

# ホウ素を含む新しい二次元物質の創出と機能評価

近藤 剛弘

筑波大学数理物質系物質工学域およびエネルギー物質科学研究センター

## 1. はじめに

ホウ素を構成元素に含む二次元物質は様々な安定構造（多形）を示すことが知られている。このため応用に向けて扱いにくいという見方ができる一方で、多くの異なる物性発現の可能性のある魅力的な材料という見方もできる。これまでに理論計算を基にして、ホウ素のみの二次元物質（ポロフェン）、水素化物（ポロファン）、硫化ホウ素、酸化ホウ素、リン化ホウ素などが全て多形を示すことが報告されている<sup>1,2)</sup>。我々はこれらのうちポロファン的一种であるホウ化水素シート<sup>3)</sup>と硫化ホウ素シート<sup>4)</sup>を創出させ、特性を調べてきた。本セミナーでは、これまでの成果と進展を報告する。

## 2. ホウ化水素シート

我々は二ホウ化マグネシウムのマグネシウムイオンをプロトンと室温大気圧下でイオン交換することでホウ素と水素が 1 : 1 の比で構成されるホウ化水素シートを生成した<sup>3)</sup>。ホウ化水素はホウ素が負に、水素が正に帯電しており、X線二体分布関数解析と第一原理計算とX線光電子分光の測定結果より図1aに示す局所構造を持つことが示されている<sup>3)</sup>。その後の解析により、ホウ化水素シートは特異な還元剤機能<sup>5)</sup>、紫外線照射で水素放出する機能<sup>6)</sup>、高感度センサーの性質<sup>7)</sup>、優れた固体酸触媒機能<sup>8,9)</sup>、水に安定なこと<sup>10)</sup>、半金属であること<sup>11)</sup>が我々の実験による解析を中心として明らかとなっている。最近、商用白金触媒を凌駕する優れた酸素還元反応活性と耐久性を示す触媒合成材料として有効であることや<sup>12)</sup>、酸素生成反応に対する有効性<sup>13)</sup>も報告されている。理論計算ではNaやLiやKイオン電池の優れたアノード極材料となること<sup>14)</sup>、Liデコレートで高性能水素貯蔵材料となること<sup>17)</sup>、電流リミッターとなること<sup>18)</sup>、アミノ酸識別のセンサーとなること<sup>19)</sup>などが予想されている。さらに、5-7員環ホウ素ネットワークの水素化でトポロジカルノーダルライン物質が形成できるという理論予測<sup>20)</sup>やその実験的実証<sup>21)</sup>、新しいボトムアップホウ化水素合成経路の理論的提案<sup>22)</sup>がなされている。

## 3. 硫化ホウ素シート

硫化ホウ素シートの結晶構造を図1bに示す。理論

研究では超伝導<sup>23)</sup>や、高い熱電性能<sup>24)</sup>や高い水素貯蔵特性<sup>25)</sup>を持つ可能性があるとして予測されている材料である。我々は高压合成法で合成した菱面体硫化ホウ素を剥離することで生成に成功した<sup>4)</sup>。層数の違いでバンドギャップが異なる性質などの詳細を報告する。

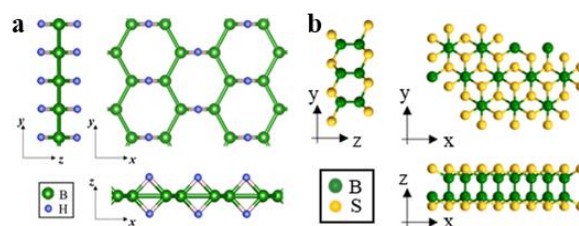


図1 ホウ化水素シート (a) と硫化ホウ素シート (b)

## References

- 1) T. Kondo: Sci. Technol. Adv. Mater., **18**, 780 (2017).
- 2) T. Kondo, I. Matsuda: “2D Boron: Boraphene, Borophene, Boronene”, Springer, Cham, 89 (2021).
- 3) H. Nishino, et al.: J. Am. Chem. Soc., **139**, 13761 (2017).
- 4) H. Kusaka, et al.: submitted.
- 5) S. Ito, et al.: Chem. Lett., **49**, 789 (2020).
- 6) R. Kawamura, et al.: Nat. Commun., **10**, 4880 (2019).
- 7) S. Tominaka, et al.: Chem, **6**, 406 (2020).
- 8) A. Fujino, et al.: ACS Omega, **4**, 14100 (2019).
- 9) A. Fujino, et al.: Phys. Chem. Chem. Phys., **23**, 7724 (2021).
- 10) K. I. M. Rojas, et al.: Commun Mater., **2**, 81 (2021).
- 11) I. Tateishi, et al.: Phys. Rev. Materials, **3**, 024004 (2019).
- 12) S. Gao, et al.: J. Mater. Chem. A, **8**, 18856 (2020).
- 13) A. Saad, et al.: Appl. Catal B, **298**, 120529 (2001).
- 14) M. Makaremi, et al.: Mater. Ene., **8**, 22 (2018).
- 15) V. Shukla, et al.: Phys. Chem. Chem. Phys., **20**, 22008 (2018).
- 16) P. Xiang, et al.: ACS Appl. Mater. Int., **11**, 8115 (2019).
- 17) L. Chen, et al.: Phys. Chem. Chem. Phys., **20**, 30304 (2018).
- 18) Y. An, et al.: Phys. Rev. Appl., **11**, 064031 (2019).
- 19) R. L. Kumawat, et al.: J. Phys. Chem. C, **124**, 27194 (2020).
- 20) N. T. Cuong, et al.: Phys. Rev. B, **101**, 195412 (2020).
- 21) M. Niibe, et al.: Phys. Rev. Materials, **5**, 084007 (2021).
- 22) J. O-Enrich, et al.: ChemPhysChem, **21**, 2460 (2020).
- 23) D. Fan, et al.: Appl. Phys. Lett., **117**, 013103 (2020).
- 24) P. Mishra, et al.: Sustain. Energy Fuels, **4**, 2363 (2020).
- 25) P. Mishra, et al.: Appl. Phys., **127**, 184305 (2020).