	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

2 版

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 7件 / うち国際学会 8件）

1. 発表者名 Hiroko Yamada
2. 発表標題 On-surface light-induced generation of higher acenes
3. 学会等名 ICMAT2019 10th International Conference on Materials for Advanced Technologies (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hironobu Hayashi, Hiroko Yamada
2. 発表標題 On-surface light-induced synthesis of higher acenes from alpha-diketone-type precursors
3. 学会等名 14th International Symposium on Functional pi-Electron Systems (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroko Yamada
2. 発表標題 On-Surface Synthesis of Large Acenes and Graphene Nanoribbons
3. 学会等名 11th Conference in CEMES, France (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroko Yamada
2. 発表標題 On-Surface Synthesis of Large Acenes and Graphene Nanoribbons
3. 学会等名 Conference in Strasbourg University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroko Yamada
2. 発表標題 On-Surface Synthesis of Large Acenes and Graphene Nanoribbons
3. 学会等名 Conference in Bordeaux University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroko Yamada
2. 発表標題 On-Surface Synthesis of Large Acenes and Graphene Nanoribbons
3. 学会等名 Conference in Renne University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hironobu Hayashi
2. 発表標題 On-surface synthesis of higher acenes by precursor approach
3. 学会等名 Lecture in BUCH (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroko Yamada
2. 発表標題 On-Surface Synthesis of Large Acenes and Graphene Nanoribbons
3. 学会等名 The 3rd Symposium for The Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

【研究代表者・所属研究機関控】

日本学術振興会に紙媒体で提出する必要はありません。

2 版

〔図書〕 計0件

8．研究成果による産業財産権の出願・取得状況

計0件（うち出願0件／うち取得0件）

9．科研費を使用して開催した国際研究集会

計0件

10．本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
スイス	EMPA	University of Bern	-	-
ドイツ	Max Plank Institue of Polymer Research	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-

11．備考

-