

6-4 物質分子科学研究領域

電子構造研究部門

西 信 之 (教授) (1998 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：クラスター化学，電子構造論，物理化学，ナノ構造体

A-2) 研究課題：

- a) 金属と炭素によるナノ構造体の創成とその機能発現（金属アセチリド化合物を用いた機能性物質の創成）
- b) 銅アセチリド系化合物の自己組織化を用いたナノ構造体の創成と機能材料化
- c) アセチリド錯体を用いた分子性磁性体・ナノ磁性体の開発
- d) 赤外光吸収解離分光法による金属イオン溶媒和クラスターの微視的相互作用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 金属アセチリドを用いて、芳香族 2 次元縮合シートであるグラフェンで出来たナノセル積層体を 1 段階の反応で合成する事は、基礎科学的にも応用の面に於いても極めて重要な課題であった。銀アセチリドを超音波を用いた合成法によって、外壁はグラフェン 2～3 層、内部の仕切りはグラフェン 1 層を主体とするメソ多孔性炭素ナノ樹状体 (MCND) を生成させることに成功したが、これは、BET 表面積が 1600～2000 m²/g、窒素ガスの分圧が 0.95 に於ける吸着量は 2,000 mL/g と極めて大きな値を示した。これは、1 nm 以下のミクロ孔もかなりの割合で含むものであるが、銀の代わりに銅、アセチレンの代わりにメチルアセチレンを用いて銅メチルアセチリドのワイヤー結晶を用いた、偏析反応を行わせると、メタン、エチレンのガスが発生し、更に高温で銅ナノ粒子が系外に飛び出し、5～20 nm の球状のメソポアを持つ厚さ 50 nm 程度の長さが 1 μm 以上の炭素ワイヤーあるいはプレートレットが得られることが判った。外壁は、2-10 層のグラフェンである。また、銅ナノ粒子をマイクロ波で励起すると、このグラフェン壁が平衡性が良くある角度で交差しあう平面部分の組み合わせで構成される特異な角形セル構造を生み出した。このセルの中に金属を液体状態にして吸い込ませると、グラフェン壁で仕切られたナノドメインを持つ新しい物質が出来上がる。特に、3d, 4d, 4f 軌道を持つ金属は、波動関数のしみ出しによるドメイン間の相互作用が大きくなり、電導性や磁性に特異な挙動の発現が期待される。
- b) 銅アセチリド分子は水溶液中の反応で、直径が 5 nm 程度、長さが 1 μm に及ぶナノワイヤー構造体へと自己組織化によって結晶成長させることができる。大気下の溶液反応で容易に、又、大量にナノ構造体を得ることができるため、その成長機構を解明し様々な化合物に適応することおよび自己組織化で得たナノ物質を材料科学へと展開することは大変重要である。本研究では、銅アセチリドの生成に関して置換基効果を調べるため、アセチレンガスではなく、メチル基がついたプロピンガスで反応を行った。走査型電子顕微鏡の観測より、銅メチルアセチリドも、銅アセチリドと同様にナノワイヤー構造へと自己組織化により結晶成長できることが判明した。アセチリド化合物が一般的にナノワイヤー構造へと自己組織化できる可能性がある。さらに、メチル基置換した場合は、通常のアセチレンガスを用いる場合よりもアモルファス状の副生成物が少なく、純度良くナノワイヤーが得られるため、材料化に対して適していることも判明した。現在、銅メチルアセチリドを真空中で加熱変換し、水素吸蔵関連の触媒としての性質を評価している。
- c) 遷移金属ニトリル錯体が分子性磁性体の構成要素として数多くの興味深い物質を生み出しているのに対し、等電子錯体である遷移金属アセチリド錯体はその不安定性のため磁性体としての研究はほとんど行われていない。しかし近年、大気中で

の安定な常磁性アセチリド錯体がいくつか開発され始めており、アセチリド系磁性体を開発するための環境が整いつつあると言える。そこで安定常磁性アセチリド錯体である $[\text{CrCyclam}(\text{C}\equiv\text{C}-\text{R})_2]^+$ を用いた物質開拓を行い、対アニオンとして平板状ジチオレート錯体 $[\text{Ni}(\text{mdt})_2]^-$ を組み合わせることで遷移金属アセチリド錯体からなる初の磁性体、 $[\text{CrCyclam}(\text{C}\equiv\text{C}-3\text{-thiophene})_2][\text{Ni}(\text{mdt})_2]$ および $[\text{CrCyclam}(\text{C}\equiv\text{C}-\text{Ph})_2][\text{Ni}(\text{mdt})_2](\text{H}_2\text{O})$ という二種類の物質を開発することに成功した。前者はスピン $S = 3/2$ のカチオンと $S = 1/2$ のアニオンが交互に積層し NaCl 的な構造をとっており、2.3 K に転移温度を持つフェリ磁性体であった。後者はカチオン - アニオンからなるフェリ鎖を基本構造とし、鎖間ではフェリ鎖同士でスピンを打ち消すような分子間配置を取っている。このため結晶全体では反強磁性となることが予想されるが、実は結晶中に取り込まれた水分子が局所的な対称性を破ることにより Dzyaloshinsky - 守谷相互作用が生じ、スピンのわずかに傾くことで自発磁化を生じる弱強磁性体となっていることを発見した。

- d) 金属原子イオンを分子で取り囲んだ溶媒和クラスターは、溶媒中の金属イオンの挙動を調べる溶媒和モデルとして、極めて基礎的な化学の研究対象である。同じ価電子数をとる銅正イオン原子と銀正イオン原子に対してアンモニア分子が配位したときの幾何構造を赤外レーザー光照射による気相中での解離実験と密度汎関数法や摂動論による分子軌道計算から明らかにした。アンモニア分子が4個から9個配位したクラスターでは、銅イオンでは2個のアンモニアが直接結合し、残りのアンモニアがその周りを取り囲んだ構造をとり、銀イオンでは4個のアンモニアが直接結合する。同じ価電子数にもかかわらず、第1溶媒和分子の数に明確な違いが観測された。イオン半径の差による立体的な構造のみで2個と4個という溶媒和分子の数の差を説明することができず、溶媒和する際の金属原子の s 軌道と d 軌道の混成エネルギーが幾何構造に影響を与えたと結論した。

B-1) 学術論文

S. NUMAO, K. JUDAI, J. NISHIJO and N. NISHI, "Synthesis and Characterization of Mesoporous Carbon Nano-Dendrites with Graphitic Ultra-Thin Walls and Their Application to Supercapacitor Electrodes," *Carbon* **47**, 306–312 (2009).

J. NISHIJO, S. NUMAO, K. JUDAI and N. NISHI, "Ferromagnetic Interaction Between $[\text{Ni}(\text{bdt})_2]^-$ Anions in $[\text{Mn}_2(\text{Saloph})_2(\mu\text{-OH})][\text{Ni}(\text{bdt})_2](\text{CH}_3\text{CN})_2$," *Polyhedron* **28**, 1664–1667 (2009).

S. TAKAYAMA, K. KAKURAI, M. TAKEDA, A. MATSUBARA, Y. NISHIHARA, J. NISHIJO, S. SANO, N. NISHI and M. SATO, "Investigation of Crystal Structure Formation under Microwave Heating," *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **600**, 246–249 (2009).

J. SASAKI, K. OHASHI, K. INOUE, T. IMAMURA, K. JUDAI, N. NISHI and H. SEKIYA, "Infrared Photodissociation Spectroscopy of $\text{V}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n = 2-8$): Coordinative Saturation of V^+ with Four H_2O Molecules," *Chem. Phys. Lett.* **474**, 36–40 (2009).

J. NISHIJO, K. JUDAI, S. NUMAO and N. NISHI, "Chromium Acetylide Complex Based Ferrimagnet and Weak Ferromagnet," *Inorg. Chem.* **48**, 9402–9408 (2009).

B-2) 総説，著書

西 信之，佃 達哉，斉藤真司，矢ヶ崎琢磨，「クラスターの科学——機能性ナノ構造体の創成——」米田出版 (2009). ISBN978-4-946553-38-7 C3043

B-4) 招待講演

西 信之,「金属アセチリド化合物を用いた新規ナノ構造体の創成とその物性」ナノ学会物性部会,神戸大学滝川記念館, 2009年1月.

西 信之,「分子を利用した近未来技術」岡崎商工会議所,岡崎, 2009年1月.

N. NISHI, “Functions and Structure of Graphene-Walled Mesoporous Carbon Nano Dendrite,” Okazaki Conference 2009
“From Aromatic Molecules to Graphene: Chemistry, Physics and Device Applications,” Okazaki Conference Center, Okazaki, February 2009.

B-5) 特許出願

特願 2009-109857,「非水電解液電池用負極及び非水電解液電池」山本康平,安達紀和,梅本久,山田 学,西 信之, 沼尾茂悟, 2009年.

B-6) 受賞,表彰

西 信之,井上學術賞 (1991).

西 信之,日本化学会學術賞 (1997).

西條純一,日本化学会優秀講演賞 (2007).

十代 健,ナノ学会第6回大会若手優秀発表賞 (2008).

沼尾茂悟,ナノ学会第6回大会若手優秀発表賞 (2008).

西條純一,分子科学会平成21年優秀講演賞 (2009).

B-7) 学会および社会的活動

文部科学省,学術振興会,大学共同利用機関等の委員等

九州大学理学部運営諮問委員 (2007.4–2010.3).

核融合科学研究所連携推進センター評価専門委員.

日本学術振興会特別研究員等審査会委員 (2008–2009).

日本学術振興会グローバルCOE プログラム委員会専門委員.

「元素戦略プロジェクト」における審査検討会委員 (2008–2009).

学会誌編集委員

Chemical Physics Letters, member of Advisory Board (2005–2009).

競争的資金等の領域長等

文部科学省 ナノテクノロジー支援プロジェクト「分子・物質総合設計支援・解析支援プロジェクト」総括責任者 (2002–2006).

その他

総合研究大学院大学物理科学研究科研究科長 (2004.4–2005.3).

B-10) 競争的資金

日本学術振興会科研費基盤研究(B),「金属アセチリド化合物を用いたナノ複合金属炭素構造体の創成と構造科学」西 信之 (2005年–2007年).

文部科学省科研費若手研究(B),「銅アセチリド分子の自己組織化を用いたナノワイヤー合成法の確立と応用展開」十代 健 (2005年–2007年).

日本学術振興会科研費基盤研究(B),「新規な金属原子単層担持グラファイト性多孔質ナノカーボンの創成」西 信之 (2008年–2010年).

文部科学省科研費若手研究(B),「アセチリド錯体を用いた分子性磁性体・ナノ磁性体の開発」西條純一 (2008年–2010年).

C) 研究活動の課題と展望

金属アセチリドの研究の中から,その大きな発熱性を利用して,金属を突沸によって系外に排出し,グラフェン壁で出来た炭素ナノ樹状構造体(MCND),及び,グラフェン多層膜で出来た10 nm前後の球状メソ孔集積体(Graphitic Alveolate Carbon: GAC)を作るという手法を開発した。これらは,ガス吸着体としてばかりでなく,全体が1体となっており,グラファイト構造に富むために,スーパーキャパシタや各種2次電池,燃料電池の電極として活用されることが期待される全く新しい炭素構造体である。このグラフェン壁で出来たナノセルの中で,金属ナノ粒子を小さな出入り口からは脱出出来なくなるまで成長させると,全てのナノ結晶表面を安定に露出させ,気相ガス分子や溶媒中のイオン種や反応性分子と相互作用出来るようになる。今後は,マイクロ波励起法の採用によって,メソ孔内容積の増大とグラフェン壁の平行性をより増加させ,金属ナノドメイン同士のグラフェン壁を通した相互作用の研究へと展開し,ナノドメインからなる新物質の開拓へと進めて行きたい。スーパークラスター研究の究極である,金属エチニル超超クラスター分子の研究も,芳香属分子の無限スタック構造が実現しているために様々なモディフィケーションによって電子構造的にも興味深い分子系が構築できそうである。特に,電導性や磁性に焦点を当てて,この分子から生成する金属ナノ粒子配列系の研究を進めて行きたい。

横 山 利 彦 (教授) (2002 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：表面磁性，X線分光学，磁気光学

A-2) 研究課題：

- a) X線磁気円二色性・磁気光学 Kerr 効果などの分光学的手法を用いた磁性薄膜の表面磁性
- b) 一光子・二光子紫外光電子磁気円二色性および光電子顕微鏡法の方法論開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 磁性薄膜は垂直磁化や巨大磁気抵抗などの興味深い磁気特性を示し，基礎科学的にも応用的な見地からも広く研究が行われている。当研究室では，実験室で簡便に行える磁気光学 Kerr 効果 (MOKE) 法に加え，UVSOR-II BL4B を用いた高磁場極低温 X線磁気円二色性法 (XMCD) を用いて，様々な磁性薄膜の磁気特性検討を行ってきた。今年度は，表面化学処理により不活性化した Si(111) 表面上に成長させた強磁性 Fe 薄膜の STM, MOKE, XMCD による構造や磁気特性評価など共同研究も含めて多彩に検討を進めた。
- b) 2006 年に我々が発見した，光エネルギーを仕事関数しきい値付近に合わせることで紫外磁気円二色性感度が 10% [試料は 12 原子層 Ni/Cu(001) 垂直磁化膜] にも達するという現象に基づいて，紫外磁気円二色性光電子顕微鏡を開発してきた。今年度はこの増大効果の生じる原因を角度分解光電子分光法により解明した。

B-1) 学術論文

T. NAKAGAWA, I. YAMAMOTO, Y. TAKAGI, K. WATANABE, Y. MATSUMOTO and T. YOKOYAMA, “Two-Photon Photoemission Magnetic Circular Dichroism and Its Energy Dependence,” *Phys. Rev. B* **79**, 172404 (4 pages) (2009).

T. NAKAGAWA, K. WATANABE, Y. MATSUMOTO and T. YOKOYAMA, “Magnetic Circular Dichroism Photoemission Electron Microscopy Using Laser and Threshold Photoemission,” *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 314010 (2009).

X. -D. MA, D. I. BAZHANOV, O. FRUCHART, F. YILDIZ, T. YOKOYAMA, M. PRZYBYLSKI, V. S. STEPANYUK, W. HERGERT and J. KIRSCHNER, “Strain Relief Guided Novel Growth of Atomic Nanowires in Cu₃N-Cu(110) Molecular Network,” *Phys. Rev. Lett.* **102**, 205503 (2009).

Y. MATSUMOTO, S. SAKAI, Y. TAKAGI, T. NAKAGAWA, T. YOKOYAMA, T. SHIMADA, S. MITANI and K. TAKANASHI, “X-Ray Absorption Spectroscopy and Magnetic Circular Dichroism in Codeposited C₆₀-Co Films with Giant Tunnel Magnetoresistance,” *Chem. Phys. Lett.* **470**, 244–248 (2009).

H. IRIE, K. KAMIYA, T. SHIBANUMA, S. MIURA, D. TRYK, T. YOKOYAMA and K. HASHIMOTO, “Visible Light-Sensitive Cu(II)-Grafted TiO₂ Photocatalysts: Activities and XAFS Analyses,” *J. Phys. Chem. C* **113**, 10761–10766 (2009).

M. INAGAWA, H. YOSHIKAWA, T. YOKOYAMA and K. AWAGA, “Electrochemical Structural Transformation and Reversible Doping/Dedoping of Lithium Phthalocyanine Thin Films,” *Chem. Commun.* 3389–3991 (2009).

Y. TAKAGI, K. TOMATSU, K. NAKATSUJI and F. KOMORI, “Multiple Electronic Excitation Using Scanning Tunneling Microscopy on Ge(001),” *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 063601 (4 pages) (2009).

B-3) 総説, 著書

中川剛志, 横山利彦, 「レーザー光電子磁気円二色性顕微鏡」, *表面科学* **30**, 332–338 (2009).

中川剛志, 横山利彦, 「レーザー励起光電子による磁気円二色性」, *真空* **52**, 589–594 (2009).

横山利彦, 「新しい原理・現象に基づく最先端表面磁性計測法(磁性特集号巻頭言)」, *表面科学* **30**, 311 (2009).

中辻 寛, 高木康多, 吉本芳英, 関場大一郎, 飯盛拓嗣, 小森文夫, 「窒素吸着 Cu(001) 表面に形成されたナノサイズ Co 島の電子状態」, *表面科学* **30**, 524–531 (2009).

B-4) 招待講演

T. NAKAGAWA, “Magnetic Circular Dichroism Using Laser Photoemission and Its Application to Photoemission Electron Microscope,” 7th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices (ALC’09), Hawaii (U.S.A.), December 2009.

T. NAKAGAWA, “Threshold Photoemission Magnetic Circular Dichroism in Magnetic Thin Films,” 11-th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (ICESS-11), Nara (Japan), October 2009.

横山利彦, 「中部地区ナノテクノロジー総合支援の概要と成果(基調講演)」, 平成20年度文部科学省ナノテクノロジー・ネットワーク/重点ナノテクノロジー支援放射光利用研究成果報告会『ナノテクノロジー放射光利用研究の最前線2008』, つくば, 2009年5月.

T. YOKOYAMA, “Novel magnetic nanoscope based on ultraviolet magnetic circular dichroism photoelectron emission microscopy,” Okazaki Conference 2009 “From Aromatic Molecules to Graphene: Chemistry, Physics and Device Applications,” Okazaki (Japan), February 2009.

T. YOKOYAMA, T. NAKAGAWA, Y. TAKAGI and I. YAMAMOTO, “Surface and Thin Film Magnetism Studied by Magnetic Circular Dichroism,” Japan-Korea Symposium on Molecular Science 2009 “Chemical Dynamics in Materials and Biological Molecular Sciences,” Awajishima Island (Japan), July 2009.

B-6) 受賞, 表彰

中川剛志, 日本表面科学会第3回若手研究者部門講演奨励賞 (2006).

高木康多, 日本物理学会第2回若手奨励賞受賞 (2008).

中川剛志, 日本物理学会第4回若手奨励賞 (2010).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

Executive Committee member of the International X-ray Absorption Society (2003.7–2009.8).

日本化学会関東支部幹事 (1999–2001).

日本XAFS研究会幹事 (2001–2007).

日本放射光学会評議員 (2004–2005, 2008–).

日本放射光学会編集幹事 (2005–2006).

学会の組織委員等

第11回X線吸収微細構造国際会議プログラム委員 (2000).

XAFS 討論会プログラム委員 (1998–2009).

日本放射光学会年会組織委員, プログラム委員 (2005).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2004–2005).

日本学術振興会科学研究補助金学術創成研究費評価委員 (2008).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員会実験課題審査部会委員 (2003–), 同
化学材料分科会委員長 (2005–2009).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2000–2002, 2004–2006).

日本放射光学会誌編集委員長 (2005–2006).

競争的資金等の領域長等

科学研究費補助金特定領域研究「分子スピン」総括班事務局 (2003–2006).

その他

文部科学省先端研究施設共用イノベーション創出事業 ナノテクノロジーネットワーク「中部地区ナノテク総合支援: ナノ
材料創製加工と先端機器分析」拠点長 (2007–2011).

B-8) 大学での講義, 客員

理化学研究所播磨研究所(RIKEN/SPring-8) 協力研究員, 2007 年 9 月–. (高木康多)

B-10) 競争的資金

日本学術振興会科研費萌芽研究, 「レーザー誘起磁気円二色性 STM の開発」横山利彦 (2008 年–2009 年).

日本学術振興会科研費基盤研究(A), 「フェムト秒時間分解紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の開発」横山利彦 (2007 年–
2009 年).

文部科学省科研費若手研究(A), 「磁性薄膜でのレーザー光電子による偏光可変・多光子磁気二色性と光電子顕微鏡の研究」中川剛志 (2007 年–2009 年).

文部科学省科研費若手研究(B), 「半導体表面のドーパントの元素識別——放射光 STM を用いて——」高木康多 (2007 年–
2009 年).

文部科学省科研費若手研究(B), 「レーザー誘起磁気円二色性光電子放出を利用した磁気走査トンネル顕微鏡の開発」中川
剛志 (2003 年–2006 年).

文部科学省科研費特定領域計画研究, 「ナノスケール薄膜・ワイヤ・クラスターの表面化学的磁化制御と評価」横山利彦
(2003 年–2006 年).

住友財団基礎科学研究費, 「レーザー誘起磁気円二色性光電子放出を利用した磁気走査トンネル顕微鏡」中川剛志 (2005 年).

日本学術振興会科研費基盤研究(A)(2), 「表面磁気第二高調波発生法による磁性ナノ薄膜・ナノワイヤの表面化学的磁化制
御の検討」横山利彦 (2003 年–2005 年).

文部省科研費基盤研究(B)(2), 「エネルギー分散型表面 XAFS 測定法の開発」横山利彦 (1999 年–2001 年).

文部省科研費基盤研究(C)(2), 「バルク及び表面融解のミクロスコピックな検討」横山利彦 (1997 年–1998 年).

B-11) 産学連携

共同研究, 富士フイルム株式会社, 「無機機能性材料の固体構造解析」横山利彦 (2009 年).

C) 研究活動の課題と展望

2002 年 1 月着任以降, 磁性薄膜の表面分子科学的制御と新しい磁気光学分光法の開発を主テーマとして研究グループをスタートさせた。磁性薄膜・ナノワイヤ・ナノドットの磁気的性質, および分子吸着などの表面化学的な処理による新しい現象の発見とその起源の解明などを目指し, 超高真空表面磁気光学 Kerr 効果法, 高磁場 (7 T) 極低温 (5 K) X 線磁気円二色性法 (UVSOR 利用), 磁気的第二高調波発生法 (フェムト秒 Ti:Sapphire レーザー使用), 極低温超高真空走査トンネル顕微鏡などの手法を展開している。また, 紫外光励起光電子放出による磁気円二色性が仕事関数しきい値近傍で極端に増大する現象を発見し, 紫外磁気円二色性光電子顕微鏡を世界に先駆けて開発し, さらにこれまで全く研究されていなかった二光子光電子磁気円二色性法の初観測に成功し, 極めて有効な手法として今後の発展が期待できることが示せた。今後は磁気円二色性だけでなく, 自然円二色性光電子分光・光電子顕微鏡に視点を向けて研究を進めたい。

唯 美津木 (准教授) (2008 年 10 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：触媒化学，物理化学，錯体化学

A-2) 研究課題：

- a) 金属錯体の固定化による高活性触媒表面の構築
- b) 新規レニウム系触媒の開発とベンゼン / 酸素からのフェノール直接合成
- c) 酵素インスパイアードモレキュラーインプリンティング表面の設計と触媒反応制御
- d) 燃料電池電極触媒の作動条件下における in-situ 構造解析
- e) In-situ 時間分解 XAFS，ラマン分光法による触媒反応過程の動的構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) Ir や Mn，Ru などの単核および複核金属錯体を酸化物表面に固定化し，表面で選択的に触媒活性構造へと変換することで，各種選択酸化反応や水素化反応に高い活性を有する新しい固定化金属錯体触媒を創出した。FT-IR，固体 NMR，XPS，UV/vis，ラマン分光，XAFS 等の構造解析法により，合成各段階における表面構造と表面での触媒反応機構を明らかにした。
- b) HZSM-5 ゼオライト担持 Re 触媒に Pt を添加することにより，ベンゼンと酸素からのフェノール直接合成に世界最高の触媒性能を示す Re-Pt 触媒を開発した。フェノール直接合成反応における速度論解析，触媒活性種の構造解析を行った。
- c) 表面の固定化金属錯体の配位子を鏑型分子とした表面モレキュラーインプリンティング法を発展させ，反応分子の配向性を規定する場を有する新しいモレキュラーインプリンティング Ru 触媒を設計した。不斉水素化反応やエポキシ化反応に非常に優れた位置選択性，形状選択性を発現させることに成功した。
- d) 燃料電池作動条件下における in-situ XAFS 測定のための蛍光 XAFS 測定セルを開発し，Pt 及び Pt 系合金ナノ粒子燃料電池電極実触媒の燃料電池作動条件下における in-situ XAFS 測定を実現した。次世代の燃料電池触媒開発に必要な触媒性能向上や触媒劣化に対する構造情報を得た。
- e) In-situ 時間分解 XAFS 法，ラマン分光法を駆使し，担持 V 触媒上でのアルコール選択酸化反応，担持 Ni 触媒上でのメタンスチームリフォーミング反応における触媒活性構造の変化をリアルタイム測定し，触媒活性構造の構造速度論を明らかにした。

B-1) 学術論文

K. MOTOKURA, M. TADA and Y. IWASAWA, "Layered Materials with Coexisting Acidic and Basic Sites for Catalytic One-Pot Reaction Sequences," *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 7944–7945 (2009).

H. ARIGA, T. TANIKE, H. MORIKAWA, M. TADA, B. K. MIN, K. WATANABE, Y. MATSUMOTO, S. IKEDA, K. SAIKI and Y. IWASAWA, "Surface-Mediated Visible-Light Photo-Oxidation on Pure TiO₂(001)," *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 14670–14672 (2009).

K. MOTOKURA, M. TOMITA, M. TADA and Y. IWASAWA, "Michael Reactions Catalyzed by Basic Alkylamines and Dialkylaminopyridine Immobilized on Acidic Silica-Alumina Surfaces," *Top. Catal.* **52**, 579–585 (2009).

T. SASAKI, M. TADA and Y. IWASAWA, “Density Functional Theory Study on the Re Cluster/HZSM-5 Catalysis for Direct Phenol Synthesis from Benzene and Molecular Oxygen: Active Re Structure and Reaction Mechanism,” *Top. Catal.* **52**, 880–887 (2009).

K. MOTOKURA, M. TADA and Y. IWASAWA, “Organofunctionalized Catalyst Surfaces Highly Active and Selective for Carbon–Carbon Bond-Forming Reactions,” *Catal. Today* **147**, 203–210 (2009).

K. MOTOKURA, S. TANAKA, M. TADA and Y. IWASAWA, “Bifunctional Heterogeneous Catalysis of Silica-Alumina-Supported Tertiary Amines with Controlled Acid-Base Interactions for Efficient 1,4-Addition Reactions,” *Chem. –Eur. J.* **15**, 10871–10879 (2009).

B. -H. ZHU, Y. SHIBATA, S. MURATSUGU, Y. YAMANOI and H. NISHIHARA, “A Novel Cyclic Hexanuclear Heterometalladithiolene Cluster with Two π -Conjugated $S_2C_6S_2$ Bridges, $[\{(Cp^*Rh)_2Mo(\mu-CO)_2(CO)\}_2(S_2C_6H_2S_2)_2]$ ($Cp^* = \eta^5-C_5Me_5$): Synthesis, Crystal Structure, and Properties,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **48**, 3858–3861 (2009).

Y. NISHIMORI, K. KANAIZUKA, T. KURITA, T. NAGATSU, Y. SEGAWA, F. TOSHIMITSU, S. MURATSUGU, M. UTSUNO, S. KUME, M. MURATA and H. NISHIHARA, “Superior Electron-Transport Ability of π -Conjugated Redox Molecular Wires Prepared by the Stepwise Coordination Method on a Surface,” *Chem. –Asian J.* **4**, 1361–1367 (2009).

B-3) 総説，著書

唯美津木，「時間分解 XAFS 法による触媒表面の動的構造解析と触媒構造速度論」*表面科学* **30**, 75–83 (2009).

唯美津木，「In-situ 時間分解 XAFS 法を駆使した触媒化学の革新」*放射光* **22**, 106–109 (2009).

唯美津木，岩澤康裕，「担持 Re 触媒を用いたベンゼンと酸素からのフェノール直接合成反応」*有機合成化学会誌* **67**, 643–650 (2009).

唯美津木，岩澤康裕，「触媒表面のナノファブリケーション」*第3版現代界面コロイド化学の基礎* **185–192** (2009).

唯美津木，岩澤康裕，「X線吸収微細構造」*第3版現代界面コロイド化学の基礎* **413–417** (2009).

M. TADA and Y. IWASAWA, “Active Ensemble Structures for Selective Oxidation Catalyses at Surfaces,” in *Modern Heterogeneous Oxidation Catalysis*, N. MIZUNO, Ed., 43–76 (2009).

M. TADA and Y. IWASAWA, “Advanced Design of Catalyst Surfaces with Metal Complexes for Selective Catalysis,” in *Modern Surface Organometallic Chemistry Vol. 2*, J. M. BASSET, R. PSARO, D. ROBERTO and R. UGO, Eds., 375–415 (2009).

唯美津木，「多穴性触媒」*配位空間の化学——最新技術と応用——* **206–213** (2009).

唯美津木，岩澤康裕，「表面での触媒設計」*超分子金属錯体* **392–409** (2009).

Y. UEMURA, T. TANIKE, T. SASAKI, M. TADA and Y. IWASAWA, “The Genesis and Principle of Catalysis at Oxide Surfaces: Surface-Mediated Dynamic Aspects of Catalytic Dehydration and Dehydrogenation on $TiO_2(110)$ by STM and DFT,” in *Molecular Nano Dynamics Vol. 2*, H. FUKUYAMA, M. IRIE, Y. IWASAWA, H. MASUHARA and K. UOSAKI, Eds., 317–335 (2009).

唯美津木，「触媒システム」*ナノ空間材料の創製と応用展開* **215–223** (2009).

B-4) 招待講演

唯美津木, 「In-situ 時間分解 XAFS 法を駆使した触媒化学の革新」第22回日本放射光学会, 東京, 2009年1月.

唯美津木, 「担持 Re 触媒を用いたベンゼン直接酸化によるフェノール一段合成」触媒学会高難度選択酸化反応研究会ワークショップ, 逗子, 2009年1月.

唯美津木, 「放射光を用いた触媒活性構造の時間分解解析」九州シンクロトン光研究センター研究成果報告会特別講演, 福岡, 2009年3月.

唯美津木, 「放射光を用いた触媒化学の発展」放射光連携研究ワークショップ——SPRING-8の光が拓く電荷・スピン秩序研究と新しい物質科学——, 東京, 2009年3月.

M. TADA, “Novel Molecularly-Organized Catalysts for Selective Oxidation and Reforming,” 237th ACS National Meeting, Salt Lake City (U.S.A.), March 2009.

唯美津木, 「表面上の触媒活性構造の解析法と機能創出」第89回日本化学会春季年会 ATP 講演, 千葉, 2009年3月.

M. TADA, “Direct Phenol Synthesis from Benzene and O₂ on Novel Re Catalysts with Tremendous Performances,” Asian International Symposium of Chemical Society of Japan, Chiba, March 2009.

唯美津木, 「学術から実用につながる新触媒の開発へ!!——触媒表面の分子レベル設計と実触媒の XAFS 解析——」化学技術戦略推進機構萌芽技術奨励講演会, 東京, 2009年4月.

唯美津木, 「表面を媒体とした高機能金属活性構造の創出と触媒反応機構のリアルタイム解析」大学婦人協会守田賞受賞講演, 東京, 2009年6月.

M. TADA, “Design of Molecular-Imprinted Metal-Complex Catalysts for Shape-Selective Catalysis,” Japan-Canada Coordination Space Symposium, Banff (Canada), July 2009.

M. TADA, “Advanced Catalyst Design and In-situ Time-resolved Characterization of Metal-Complex Catalysts at Surfaces,” Surface Science and Catalysis Seminar at University of California at Berkeley, Berkeley (U.S.A.), September 2009.

唯美津木, 「分子機能のリアルタイム構造解析」第59回錯体化学討論会「次世代のエレクトロニクスを拓く分子科学の最前線」長崎, 2009年9月.

唯美津木, 「In-situ 時分割 XAFS による触媒構造のリアルタイム解析」第38回未踏科学を拓る会, 東京, 2009年10月.

唯美津木, 「リアル系高活性触媒のダイナミック構造解析と触媒機能創出」東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻談話会「応用化学の新しい潮流」東京, 2009年10月.

唯美津木, 「人工酵素触媒表面を自在に設計する——モлекуラーインプリンティング触媒の展開——」化学技術戦略推進機構萌芽技術奨励講演会, 東京, 2009年11月.

M. TADA, “Advanced Design of Oxide-Supported Metal Complexes for Selective Catalysis,” The 2nd Asian Conference on Coordination Chemistry, Nanjing (China), November 2009.

B-5) 特許出願

特願 2009-55354, 「フェノール製造用触媒の製造方法および該触媒を用いたフェノールの製造方法」唯美津木, 岩澤康裕, 王林勝, 及川 隆(分子科学研究所, 東京大学, 三井化学(株)) 2009年.

B-6) 受賞，表彰

M. TADA, 3rd International Workshop on Oxide Surface Best Poster Award (2003).

M. TADA, 18th North American Catalysis Society Meeting Kokes Travel Award (2003).

唯美津木, 日本化学会学生講演賞 (2004).

M. TADA, 5th World Congress on Oxidation Catalysis Best Oral Presentation Award (2005).

唯美津木, 井上研究奨励賞 (2007).

M. TADA, PCCP Prize (2007).

唯美津木, 日本化学会優秀講演賞 (2007).

唯美津木, 東京大学グローバルCOE 若手海外レクチャーシップ賞 (2008).

唯美津木, 日本化学会進歩賞 (2008).

唯美津木, 東海化学工業会賞技術賞 (2008).

唯美津木, 日本放射光学会奨励賞 (2009).

唯美津木, 井上リサーチアワード (2009).

唯美津木, 化学技術戦略推進機構萌芽技術奨励 (2009).

唯美津木, 守田科学研究奨励賞 (2009).

S. MURATSUGU, 2nd Asian Conference on Coordination Chemistry *Dalton Transactions* Poster Prize (2009).

邨次 智, 井上研究奨励賞 (2009).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

触媒学会関東地区幹事 (2005).

触媒学会代議員 (2006).

触媒学会若手会代表幹事 (2006).

触媒学会有機金属研究会世話人 (2007–).

学会の組織委員等

International COE Symposium for Young Scientists on Frontiers of Molecular Science 組織委員会委員 (2006).

第22回日本放射光学会年会実行委員会委員 (2007–2008).

第89回日本化学会春季年会特別企画企画担当 (2008–2009).

B-8) 大学での講義，客員

京都大学大学院工学研究科, 「高機能触媒表面の分子レベル設計と構造解析(物質エネルギー化学特論第七)」, 2009年5月15日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「触媒・表面の電子化学(基礎電子化学)」, 2009年7月21日–23日.

B-10) 競争的資金

日本学術振興会科研費特別研究員奨励費, 「表面分子インプリンティング法による不斉金属錯体触媒の構築と不斉触媒作用」唯美津木 (2003年–2004年).

文部科学省科研費若手研究(B),「モレキュラーインプリンティングマンガン錯体触媒の表面設計と不斉光酸化反応の制御」唯美津木 (2005年–2006年).

文部科学省科研費特定領域研究「配位空間の化学」(公募研究)「固定化金属錯体の不斉自己組織化を利用した多機能不斉触媒空間の構築と触媒反応制御」唯美津木 (2006年–2007年).

文部科学省科研費特定領域研究「協奏機能触媒」(計画研究)「表面を媒体とする選択酸化触媒機能の創出と高度反応制御に関する研究」唯美津木 (2006年–2009年).

文部科学省科研費若手研究(A),「ベンゼン及び炭化水素類の高選択酸化反応を実現する担持レニウムクラスター触媒の開発」唯美津木 (2008年–2011年).

B-11) 産学連携

日産自動車(株)総合研究所,「XAFS法を用いた白金触媒表面の電子状態・構造解析」唯美津木 (2008年–2009年).

三井化学(株)触媒科学研究所,「炭化水素類の選択酸化触媒の開発研究」岩澤康裕, 唯美津木 (2006年–2010年).

(株)本田技研研究所四輪開発センター,「In-situ XAFS法を用いた燃料電池の構造解析研究」唯美津木 (2009年–2010年).

井上科学振興財団井上リサーチアワード,「分子認識能を組み込んだ表面モレキュラーインプリンティング固定化金属錯体触媒の設計による触媒反応の精密制御法の構築」唯美津木 (2009年–2010年).

化学技術戦略推進機構萌芽技術研究奨励金,「選択触媒機能創出を目指した表面を媒体とする高活性金属錯体の構築と反応機構解明」唯美津木 (2009年–2010年).

C) 研究活動の課題と展望

環境有害な副産物を作らず,目的の有用物質のみを効率良く合成できる固体触媒表面の分子レベル合理的設計は依然として確立されていない。金属錯体の表面固定化,孤立化,表面空間化学修飾,表面モレキュラーインプリンティング等の独自の触媒表面の分子レベル設計法を考案し,固体表面上に電子的,立体的に制御された新規触媒活性構造とその上の選択的触媒反応空間を同時構築する新しい触媒表面を設計している。各種選択酸化反応や有用物質のテイラーメイド合成等の触媒反応の選択制御を目指している。

また,硬X線を用いたin-situ時間分解XAFS,in-situ空間分解XAFS法の開発に取り組み,触媒反応が効率良く進行する場合(in-situ)で実高活性触媒の働き(時間情報)や空間的な情報を計測することにより,触媒表面の働きを理解することを目指している。

電子物性研究部門

薬 師 久 彌 (教授) (1988 年 5 月 16 日着任)

A-1) 専門領域：物性化学

A-2) 研究課題：

- a) 分子導体における電荷秩序相と隣接する電子相の研究
- b) 分子導体における電子強誘電性の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

電子間クーロン斥力エネルギーが電子の運動エネルギー利得を上回るとき電子は局在化する。分子導体の多くの物質では両エネルギーが拮抗する境界領域にあるために、電子の局在化に起因する金属・絶縁体転移が数多く観測されている。我々はこの境界領域に位置する物質の多彩な電子状態を主に振動分光法を用いて研究している。

- a) 昨年度より α -型の BEDT-TTF 塩の電子状態をバンド幅の狭い物質から広い物質まで系統的に調べる研究を開始した。今年度はバンド幅の著しく狭い α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂ の相転移の研究を行った。振動分光法、反射分光法、電気抵抗、磁化率の実験を通して、この物質の伝導電子が相転移温度以上でスモールポーラロンのような局在性の強い状態をとっており、ホッピング機構で移動しているが、相転移を境にウィグナー結晶化して電荷秩序状態を形成することを明らかにした。そして、この相転移機構が電荷の秩序・無秩序相転移的な機構でよく理解できることを明らかにした。また、遠赤外・近赤外領域の反射率を測定して運動エネルギーを見積もり、他の α -型の BEDT-TTF 塩と比較して、バンド幅が著しく狭いことを実験的に検証した。
- b) 電荷秩序相をもつ物質の中には反転対称性を失って自発分極を発生する強誘電性の物質がある。昨年度に自作した SHG 顕微鏡を用いて、 α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂ の SHG 信号を観測し、巨視的な自発分極が形成されることを確認した。今年度はアルゴンガスを圧力媒体とした低圧の顕微圧力セルを作成して、歪みのない状態で SHG マップを観測することに成功し、昨年度観測された不均一な強誘電相が結晶内歪みに由来することを明らかにした。この物質は α -(BEDT-TTF)₂I₃ に比べて相転移に伴う分子変位が小さいことが予想され、より理想に近い電子強誘電体である可能性が高い。

B-1) 学術論文

X. SHAO, P. Y. NAKAO, M. SAKATA, H. YAMACHI, Y. YOSHIDA, P. M. MAESATO, M. URUICHI, K. YAKUSHI, T. MURATA, A. OTSUKA, G. SAITO, S. KOSHIHARA and K. TANAKA, "Room Temperature First-Order Phase Transition in a Molecular Conductor (MeEDO-TTF)₂PF₆," *Chem. Mater.* **20**, 7551–7562 (2008).

Y. YUE, C. NAKANAO, K. YAMAMOTO, M. URUICHI, R. WOJCIECHOWSKI, M. INOKUCHI and K. YAKUSHI, "Charge Order–Disorder Phase Transition in α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂," *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 044701 (10 pages) (2009).

A. SHIMIZU, M. URUICHI, K. YAKUSHI, H. MATSUZAKI, H. OKAMOTO, M. NAKANO, Y. HIRAO, K. MATSUMOTO, H. KURATA and T. KUBO, "Resonance Balance Shift in Stacks of Delocalized Singlet Biradicals," *Angew. Chem., Int. Ed.* **48**, 5482–5486 (2009).

- N. MORINAKA, K. TAKABAYASHI, R. CHIBA, F. YOSHIKANE, S. NIIZEKI, M. TANAKA, K. YAKUSHI, M. KOEDA, M. HEDO, T. FUJIWARA, Y. UWATOKO, Y. NISHIO, K. KAJITA and H. MORI, “Superconductivity Competitive with Checkerboard-Type Charge Ordering in Organic Conductor β -(*meso*-DMBEDT-TTF)₂PF₆,” *Phys. Rev. B* **80**, 092508 (4 pages) (2009).
- Y. ETO, A. KAWAMOTO, N. MATSUNAGA, K. KUMAGAI, K. YAMAMOTO and K. YAKUSHI, “Evidence for an Exchange Interaction between Donor and Acceptor Layers in β' -(BEDT-TTF)(TCNQ),” *Phys. Rev. B* **80**, 174506 (2009).
- R. ŚWIETLIK, A. ŁAPIŃSKI, M. FOURMIGUÉ and K. YAKUSHI, “Flexibility of Paramagnetic (d¹) Organometallic Dithiolene Complex [Cp₂Mo(dmit)]⁺⁺ Studied by Raman Spectroscopy,” *J. Raman Spectrosc.* **40**, 2092–2098 (2009).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- Y. NAKANO, H. YAMUCHI, G. SAITO, M. URUICHI and K. YAKUSHI, “Anion Size and Isotope Effects in (EDO-TTF)₂XF₆,” *J. Phys.: Conf. Series* **148**, 012007 (4 pages) (2009).
- M. MAESATO, Y. NAKANO, X. SHAO, Y. YOSHIDA, H. YAMUCHI, G. SAITO, A. MOREAC, J. -C. AMELINE, E. COLLET, M. URUICHI and K. YAKUSHI, “Control of Metal–Insulator Transition in (EDO-TTF)₂SbF₆,” *J. Phys.: Conf. Series* **148**, 012004 (4 pages) (2009).
- H. NAKAYA, Y. TAKAHASHI, S. IWAI, K. YAMAMOTO, K. YAKUSHI and S. SAITO, “Ultrafast THz Response of Photo-Induced Insulator to Metal Transition in Charge Ordered Organic Conductor α -(BEDT-TTF)₂I₃,” *J. Phys.: Conf. Series* **148**, 012039 (4 pages) (2009).

B-3) 総説，著書

- 葉師久弥, 「赤外ラマン分光法で観た分子導体の電荷秩序状態」*表面* **47**, 45–56 (2009).
- 山本 薫, 「電子の結晶化で分極する強誘電体——その光学非線形性と超高速光応答」*固体物理* **44**, 117–125 (2009).

B-4) 招待講演

- 山本 薫, 「光学SHGによる α -(BEDT-TTF)₂I₃の強誘電分極観測」基礎科学研究所研究会「分子導体における質量ゼロのディラック粒子とその新展開」2009年7月.
- 山本 薫, 「SGH顕微鏡観測による α -(BEDT-TTF)₂I₃および α -(BEDT-TTF)₂IBr₂」分子研研究会「新規な誘電体最前線——電子と強誘電性——」2009年10月.
- 山本 薫, “Ferroelectric polarization in organic conductors generated by Wigner crystallization of electrons,”理研シンポジウム “Molecular Ensemble 2009,” 2009年12月.

B-6) 受賞，表彰

- 山本 薫, ISCOM2007 (International Symposium on Crystalline Organic Metals, superconductors, and ferromagnets) Poster Prize (2007).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会関東支部幹事 (1984–1985).

日本化学会東海支部常任幹事 (1993–1994, 1997–1998).

日本分光学会東海支部支部長 (1999–2000).

学会の組織委員等

第3, 4, 5, 6, 7, 8, 9回日中合同シンポジウム組織委員(第5回, 7回, 9回は日本側代表, 6回, 8回は組織委員長)(1989, 1992, 1995, 1998, 2001, 2004, 2007).

第5, 6, 7回日韓共同シンポジウム組織委員(第6回, 7回は日本側代表)(1993, 1995, 1997).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2000–2001).

科学研究費委員会専門委員 (2002–2006).

学会誌編集委員

日本化学会欧文誌編集委員 (1985–1986).

その他

新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)国際共同研究評価委員 (1990).

チバ・ガイギー科学振興財団 選考委員 (1993–1996).

東京大学物性研究所共同利用施設専門委員会委員 (1997–1998, 2001–2002, 2007–2008).

東京大学物性研究所物質設計評価施設運営委員会委員 (1998–1999).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学, 「アジア冬の学校」2009年12月3日.

B-9) 学位授与

Yue Yue, “Spectroscopic study of the charge-ordering phase transition of α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂ and α -(BEDT-TTF)₂I₃,” 2009年9月, 博士(理学)

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「金属フタロシアニンを中心とする π -d電子系の研究」薬師久弥 (1997年–2000年).

文部省科研費特定領域研究(B), 「 π -d および π 電子系分子導体の磁性・電気伝導性の研究」薬師久弥 (1999年–2001年).

科研費特別研究員奨励費, 「分子性導体における電荷整列現象のラマン分光法による研究」薬師久弥 (2001年–2002年).

科研費基盤研究(B), 「分子性導体における電荷整列現象の研究」薬師久弥 (2001年–2003年).

文部科学省科研費特定領域研究, 「分子導体における電荷の局在性と遍歴性の研究」薬師久弥 (2003年–2007年).

科研費特別研究員奨励費, 「電荷秩序する分子導体における光非線形現象の研究」薬師久弥 (2006年–2008年).

日本学術振興会科研費基盤研究(B), 「電荷秩序系を中心とする不均一な電子状態をもつ電荷移動塩の研究」薬師久弥 (2007年–2009年).

科研費奨励研究(A),「顕微赤外共鳴ラマン分光法による種々の分子配列様式をもつ有機伝導体の電荷状態観測」山本 薫 (2000年–2001年).

文部科学省科研費若手研究(B),「遠赤外反射スペクトルによる二次元電荷整列系の電子構造解」山本 薫 (2002年–2003年).

文部科学省科研費若手研究(B),「伝導性電荷移動錯体の電荷秩序相における非調和分子振動と非線形光学効果」山本 薫 (2005年–2006年).

科研費萌芽研究,「有機伝導体の電子強誘電転移における分域成長の観測と分域壁への光電荷注入」山本 薫 (2007年).

文部科学省科研費新学術領域研究,「分子自由度が拓く新物質科学」山本 薫 (2009年–2010年).

C) 研究活動の課題と展望

電荷秩序相に隣接する金属電子相で重要な課題は電荷密度ゆらぎと超伝導の関係である。対称性の高い θ -(BEDT-TTF)₂Xでは電荷秩序相で単位格子が2倍に拡大するために、金属相において電荷秩序相の構造子ゆらぎがX線散漫散乱で観測されている。 α -(BEDT-TTF)₂Xでは金属相ですでに格子が拡大しているために、構造ゆらぎをX線回折で観測することができず、ゆらぎを観測するのは困難である。しかし、分子の価数に応じて大きく振動数をシフトするC=C伸縮振動を用いれば、電荷秩序に伴う電荷密度ゆらぎを直接的に観測できると考えており、今後はよりバンド幅の広い α -型BEDT-TTF塩における電荷秩序ゆらぎと超伝導との関係を調べる方向へ向かいたい。また、金属相における電荷秩序ゆらぎは伝導電子のコヒーレントな運動を阻害するので、金属特有のドルーデ応答を過減衰状態へと導く可能性が高い。このような観点から、遠赤外領域のドルーデ応答と電荷秩序ゆらぎの関係を実験的に調べてゆくことを計画している。

電荷秩序相の電子状態で残された課題は強誘電相である。現在強誘電相の確定しているのは α -(BEDT-TTF)₂I₃, α -(BEDT-TTF)₂I₂Brと α' -(BEDT-TTF)₂I₂Br₂のみである。最後の物質は分子変位の小さい電子強誘電性を示すので、電場による分極反転の実験を試みる。また、化学圧や物理圧を用いて強誘電性の制御をおこない、分極相周辺の相図探索を行う。理想的な電子強誘電体は超高速の光応答や低い閾値電場による分極反転など応用面からの期待がもてる。この物質の巨視的な分極が発生する温度(約160 K)は電気抵抗に現れる相転移温度(約200 K)より40度近く低いなど不明な点があり、この物質についてはさらに基礎的な研究が必要である。

中 村 敏 和 (准教授) (1998 年 6 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：物性物理学，物質科学

A-2) 研究課題：

- a) 磁気共鳴法による有機導体・低次元スピン系の電子状態理解
- b) 固体広幅 NMR による超潤滑系の分子ダイナミクス
- c) パルスおよび高周波 ESR を用いたスピン科学研究の新しい展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機導体・低次元スピン系の特異な電子状態に興味を持ち，微視的な観点からその電子状態やスピン・電荷ダイナミクスを明らかにするため磁気共鳴測定を行っている。この系の競合電子相の起源に迫るために，4 GPa に迫る系統的な超高压力下の NMR 測定ならびに (TMTTF)₂TaF₆ 塩などの新規の塩を作成し，リエントラント反強磁性相や量子臨界点の是非，電荷秩序相と基底状態の相関について研究を行っている。この他，二次元電荷秩序系やディラック粒子系に対しても研究を行っている。
- b) 結晶性分子性固体のほかに，グラフェン / C₆₀ 単層膜 / グラフェン ... における C₆₀ の分子運動の研究を行っている。¹³C をエンリッチした C₆₀ 試料に対する ¹³C-NMR 測定から，10–200 K の温度領域では，スピン - 格子緩和率において化学シフトの異方性が支配的であり，C₆₀ の剛体回転運動が一軸回転運動を経ることなく 150 K 以下で凍結していることを明らかにしている。この回転凍結は，C₆₀ 単結晶試料のものより低温であり，回転凍結様式も異なっている。
- c) 分子研所有のパルスおよび高周波 ESR を用いて，高分解能 ESR・高エネルギー特性を利用した複雑なスピン構造の決定，多周波領域にわたるスピンドイナミクス計測といった種々な点から，スピン科学研究展開を行っている。本年度は Q-band の多重パルスシステムも導入される。今後さらに，当該グループだけでなく所外の ESR コミュニティーと連携を取り，パルス・高周波 ESR の新たな可能性や研究展開を議論し，大学共同利用機関である分子研からのスピン科学の情報発信を行っていく。

B-1) 学術論文

N. GUSKOS, H. OHTA, G. ZOLNIERKIEWICZ, S. OKUBO, W. ZHANG, J. TYPEK, C. RUDOWICZ, R. SZYMCZAK, M. BOSACKA and T. NAKAMURA, “Magnetic Interactions in Frustrated Mn₃Fe₄(VO₄)₆,” *J. Non-Crys. Solids* **355**, 1419–1426 (2009).

K. FURUKAWA, T. HARA and T. NAKAMURA, “Anomalous Temperature Dependence of *g*-Tensor in Organic Conductor, (TMTTF)₂X (X = Br, PF₆ and SbF₆),” *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 104713 (6 pages) (2009).

F. IWASE, K. SUGIURA, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, “Electronic Properties of a TMTTF-Family Salt, (TMTTF)₂TaF₆: New Member Located on the Modified Generalized Phase-Diagram,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 104717 (7 pages) (2009).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. NAKAMURA, F. IWASE, H. SATSUKAWA, K. FURUKAWA and T. TAKAHASHI, “¹³C NMR Investigation of Re-Entrant Antiferromagnetic States of (TMTTF)₂SbF₆,” *J. Phys.: Conf. Series* **150**, 042137 (4 pages) (2009).

S. OKUBO, H. YAMAMOTO, M. FUJISAWA, H. OHTA, T. NAKAMURA and H. KIKUCHII, “High Field ESR Measurements of Quantum Triple Chain System Cu₃(OH)₄SO₄,” *J. Phys.: Conf. Series* **150**, 042156 (4 pages) (2009).

T. TAKENO, K. KOBAYASHI, Y. NISHIO, K. KAJITA, H. MORI and T. NAKAMURA, “Mysterious Charge Ordering on θ -(BEDT-TTF)₂RbZn(SCN)₄,” *J. Phys.: Conf. Series* **150**, 042201 (4 pages) (2009).

B-3) 総説, 著書

中村敏和, 古川貢, 岩瀬文達, 「有機導体・分子性固体の多彩な競合電子相—多周波数・パルス磁気共鳴による物性研究—」, *まぐね* **4**, No. 5 224–228 (2009).

B-4) 招待講演

T. NAKAMURA, “Competed Electronic Phases in (TMTTF)₂X,” International Workshop Electron Magnetic Resonance of Strongly Correlated Spin Systems (EMRSCS2009), Takigawa Memorial Hall, Kobe University, Kobe (Japan), November 2009.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域7世話人 (2000–2001).

日本物理学会代議員 (2001–2003).

日本物理学会名古屋支部委員 (2001–2007).

日本化学会実験化学講座編集委員会委員 (2002).

電子スピンサイエンス学会担当理事 (2004–2006).

電子スピンサイエンス学会運営理事 (2006–).

Asia-Pacific EPR/ESR Society, Secretary/Treasure (2004–2008).

東京大学物性研究所物質合成・設備共同利用委員会委員 (2005–2007).

学会の組織委員等

Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, Novosibirsk, Russia, International Organizing Committee (2006).

分子構造総合討論会2006 (静岡) プログラム委員 (2006).

A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology (ISESS-SEST2007) Shizuoka, Japan Organizing Committee (2007).

Asia Pacific EPR Society—EPR Symposium 2008, Cairns, Queensland, Australia, International Advisory Committee (2008).

第3回分子科学討論会 2009 (名古屋) プログラム委員 (2009).

学会誌編集委員

電子スピンスサイエンス学会編集委員 (2003).

電子スピンスサイエンス学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンスサイエンス学会編集アドバイザー (2006–).

B-10) 競争的資金

日本学術振興会科研費基盤研究(B), 「低次元系の特異な電子相を利用したデバイス創製ならびにスピンダイナミックス研究」中村敏和 (2008年–2011年).

文部科学省科研費特定領域研究「100テスラ領域の強磁場スピン科学」(公募研究)「シアノバクテリア由来光化学II複合体の高磁場ESRによる研究」中村敏和 (2008年–2009年).

文部科学省科研費特定領域研究, 「分子導体における電荷の遍歴性と局在性の研究」代表者 葉師久弥(中村敏和は準代表者で実質独立) (2003年–2007年).

日本学術振興会科研費基盤研究(C)(2), 「一次元有機導体の逐次SDW転移における電子状態の解明」中村敏和 (2001年–2003年).

文部科学省科研費特定領域研究(B), 「NMRによる遍歴-局在複合スピン系の微視的研究: 新電子相の開拓」中村敏和 (1999年–2001年).

C) 研究活動の課題と展望

本グループでは, 分子性固体の電子状態(磁性, 導電性)を主に微視的な手法(ESR, NMR)により明らかにしている。有機導体に対して研究をもとに強相関低次元電子系の未解決な問題の解明を行うとともに, 新規な分子性物質の新しい電子相・新機能を探索している。また, 多周波(X-, Q-, W-bands)・パルスESRを用いた他に類を見ないESR分光測定を行い, 分子性導体など種々の機能性物質に対して電子状態やスピン構造に関する研究を行うと同時に, ESR測定を中心に多数の協力研究・共同研究を受け入れ, 最先端のESR測定研究の展開を全世界に発信している。今後は高圧下・極低温下といった極端条件での測定システム構築を行うとともに, 物質科学における磁気共鳴研究のあらたな展開を行っていく。

分子機能研究部門

江 東 林 (准教授) (2005 年 5 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：有機化学，高分子科学

A-2) 研究課題：

- a) π 電子系共役多核金属集積体の創製と電子機能の開拓
- b) π 電子系二次元シート状高分子の創製と機能開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 本研究では、 π 電子系で連結した新規な共役多核遷移金属錯体を設計し、 π - π 相互作用を活用することにより金属錯体の空間配置が精密に制御された集積体の構築に成功した。この場合、金属サイトは互いに共役しているため、分子内の磁氣的・電子的な相互作用に加え、集積化することにより、 π 共役系を介した長距離分子間相互作用が期待できる。二核金属錯体は軸比の極めて高いベルトを与えることを見いだした。この場合、反強磁性相互作用が観察され、二つの金属は互いに逆のスピンの向きを保つことが分かった。興味深いことに、ベルトは電子伝導とホール伝導を持ち合わせるという特異な伝導機能を示した (*Chem. Commun.* 2009)。これまでに、有機反強磁性半導体材料は有機半導体と磁性金属塩の共結晶のみに実現されている。興味深いことに、三核共役金属集積体は自己組織化により二次元シートをあたえ、極めて高いキャリア伝導を有することが分かった。二次元シートが光励起エネルギーを運搬でき、光伝導であることを見いだした。また、著しい伝導異方性を示すことを明らかにした (*J. Am. Chem. Soc.* 2009)。
- b) 共有結合性有機骨格はメゾやマイクロサイズの細孔を有する結晶性高分子である。重縮合反応により合成され、細孔サイズが骨格により一義的に規定されるため、ガス吸着・貯蔵のための多孔性物質として注目されている。これに対して、本研究では、共有結合性有機骨格が提供する規則正しい配列構造に着目し、 π 電子系シート状高分子を設計し、光、電子、ホールなどの相互作用を通じて、世界に先駆けて光・電子機能性共有結合性有機骨格構造の創出に成功した。上述の知見に基づき、『光伝導性シート状高分子の設計』に着目し、偶然にもシート状高分子が可視光を捕集し、光伝導を誘起することを見いだした。これは、光伝導性シート状高分子の誕生である。我々は、ピレン誘導体をモノマーとして用い、自己重縮合反応により、単一成分からなるシート状高分子を合成し、サイズの極めて均一なミクロンキューブを与えることを見いだした。単一 π 電子系成分のため、励起子はシート内、シート間を移動することが可能である。興味深いことに、シート状高分子は速やかに可視光に応答し、極めて大きな光電流を誘起するという現象を突き止めた。すなわち、シート状高分子は可視光を捕集するだけでなく、励起子を高速移動し、さらに、そのエネルギーを電気エネルギーに変換できるということを初めて実証した。シート状高分子の新しい機能として注目されている (*Angew. Chem., Int. Ed.* 2009)。

B-1) 学術論文

S. WAN, J. GUO, J. KIM, H. IHEE and D. JIANG, "A Photoconductive Covalent Organic Framework: Self-Condensed Arene Cubes with Eclipsed 2D Polypyrene Sheets for Photocurrent Generation," *Angew. Chem., Int. Ed.* **48**, 5439–5442 (2009).

L. CHEN, L. WANG, X. GAO, S. NAGASE, Y. HONSHO, A. SAEKI, S. SEKI and D. JIANG, "The Non-Covalent Assembly of Benzene-Bridged Metallosalphen Dimers: Photoconductive Tapes with Large Carrier Mobility and Spatially Distinctive Conduction Anisotropy," *Chem. Commun.* 3119–3121 (2009).

L. CHEN, J. KIM, T. ISHIZUKA, Y. HONSHO, A. SAEKI, S. SEKI, H. IHEE and D. JIANG, "Noncovalently Netted, Photoconductive Sheets with Extremely High Carrier Mobility and Conduction Anisotropy from Triphenylene-Fused Metal Trigon Conjugates," *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 7287–7292 (2009).

Y. ZHANG, Y. YU, Z. JIANG, H. XU, Z. WANG, X. ZHANG, M. ODA, T. ISHIZUKA, D. JIANG, L. CHI and H. FUCHS, "Single-Molecule Study on Intermolecular Interaction Between C₆₀ and Porphyrin Derivatives: Toward Understanding How Strong the Multivalency Is," *Langmuir* **25**, 6627–6632 (2009).

M. ODA, T. ISHIZUKA, S. ARAI, A. TAKANO and D. JIANG, "Highly Planar Amphiphilic Porphyrins," *Tetrahedron Lett.* **50**, 7137–7140 (2009).

B-4) 招待講演

D. JIANG, "Topological Design of Sheet-Shaped Macromolecules," China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Hokkaido, August 2009.

D. JIANG, "Design and Photofunctions of Two-Dimensional Macromolecules and Organic Frameworks," National Polymer Symposium of China, Tianjin (China), August 2009.

D. JIANG, "Molecular Design and Electronic Functions of Two-dimensional Macromolecules," International Conference on Organic Photonics and Electronics 2009 (ICOPE2009), The 11th International Conference on Organic Nonlinear Optics (ICONO11), Beijing (China), September 2009.

D. JIANG, "Design and Functions of Two-Dimensional Macromolecules," 5th IUPAC International Symposium on Novel Materials and Their Synthesis, Shanghai (China), October 2009.

B-6) 受賞，表彰

江 東林, 2000年度日本化学会年次大会講演賞 (2000).

江 東林, 2005年度日本化学会若手特別講演賞 (2005).

江 東林, 2006年度高分子学会 Wiley 賞 (2006).

江 東林, 2006年度科学技術分野文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2006).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第二回デンドリマー国際会議実行委員 (2000).

Winter School of JSPS Asian Core Program on Frontiers of Materials, Photo and Theoretical Molecular Science, Beijing, December 5–8, Organizer (2006).

China-Japan Joint Symposium on the π -Conjugated Molecules towards Functional Materials, Beijing, February 24–25, Organizer (2008).

Sokendai Asian Winter School “Molecular Sciences on Different Space-Time Scales,” Okazaki, December 9–12, Co-Organizer (2008).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Beijing, December 20–21, Organizer (2008).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Hokkaido, August 2–5, Organizer (2009).

Sokendai Asian Winter School “Molecular Sciences on Different Space-Time Scales,” Okazaki, December 2–5, Co-Organizer (2009).

B-10) 競争的資金

日本学術振興会科研費奨励研究, 「デンドリマー組織を用いた高反応性金属ポルフィリン錯体の空間的孤立化と新反応の開拓」江 東林 (1997年–1998年).

文部省科研費特定領域研究(A), 「デンドリマーで被覆した分子ワイヤーの合成と機能」江 東林 (1999年).

文部省科研費若手奨励研究(A), 「赤外線を用いた人工光合成系の構築」江 東林 (1999年–2000年).

科学技術振興機構さきがけ研究「構造制御と機能領域」 「樹木状金属集積体を用いたスピン空間の構築と機能開拓」江 東林 (2005年–2008年).

日本学術振興会科研費基盤研究(B), 「光・磁気スイッチング配位高分子の設計と機能」江 東林 (2008年–2010年).

科学技術振興機構さきがけ研究「太陽光と光電変換機能領域」 「シート状高分子を用いた光エネルギー変換材料の創製」江 東林 (2009年–2012年).

C) 研究活動の課題と展望

分子研に着任して5年目になりますが, 『ゼロ』からの設計と合成をもとに出発しました。芽が見えてきましたので, これから大きく育てていきます。

西 村 勝 之 (准教授) (2006 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：固体核磁気共鳴，構造生物学

A-2) 研究課題：

- a) 固体 NMR 研究のための自発磁場配向脂質膜試料調製法の開発
- b) 静止試料を対象とした新規固体 NMR 分極移動法の開発
- c) シフト補償 QCPMG 法の分子運動検出への適用
- d) 混合原子価モリブデン (V, VI) ポリ酸の固体 ^{95}Mo NMR
- e) 920MHz 超高磁場固体 NMR 用試料温度調節機能付き MAS プローブの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) バイセルは一般に飽和脂質からなり，含有脂質が液晶相となる温度域において静磁場下で円盤状の平面膜を形成して自発的磁場配向する。本研究では神経細胞等に存在するフォスファチジルイノシトール 4,5 ニリン酸を適切な割合で添加することにより，室温付近で自発磁場配向する既存のバイセル試料の安定温度範囲を 3 倍に増強し，かつ磁場配向能を著しく改善することを発見した。
- b) 配向試料を対象とした低発熱型新規異種核間分極移動法を開発した。本測定法では，比較的低出力のラジオ波を用いても，既存の測定法に対して， ^1H 核でのラジオ波の搬送周波数への依存性を著しく改善し，定量的な信号強度が得られる。本測定は 400MHz の NMR で行ったが，より高磁場の 920MHz NMR での適用が可能であることを，液晶試料を用いて実験的に検証した。
- c) 昨年度考案したシフト項がある場合の核スピン $I = 1$ 四極子核の固体 NMR 測定法について，分子運動検出に対する有用性を示した。通常のエコー法では検出が困難な速度領域について，本法の適用により運動速度を求めることを可能とした。
- d) 局在化または非局在化した d^1 電子を有する混合原子価モリブデン (V, VI) ポリ酸について，固体高分解能 ^{95}Mo NMR の測定を行った。 Mo^{V} や $\text{Mo}^{\text{V,VI}}$ のサイトの化学シフトは極めて大きく， ^{95}Mo は Mo^{V} を含む固体ポリ酸の分子や電子の構造を調べる良いプローブとなることが分かった。
- e) 共同利用に供する試料温度調節が可能な 920MHz 超高磁場固体 NMR 用の MAS プローブの開発を昨年度から日本電子社と共同で行っている。既存の 920MHz 用 MAS プローブのベアリングガスのラインに真空ガラス二重管デュアーを導入して断熱し，ベアリングガスをデュアー内部に設置したヒーターの発熱調節により試料温度を調節する方式を用いた。初期型ではデュアー接合部に強度不足が判明したため，デザインの変更を行った。分子研側で設計変更を行った箇所は十分な断熱性能を達成している。現在最終調整を行っており，本年度中の完成，および来年度からの運用を目指している。

B-1) 学術論文

N. UEKAMA, T. AOKI, T. MARUOKA, S. KURISU, A. HATAKEYAMA, S. YAMAGUCHI, M. OKADA, H. YAGISAWA, K. NISHIMURA and S. TUZI, "Influence of Membrane Curvature on the Structure of the Membrane-Associated Pleckstrin Homology Domain of Phospholipase C- $\delta 1$," *Biochim. Biophys. Acta, Biomembr.* **1788**, 2575–2583 (2009).

B-4) 招待講演

西村勝之,「膜表在性タンパク質構造解析を目指した固体 NMR 測定法開発」よこはま NMR 構造生物学研究会第36回ワークショップ「生体系固体 NMR の基礎から応用への展開」理化学研究所, 鶴見, 2009年 3月.

B-5) 特許出願

特願 2009-245245,「リン脂質混合物及びバイセル」西村勝之, 上釜奈緒子, 2009年.

B-6) 受賞, 表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会 若手ポスター賞 (2002).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会分分野別専門委員 (2004-).

日本核磁気共鳴学会評議員 (2009-).

日本核磁気共鳴学会選挙管理委員 (2005).

学会誌編集委員

日本生物物理学会欧文誌 *Biophysics*, Advisory board (2005-).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 講義「機能構造化学」2009年.

B-10) 競争的資金

日本学術振興会科研費萌芽研究,「試料状態変調型固体 NMR プローブ開発とその適用」西村勝之 (2008年-2009年).

文部科学省科研費若手研究(B),「揺動磁場下の固体高分解能 NMR——二次元展開と高速化——」飯島隆広 (2008年-2009年).

文部科学省科研費若手研究(B),「新規な多量子コヒーレンス生成法に基づく固体高分解能 NMR」飯島隆広 (2006年-2007年).

(財)新世代研究所研究助成,「生体含水試料のための低発熱型新規固体 NMR ナノ構造解析法開発」西村勝之 (2005年).

文部科学省科研費若手研究(B),「脂質膜結合生理活性ペプチド立体構造解析のための低発熱型固体 NMR 測定法開発と適用」西村勝之 (2004年-2005年).

文部科学省科研費若手研究(B),「固体高分解能 NMR 新規手法の開発と生理活性ペプチドの膜結合構造の決定への適用」西村勝之 (2002年-2003年).

C) 研究活動の課題と展望

本年開発に成功した, 室温で自発磁場配向する新規脂質膜試料バイセルを有効活用し, 膜表在性タンパク質の構造解析を本格的に開始すると共に, それに必要な一連の新規測定法を開発し, グループ内で開発した測定法のみで一連の研究が完了するように体系的に完成させたいと考えている。

ナノ分子科学研究部門（分子スケールナノサイエンスセンター）

平 本 昌 宏（教授）（2008年4月1日着任）

A-1) 専門領域：有機半導体，有機太陽電池，有機エレクトロニクスデバイス

A-2) 研究課題：

- a) 超高純度化有機半導体を用いた有機薄膜太陽電池
- b) p-i-n 有機太陽電池の共蒸着 i 層ナノ構造の設計
- c) 有機半導体の pn 制御

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機半導体もシリコンと同じ半導体であるので，その真の性質，機能を見いだして実用デバイスに利用するには，精製によって，シリコンと言われるイレブンナイン（11N）並みに，超高純度化する技術が欠かせない。我々のグループでは，純度セブンナイン（99.99999%，7N）以上の C_{60} や H_2Pc （無金属フタロシアニン）のサイズ 2 cm に達する単結晶の作製に成功した。これらの 7N 有機半導体を用いて有機 p-i-n 接合セルを作製すると，共蒸着 i 層をこれまでに例のない 1 ミクロンという厚膜にでき，シリコン太陽電池とほぼ同等の， 20 mA/cm^2 近い短絡光電流（ J_{sc} ），低分子系シングルセルで世界最高の変換効率 5.3% を達成した。

上記の高純度化技術を用いて，近赤外に感度を有する有機薄膜太陽電池を作製した。シリコン太陽電池は 1100 nm までの近赤外まで感度を持っているが，有機太陽電池は，これまで 700 nm までの可視域にしか感度を持っていなかった。今回，我々のグループでは，鉛フタロシアニンと C_{60} の共蒸着による活性層によって，700 nm から 1000 nm の近赤外域に感度を持つ有機太陽電池を初めて作製することに成功した。

有機半導体の組み合わせを変えることで，セルの開放端電圧（ V_{oc} ）を増大させることが可能である。アクセプターとして働く C_{60} に組み合わせるドナーとして，上述の H_2Pc の代わりに，ポルフィリン，チオフェンオリゴマーを検討し， H_2Pc が示す 0.4 V の倍の 0.8 V の V_{oc} を観測している。現在，共蒸着 i 層を持つ p-i-n 接合セルへの展開を行っている。

- b) p-i-n 接合セルの効率は，共蒸着 i 層のナノ構造と深い関係がある。今回，FIB-TEM によって，上述の効率 5.3% を示した $1 \mu\text{m}$ 厚の共蒸着 i 層のナノ構造の詳細を明らかにした。その結果 20–30 nm の直径のウィスカー状の結晶が，金属電極に対して垂直方向に伸びた構造が観察された。これまでの結果から，柱状の H_2Pc 結晶がアモルファス C_{60} に取り囲まれていると考えている。20 nm の直径は，励起子が H_2Pc/C_{60} 界面にほぼ到達できる距離である。また，ウィスカー H_2Pc 結晶が電極をつなぐ方向に伸びていることは，理想に近い，ホール輸送ハイウェーが形成できていることを強く示唆している。なお，亜鉛フタロシアニン（ $ZnPc$ ）/ C_{60} 系においても，同様の $ZnPc$ ウィスカーによるホール輸送ハイウェーの形成を示唆する結果が得られた。
- c) 有機半導体を実用レベルのデバイスに応用して行くためには，伝導タイプの制御，すなわち，pn 制御が必要不可欠である。特に，有機半導体においては，n 型化できるドナー性ドーパントがほとんど知られていない。今年度は，その初歩として，水素（ H_2 ）ドーピングの効果について検討した。 C_{60} 単独膜， $C_{60}:H_2Pc$ 共蒸着膜を 10^{-4} Torr の水素導入下で蒸着して作製すると，短絡光電流（ J_{sc} ）と開放端電圧（ V_{oc} ）が約 2 倍となり，太陽電池特性が大きく向上した。この結果は C_{60} のフェルミレベルがマイナスシフトし n 型化したと解釈することで合理的に説明できた。現在，他のドナー性ドーパントとして，Li 内包 C_{60} 等を検討している。

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. HIRAMOTO, “Organic p-i-n Solar Cells Incorporating Seven-nine Fullerene,” Proceedings of 2nd Global COE International Symposium on Electronic Devices Innovation (EDIS2009), Dec. 7, Osaka, Japan, pp. 85–86 (2009).

B-3) 総説, 著書

平本昌宏, 「有機太陽電池の効率化と耐久性評価」, 「新概念太陽電池と製造プロセス」第3章 色素増感太陽電池, 有機太陽電池, 第6節, 宮坂 力監修, シーエムシー出版(株) pp. 123–130 (2009).

平本昌宏, 「有機太陽電池」, 「電子情報通信学会知識ベース S2群2編ナノエレクトロニクス」4章有機ナノエレクトロニクス, 第4節 (2009).

平本昌宏, 「ZnO 保護層を持つ有機薄膜太陽電池」特集「太陽電池に関する技術開発トレンド—2009—」, *Material Stage* Vol. 9, No. 3, pp. 96–99 (2009).

平本昌宏, 「変換効率 10% の可能性, 有機薄膜太陽電池の開発動向, 可視領域の太陽光をすべて吸収できる p-i-n 接合セル, 有機半導体の超高純度化により変換効率 5.3% を達成」, *Semiconductor FPD World (Technology plus)* 「次世代太陽電池技術の開発」, プレスジャーナル, 6月号, pp. 48–49 (2009).

平本昌宏, 「弾道電子放出顕微鏡の電子注入バリア計測による有機デバイスの評価」, 「有機デバイスのための界面制御と制御技術」, シーエムシー出版, pp. 111–117 (2009).

平本昌宏, 「有機薄膜太陽電池——有機半導体超高純度化と長期動作テスト」, 「2010年太陽光発電技術大全」第2編太陽光システムの設計・製造・施工技術, 第1章第5節, 電子ジャーナル(株) (2009). (CD-ROM 版)

平本昌宏, 「有機薄膜太陽電池の開発」, *SOLAR POWER* 特集, 電波新聞社 (JEI) 10月号 (2009).

平本昌宏, 「低分子系有機薄膜太陽電池」, *日本写真学会誌* 72(5), 10月 (2009).

平本昌宏, 「有機薄膜太陽電池の最近の進展——近赤外利用技術——」, *未来材料*, 9(11), pp. 16–20 (2009).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, “Development of organic p-i-n junction solar cells,” Core-to-core Winter School “Organic Crystals,” Nagoya Univ., January 2009.

M. HIRAMOTO, “Development of Organic p-i-n Solar Cells,” Department Seminar of UCLA Materials Science and Engineering, Los Angeles (U.S.A.), April 2009.

M. HIRAMOTO, “Organic p-i-n Solar Cells Incorporating Seven-nine Purified Fullerene,” The 4th East Asia Symposium on Functional Dyes and Advanced Materials (EAS4), International House, Osaka (Japan), June 2009.

M. HIRAMOTO, “Current Status of Research on Organic Thin-Film Solar Cells,” NIMS Week 09 Satellite Symposia “Highly Efficient Utilization of Solar Energy Featuring Advanced Photovoltaics,” Tsukuba International Congress Center, July 2009.

M. HIRAMOTO, “Organic p-i-n Solar Cells Incorporating Seven-Nine Purified Fullerene,” ISSP Workshop “Physics and New Phenomena of π -electronic Interfaces,” The Institute for Solid-State Physics (ISSP), Kashiwa Campus, Univ. Tokyo, August 2009.

M. HIRAMOTO, “Organic p-i-n Solar Cells Incorporating Seven-Nine Fullerene,” 2nd Global COE International Symposium Electronic Devices Innovation, EDIS2009 “Global Workshop on Organic Thin-Film Solar Cell,” December 2009.

M. HIRAMOTO, "Solar Cells Using Organic Semiconductors," The 4th Winter School of Asian CORE—New Perspectives in Material, Photo and Theoretical Molecular Sciences, Seoul National University, Seoul (Korea), December 2009.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の現状と将来」表面科学技術研究会2009「進化する太陽電池とトータルエコロジー——省資源・環境・代替——」神戸大学瀧川記念学術交流会館, 2009年1月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池(低分子系)」日本学術振興会分子系の複合電子機能第181委員会第3回委員会, 東京大学, 2009年1月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池におけるp-i-n バルクヘテロ接合界面」日本真空学会2月研究例会/日本表面科学会第61回表面科学研究会「有機半導体素子における界面制御」機械振興会館, 東京, 2009年2月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の開発」PV EXPO2009, 第2回国際太陽電池展PV-6「開発が本格化してきた革新次世代太陽電池技術」東京ビッグサイト, 2009年2月.

平本昌宏,「低分子系有機薄膜太陽電池」東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究「有機ヘテロ接合太陽光発電デバイスの研究」東北大学電気通信研究所ナノ・スピン実験施設, 2009年3月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の研究開発の現状」電子情報通信学会シンポジウム「環境・エネルギー問題の解決に貢献する有機材料——有機エレクトロニクスからの提案」愛媛大学, 2009年3月.

平本昌宏,「効率10%を超える有機太陽電池を目指して」応用物理学会2009春シンポジウム「イントロダクトリートーク: 効率10%の可能性が出てきた有機薄膜太陽電池」筑波大学, 2009年4月.

平本昌宏,「低分子系有機薄膜太陽電池」有機薄膜太陽電池サテライトミーティング, 産業技術総合研究所太陽光発電研究センター, 2009年4月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の研究開発の現状」(財)化学技術戦略推進機構(JCII)マルチスケールCP研究会, 東京, 2009年4月.

平本昌宏,「超高純度有機半導体による高効率有機薄膜太陽電池」日本学術振興会薄膜第131委員会第245研究会, 新大阪ワシントンホテルプラザ, 2009年4月.

平本昌宏,「超高純度有機半導体を持った高効率有機薄膜太陽電池」大阪府立大学21世紀科学研究機構分子エレクトロニクスデバイス研究所第3回研究会「有機太陽電池の今後と展望——機能性 π 電子系の基礎と応用——」大阪府立大学中之島サテライト講義室, 2009年6月.

平本昌宏,「低分子系有機薄膜太陽電池」09-2 ポリマーフロンティア21「有機薄膜太陽電池」東京工業大学百年記念館フェライト会議室, 2009年6月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池における界面の問題」第3回分子科学会シンポジウム, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2009年6月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の現状と将来」第6回日本写真学会光機能性材料セミナー——有機デバイスの耐久性に関わる科学——, 東京工業大学100年記念館フェライト会議室, 2009年6月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の現状と将来」豊田中央研究所(株)2009年6月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の開発動向と今後の展望」日本インダストリーセンター講座, 東京京橋区民館, 2009年7月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池技術に関しての基礎から今後の展望, 特に10% 越えに向けた技術戦略」帝人融合研究所, 2009年7月.

平本昌宏,「近赤外に感度を有するPIN型有機薄膜太陽電池」CREST 有機太陽電池シンポジウム——光・ナノ・バイオ技術から光電変換機能へ——, 京都大学百周年時計台記念館, 2009年7月.

平本昌宏,「有機太陽電池の問題点におけるショート講演」第一回「有機半導体の基礎科学と有機太陽電池への応用に関する研究会」(財)科学技術交流財団,愛知県産業貿易館,2009年7月.

平本昌宏,「低分子系有機薄膜太陽電池の基礎と将来展望」第45回(2009秋)応用物理学会スクール「有機太陽電池の現状と将来展望」富山大学,2009年9月.

平本昌宏,「低分子系有機薄膜太陽電池の現状と将来」第58回高分子討論会「新電池と高分子の接点——太陽電池・燃料電池」熊本大学,2009年9月.

平本昌宏,「有機太陽電池の可能性と現状」岡山大学理学部コラボレーション棟,2009年10月.

平本昌宏,「低分子系有機薄膜太陽電池の最近の進展」応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会講習会「分子エレクトロニクスのニュートレンド」産業技術総合研究所臨海副都心センター,2009年11月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の高効率化に向けた革新的取り組み」第24回高分子エレクトロニクス研究会講座「エネルギーを支えるデバイス技術の新展開」東京理科大学森戸記念館,2009年11月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の最新技術」第34回顔料物性講座「エコロジーを実現するための顔料応用技術」東京塗料会館,2009年11月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の現状と将来」第30回表面科学セミナー「グリーンテクノロジー,表面科学の新たな挑戦」東京理科大学森戸記念館,2009年11月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の現状と将来」高分子学会関東支部湘北地区懇話会,旭硝子(株)AGCモノ作り研修センター,2009年11月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の現状と将来」第20回光物性研究会,大阪市立大学学術情報総合センター,2009年12月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池における分子技術の重要性」科学技術未来戦略ワークショップ「分子技術」科学技術振興機構(JST)研究開発戦略センター(CDRS)東京,2009年12月.

B-6) 受賞,表彰

平本昌宏,国立大学法人大阪大学教育・研究貢献賞(2006).

平本昌宏,応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会論文賞(2006).

平本昌宏,JJAP(Japanese Journal of Applied Physics)編集貢献賞(2004).

平本昌宏,電子写真学会研究奨励賞(1996).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会幹事(1997–1998, 2001–2002).

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会年会講演プログラム委員(2002–2003).

Korea-Japan Joint Forum (KJF)—Organic Materials for Electronics and Photonics, Organization Committee Member (2003–).

「有機固体における伝導性・光伝導性および関連する現象」に関する日中合同シンポジウム組織委員(2007–).

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会年会講演プログラム委員長(2008–2009).

Fifth International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE5)(Miyazaki), Organization Committee Member (2009).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

科学技術交流財団(財)「有機半導体の基礎科学と有機太陽電池への応用に関する研究会」座長(2009–2011).

学会誌編集委員

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌 編集委員(2001–2002, 2004–2007).

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌 ゲストエディター(2005).

競争的資金等の領域長等

東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究「有機半導体デバイスの基礎と応用」研究代表者(2003–2005).

さきがけ「太陽光と光電変換」研究領域 領域アドバイザー(2009–).

B-10) 競争的資金

日本学術振興会科研費基盤研究(C)(2),「高効率有機3層接合型固体太陽電池の開発」平本昌宏(2006年–2007年).

日本学術振興会科研費基盤研究(C)(2),「垂直接合型有機固体太陽電池の開発」平本昌宏(2004年–2005年).

科研費基盤研究(C)(2),「分子結晶におけるステップ構造制御と増幅型光センシングデバイス」平本昌宏(2002年–2003年).

科研費基盤研究(B)(2),「有機/金属界面のナノレベル構造制御と光電流増倍デバイス」平本昌宏(1977年–1998年).

科学技術振興機構特許補完研究プログラム,「光電流増倍現象等を利用したガス検知方法及びガスセンサー」平本昌宏(2003年).

科学技術振興機構シーズ育成試験,「p-i-n 接合型有機固体太陽電池」平本昌宏(2005年).

科学技術振興機構産学共同シーズイノベーション化事業顕在化ステージ,「高効率有機固体太陽電池の実用化試験」平本昌宏(2006年–2007年).

科学技術戦略推進機構アカデミアショーケース研究助成,「p-i-n 有機太陽電池の開発」平本昌宏(2006年).

(財)関西エネルギー研究基金(KRF)助成,「有機半導体のpn制御とp-i-n 有機固体太陽電池の開発」平本昌宏(2008年).

日本学術振興会科研費基盤研究(B)(2),「有機半導体のイレブンナイン超高純度化による10%効率有機薄膜太陽電池の開発」平本昌宏(2009年–2010年).

日本学術振興会科研費挑戦的萌芽研究,「直立超格子ナノ構造を組み込んだ高効率有機太陽電池」平本昌宏(2009年).

科学技術振興機構CREST研究「太陽光を利用した独創的クリーンエネルギー生成技術の創出研究領域」「有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」平本昌宏(2009年–).

B-11) 産学連携

共同研究(三洋電機)「高純度新規電子供与性材料による高効率有機薄膜太陽電池の作製」平本昌宏(2009年).

共同研究(クラレ(株))「有機薄膜太陽電池素子の高効率化」平本昌宏(2009年).

C) 研究活動の課題と展望

2008年4月に分子研に着任後，研究室の立ち上げは2008年度中にほぼ終了した。最初の研究室メンバーは，嘉治助教，池滝IMSフェロー，中尾研究員と私の4名で非常に小さなグループであったが，2009年度に，安念(秘書)，石山(博士1年次)，中山(研究員)の3名を増強し，7名態勢とした。2009年に，JST/CREST 研究領域「太陽光を利用した独創的クリーンエネルギー生成技術の創出」の研究代表者(研究課題名「有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」として採択されたため，有機半導体の物性物理学の確立と有機太陽電池応用のための研究資金として有効に活用し，また，CREST 研

究員の2 - 3名の増強を考えている。学生が少ないため、学生の確保が今後大事と考えている。

近年の、グリーンニューディール政策に代表されるように、エネルギー・環境関係の研究が社会的に非常に注目を集めており、有機薄膜太陽電池の実用化をその1つの解答として提示しようと考えている。有機薄膜太陽電池においては、有機半導体物性物理の確立という基礎研究が不可欠であり、基礎と応用の連携によって、基礎研究 - 実用化の間に横たわるデスパレーを突破しなければならない。

具体的研究テーマとして、以下の項目を強力に推進していく。 有機半導体を単結晶析出によってイレブンナインまで超高純度化する技術の確立、 ppm-ppb レベルの純度を精確に評価する技術の確立、 有機半導体のpn 制御技術の確立、 有機太陽電池の内蔵電界形成技術の確立、 金属 / 有機界面の基礎研究とそれをオーミック接合化する技術の確立、 現在パーコレーションに頼っている共蒸着i 層ナノ構造の設計・製作技術の確立、 近赤外を利用できる有機半導体、1 V 程度の開放端電圧を示す有機半導体の開発、など。数年内に、低分子系有機太陽電池の効率 10% を目指す。

鈴木 敏 泰 (准教授) (1998 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

- a) 電界効果トランジスタのための有機半導体の開発
- b) 有機 EL 素子のため有機半導体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機単結晶トランジスタは、半導体分子の本質的な移動度を知るための最適な方法である。現在、最も研究されている材料はルブレン ($C_{42}H_{28}$) であり、ホール移動度は $40 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ に及ぶことが知られている。今回、我々はルブレン骨格を完全および半分フッ素化し、n 型のルブレン誘導体 ($C_{42}F_{28}$ および $C_{42}F_{14}H_{14}$) を合成した。電気化学的測定において、これらの分子は高い電子親和力を示した。単結晶 X 線構造解析によれば、半分フッ素化体では、2 次元的な π スタック構造をとることが分かった。薄膜トランジスタでは、ルブレン同様に移動度は低いものの、n 型の特性を示した。現在、これらの単結晶トランジスタの作製を行っている。また、ルブレン単結晶とフッ素化ルブレン単結晶を張り合わせた pn 接合型トランジスタにもチャレンジしていきたい。

B-1) 学術論文

M. C. R. DELGADO, K. R. PIGG, D. A. DA SILVA FILHO, N. E. GRUHN, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, R. M. OSUNA, J. CASADO, V. HERNÁNDEZ, J. T. L. NAVARRETE, N. G. MARTINELLI, J. CORNIL, R. S. SÁNCHEZ-CARRERA, V. COROPCEANU and J. L. BRÉDAS, “Impact of Perfluorination on the Charge-Transport Parameters of Oligoacene Crystals,” *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 1502–1512 (2009).

S. KOWARIK, A. GERLACH, A. HINDERHOFER, S. MILITA, F. BORGATTI, F. ZONTONE, T. SUZUKI, F. BISCARINI and F. SCHREIBER, “Structure, Morphology, and Growth Dynamics of Perfluoro-Pentacene Thin Films,” *Phys. Status Solidi RRL* **2**, 120–122 (2008).

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「相関分子科学」2009 年 12 月.

B-10) 競争的資金

日本学術振興会科研費基盤研究(C), 「有機 EL 素子のためのアモルファス性有機電子輸送材料の開発」鈴木敏泰 (1999 年–2000 年).

日本学術振興会科研費基盤研究(B) (展開), 「フッ素化フェニレン化合物の有機 EL ディスプレーへの実用化研究」鈴木敏泰 (2000 年–2001 年).

日本学術振興会科研費奨励研究(A), 「新規含フッ素芳香族化合物の合成と有機 EL 素子における電子輸送材料への応用」阪元洋一 (2000 年–2001 年).

日本学術振興会科研費基盤研究(B) (一般), 「有機トランジスタのための n 型半導体の開発」鈴木敏泰 (2002 年–2003 年).

文部科学省科研費若手研究(B),「フッ素化ペンタセン類の合成と有機薄膜素子への応用」阪元洋一 (2003年–2004年).

文部科学省科研費若手研究(B),「チューブ状多環芳香族炭化水素の合成」阪元洋一 (2006年–2007年).

C) 研究活動の課題と展望

有機薄膜太陽電池は、有機EL素子および有機トランジスタに続く第三の有機半導体の応用分野として注目されている。有機太陽電池においてシリコンあるいは色素増感太陽電池にない特徴として、極端に薄く、軽くできる、フレキシブルであり、どのような形状にも対応できる、ウエットで作成できればコストがかなり抑えられる等が挙げられる。では、実用化の目途である効率10%を超える有機太陽電池を開発することは可能だろうか？私は素子構造と材料の両面からアプローチし、これを実現していきたいと考えている。

永 田 央 (准教授) (1998 年 3 月 16 日着任)

A-1) 専門領域：有機化学，錯体化学

A-2) 研究課題：

- a) 二成分結合型配位子を用いた第一遷移金属錯体の構造と電気化学特性の制御
- b) 金属錯体と有機色素を用いた光励起電子移動系の開発と触媒反応への展開
- c) 空間制御された大型有機分子内での電子移動

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 前年度に開発したピリジン・ターピリジンの二成分結合型配位子について，さらに詳細に調べた。結合部分のメチレン鎖長が 3 ～ 6 のものについて，コバルト (II) 錯体の電気化学挙動を比較したところ，3 のもののみ酸化還元波に変化が見られた。コバルト (II) → (I) の過程に伴って，二種類の配位構造が混在していると考えられる。一方，鎖長が 4 ～ 6 のものは，酸化還元電位にわずかなシフトが見られるほかはほぼ同一の挙動を示した。これらの錯体は酸化還元を行っても安定であり，当然のことながらビス (ターピリジン) 型錯体を生成することはない。さらに興味深いことに，二成分結合鎖の外側に導入した置換基の有無に依存して，1 : 1 の単核錯体と 2 : 2 の複核錯体ができることもわかった。この結果は，金属配位子の設計において，新しい指針を提供する可能性がある。
- b) 上記二成分結合型配位子のコバルト錯体とポルフィリンの複合分子を合成し，その光化学挙動について調べた。合成は，最初に金属を含まない有機分子部分をすべて合成し，そのあと選択的に金属を挿入することによって達成した。定常状態の蛍光スペクトルは消光されていることが確認された。
- c) 前年度までのキノンプールの化学を拡張する目的で，デンドリマー骨格の代わりに直線状の骨格を用いたキノンプール分子の合成を行った。この分子では，キノンの集合体を棒状に配置することができ，2 つの異なる酸化還元系を結びつけるのに好都合である。また，酸化還元電位の異なるキノンの挙動を NMR で追跡できるように，フッ素原子を導入したキノンを 4 種類開発した。

B-1) 学術論文

H. KON and T. NAGATA, "Syntheses of the Terpyridine-Bipyridine Linked Binary Ligands and Structural and Redox Properties of Their Cobalt Complexes," *Inorg. Chem.* **48**, 8593–8602 (2009).

T. NAGATA, Y. KIKUZAWA, T. NAGASAWA and S. I. ALLAKHVERDIEV, "Single-Molecular Quinone Pools: A Synthetic Model of Biochemical Energy Transducer," *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* **34**, 505–508 (2009).

T. NAGASAWA, S. I. ALLAKHVERDIEV, Y. KIMURA and T. NAGATA, "Photooxidation of Alcohols by a Porphyrin/Quinone/TEMPO System," *Photochem. Photobiol. Sci.* **8**, 174–180 (2009).

H. YAMAZAKI, T. NAGATA and M. YAGI, "Non-Catalytic O₂ Evolution by [(OH₂)(Clterpy)Mn(μ-O)₂Mn(Clterpy)(OH₂)]³⁺ (Clterpy = 4'-chloro-2,2':6',2''-terpyridine) Adsorbed on Mica with Ce^{IV} Oxidant," *Photochem. Photobiol. Sci.* **8**, 204–209 (2009).

V. N. KURASHOV, S. I. ALLAKHVERDIEV, S. K. ZHARMUKHAMEDOV, T. NAGATA, V. V. KLIMOV, A. YU. SEMENOVA and M. D. MAMEDOV, “Electrogenic Reactions on the Donor Side of Mn-Depleted Photosystem II Core Particles in the Presence of MnCl_2 and Synthetic Trinuclear Mn-Complexes,” *Photochem. Photobiol. Sci.* **8**, 162–166 (2009).

B-3) 総説，著書

S. I. ALLAKHVERDIEV, V. D. KRESLAVSKI, V. THAVASI, V. V. KLIMOV, T. NAGATA, H. NISHIHARA, B. ANDERSSON and S. RAMAKRISHNA, “Hydrogen Photoproduction by Use of Photosynthetic Organisms and Biomimetic Systems,” *Photochem. Photobiol. Sci.* **8**, 148–156 (2009).

永田 央, 「人工分子で光合成系を組み立てる：キノンプールとその周辺」*光合成研究* **19**, 119–127 (2009).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会東海支部代議員 (1999–2000).

学会の組織委員等

International Meeting “Photosynthesis in the Post-Genomic Era: Structure and Function of Photosystems” 組織委員 (2006).

学会誌編集委員

Biochimica and Biophysica Acta, “Photosynthesis” Special Issue, Guest Editor (2006).

Photosynthesis Research, “Recent Perspectives of Photosystem II” Special Issue, Guest Editor (2008).

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「基礎電子化学」(一部) 2009年7月.

B-10) 競争的資金

文部科学省科研費萌芽研究, 「無機ナノ粒子を包含する単一分子素子を用いた光合成物質変換」永田 央 (2003年–2004年).

文部科学省科研費特定領域研究(公募研究), 「デザインされた空孔を持つ有機分子と金属ナノ粒子の1:1複合体の調製」永田 央 (2004年–2005年).

日本学術振興会科研費基盤研究(C), 「人工キノンプールを用いた光合成物質変換系の構築」永田 央 (2007年–2009年).

文部科学省科研費新学術領域研究(研究課題提案型), 「ヘテロ複核金属錯体を触媒として用いる二酸化炭素の資源化」永田 央 (2009年–2011年).

C) 研究活動の課題と展望

本年度は、二成分結合型配位子を用いた錯体化学に特に注力した(課題(a), (b))。この研究は、光合成型電子移動を用いた触媒的物質変換への基礎固めとして進めているものであるが、*Inorg. Chem.* に発表した論文への関心が意外に高く、手応えを感じている。来年度は、これまで使ってこなかった金属元素を取り入れつつ、触媒的物質変換を本格的に攻略したい。新しい元素には新しい配位子が必要であるため、二成分結合型の骨格はそのままに、配位部分の官能基を取り替えた化合物の合成を進めているところである。

櫻 井 英 博 (准教授) (2004 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：有機化学

A-2) 研究課題：

- a) お椀型共役化合物「バッキーボウル」の合成手法の開発と物性評価
- b) 金属ナノクラスターを触媒とする新規反応の開発
- c) 上記2手法を組み合わせた、ナノチューブの単一組成合成の試み

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) お椀型共役化合物「バッキーボウル」は、フラーレン・単一組成カーボンナノチューブ合成達成への鍵物質として、あるいはそれ自身の特異な物理的性質を利用した新規物質の基本骨格として魅力的な化合物群である。我々はバッキーボウルの「シンプル」かつ「エレガント」な合成経路を確立し、さらに合成した化合物の物性や錯体触媒への応用を目指している。今年度は、 C_3 対称バッキーボウルの芳香環上に官能基を導入する手法を開発することに成功した。本手法により、 C_3 対称バッキーボウルの一般的合成法の完成がようやく視野に入ってきたと言える。また、当研究室で開発したパラジウムナノクラスター触媒を用いたハロアルケンの環化三量化反応の応用についても検討を行い、ホモキラル空間を有するかご状分子や、螺旋状分子の構築へと展開した。
- b) ナノメートルサイズの金属クラスターはバルク金属とも単核金属錯体とも異なる特性を示し、従来にない触媒の開発が期待される。特に金属表面と分子との相互作用が弱く、バルクにおける触媒活性がない金のクラスターに注目して研究を行っている。今年度の研究においては、金クラスターが形式的に酸化触媒ではなく Lewis 酸型触媒の反応を示す例として、アルケンへのアミン化合物の分子内付加反応の開発研究を行った。その結果、スルホンアミドや、一級アミンといった、性質の全く異なるアミン誘導体を用いても、反応条件を適切に選択することにより、空気中、含水（あるいはアルコール）溶媒条件下、極めて高活性を示すことを明らかにした。これらの反応では、反応基質によって適切な犠牲還元剤を選択することが重要である。すなわち反応は、主反応としては Lewis 酸型反応が進行しているが、副反応として同時に金クラスターによる空気酸化を駆動力とするレドックス反応が進行している。系内の反応を組み合わせることで、多種多様の形式の反応を設計することが可能であることが示された。

B-1) 学術論文

H. SAKURAI, I. KAMIYA, H. KITAHARA, H. TSUNOYAMA and T. TSUKUDA, "Aerobic Oxygenation of Benzylic Ketones Promoted by Gold Nanocluster Catalysts," *Synlett* 245–248 (2009).

H. TSUNOYAMA, N. ICHIKUNI, H. SAKURAI and T. TSUKUDA, "Effect of Electronic Structures of Au Clusters Stabilized by Poly(*N*-vinyl-2-pyrrolidone) on Aerobic Oxidation Catalysis," *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 7086–7093 (2009).

A. F. G. M. REZA, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, "Preparation of C_3 Symmetric Homochiral *syn*-Trisnorbornabenzenes through Regio-selective Cyclotrimerization of Enantiopure Iodonorbornenes," *Chem. –Asian J.* **4**, 1329–1337 (2009).

H. KITAHARA, I. KAMIYA and H. SAKURAI, "Intramolecular Addition of Toluenesulfonamide to Unactivated Alkenes Catalyzed by Gold Nanoclusters under Aerobic Conditions," *Chem. Lett.* **38**, 908–909 (2009).

B-3) 総説, 著書

櫻井英博, 「バッキーボウルの将来展望」 *機能材料* **29**, 46–51 (2009).

東林修平, 「おわん型共役炭素化合物バッキーボウルの合成」 *有機合成化学協会誌* **67**, 40–52 (2009).

櫻井英博, 佃 達哉, 「ポリビニルピロリドン保護金ナノクラスターの触媒活性」 *有機合成化学協会誌* **67**, 517–528 (2009).

櫻井英博, 「有機合成における金属クラスター触媒」 *化学工業* **60**, 553–558 (2009).

櫻井英博, 「おわん型芳香族化合物「バッキーボウル」の合成」 *化学工業* **60**, 849–854 (2009).

B-4) 招待講演

H. SAKURAI, “Asymmetric Synthesis of a Chiral Buckybowl,” Okazaki Conference 2009, Okazaki, February 2009.

櫻井英博, 「精密有機合成で挑戦する π 共役の次元制御」 日本化学会第89春季年会, 船橋, 2009年3月.

H. SAKURAI, “Asymmetric Synthesis of a Chiral Buckybowl,” International Symposium on Chiral Compounds and Special Polymers, Harbin (China), July 2009.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, Universitas Bengkulu, Bengkulu (Indonesia), July 2009.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, Institut Teknologi Bandung, Bandung (Indonesia), July 2009.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar Universitas Padjadjaran, Bandung (Indonesia), July 2009.

H. SAKURAI, “Gold Cluster as a Unique Catalyst under Aerobic Condition,” International Conference on Green and Sustainable Chemistry, Singapore, August 2009.

H. SAKURAI, “Gold Cluster as a Unique Catalyst under Aerobic Condition,” 13th Asian Chemical Congress, Shanghai (China), September 2009.

櫻井英博, 「個人的バッキーボウル研究史」 理工学会主催講演会, 青山学院大学, 相模原, 2009年10月.

H. SAKURAI, “Gold Cluster as a Unique Catalyst under Aerobic Condition,” 5th IUPAC International Symposium on Novel Materials and their Synthesis & 19th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers & 3rd Symposium on Power Sources for Energy Storage and their Key Materials, Shanghai (China), October 2009.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, Silpakorn University, Nakorn Pathom (Thailand), October 2009.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, Mahidol University, Bangkok (Thailand), October 2009.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, Cheng Mai University, Cheng Mai (Thailand), October 2009.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, Kasetsart University, Bangkok (Thailand), November 2009.

S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, “Pd-Catalyzed *syn*-Selective Cyclotrimerization of Halonorbornenes and its Application to Asymmetric Synthesis of Chiral Buckybowls,” China-Japan Symposium on Advanced Organic Chemistry, Shanghai (China), November 2009.

櫻井英博,「ナノサイズの金が示す特異な触媒活性」第3回物質科学フロンティアセミナー, 名古屋大学グローバルCOE プログラム, 名古屋, 2009年 11月.

H. SAKURAI, “Gold Cluster as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” International Conference on Advanced Nanomaterials and Nanotechnology, Guwahati (India), December 2009.

H. SAKURAI, “Asymmetric Synthesis of Chiral Buckybowls,” International Symposium on Organic Chemistry—Trends in 21st Century, Kolkata (India), December 2009.

B-5) 特許出願

特願 2009-177306,「アミド化合物の製造方法」櫻井英博, 北原宏朗(大学共同利用機関法人自然科学研究機構) 2009年.

B-6) 受賞, 表彰

櫻井英博, 有機合成化学協会研究企画賞 (2002).

東林修平, 天然物化学談話会奨励賞 (2005).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会東海支部代議員 (2005–2007).

競争的資金の領域長等

JSPS-INSA 二国間交流事業共同研究 研究代表者 (2008–2009).

JSPS 若手研究者交流支援事業～東アジア首脳会議参加国からの招へい～ コーディネーター (2008–).

B-8) 大学での講義, 客員

北海道大学触媒化学研究センター, 学外研究協力教員, 2009年.

大阪府立大学大学院工学研究科,「応用化学特論II」2009年 1月 13–14日.

京都大学大学院工学研究科,「物質エネルギー化学特論第七」2009年 5月 8日.

総研大アジア冬の学校,「Chemistry of buckybowls: bowl-shaped π -aromatic compounds」2009年 12月 4日.

B-9) 学位授与

A. F. G. Masud Reza, “Synthesis of C_3 Symmetric Cup-Shaped Molecules,” 2009年 9月, 博士(理学)

B-10) 競争的資金

科研費奨励研究(A),「アシルクロマト錯体を用いた有機合成反応の開発」櫻井英博 (1999年–2000年).

文部科学省科研費若手研究(B),「金属カルベノイドの実用的発生活法と精密有機合成への応用」櫻井英博 (2003年–2004年).

文部科学省科研費特定領域研究(公募研究)「動的カルベン錯体の設計と機能」櫻井英博 (2003年).

文部科学省科研費特定領域研究(公募研究)「ボウル型共役配位子を有する金属錯体の動的挙動と機能」櫻井英博 (2004年–2005年).

文部科学省科研費特定領域研究(公募研究)「バッキーボウルの自在構築」櫻井英博 (2006年–2008年).

文部科学省科研費特定領域研究(公募研究)「3次元リンク実現のためのお椀型化合物の合成」櫻井英博(2006年–2007年).

文部科学省科研費特定領域研究(公募研究)「金ナノクラスターの触媒活性を実現するためのマトリクス開発」櫻井英博(2006年–2007年).

文部科学省科研費若手研究(B)「キラル・ヘテロバッキーボウル類の合成」東林修平(2008年–2009年).

日本学術振興会科研費基盤研究(B)「ヘテロフラレン自在合成へのアプローチ」櫻井英博(2008年–2010年).

文部科学省科研費新学術領域研究(研究領域提案型)「精密有機合成によるカーボン π 空間の構築」櫻井英博(2008年–2012年).

科学技術振興調整費「高度な光機能を発現する有機金属分子システムの創製」櫻井英博(2002年–2003年).

科学技術振興機構さきがけ研究「有機化学手法によるカーボンナノチューブのキラリティ制御」櫻井英博(2007年–2010年).

倉田奨励金「触媒的1電子酸化反応系の構築」櫻井英博(2000年).

ノバルティス科学振興財団「アシル金属種を用いた新規合成手法の開発」櫻井英博(2000年).

医薬資源研究振興会研究奨励「還元反応の再構築：金属亜鉛を用いた還元反応による多官能性化合物の選択的合成法の開発」櫻井英博(2001年).

近畿地方発明センター研究助成「ボウル型共役炭素化合物のテーラーメイド合成」櫻井英博(2002年).

徳山科学技術振興財団研究助成「ヘテロフラレン合成を指向したボウル型共役化合物合成法の開発」櫻井英博(2004年).

石川カーボン研究助成金「バッキーボウル分子の一般的合成法の開発と物性評価」櫻井英博(2004年).

旭硝子財団研究助成「ヘテロフラレン合成を指向したバッキーボウル分子の自在合成」櫻井英博(2005年–2006年).

住友財団基礎科学研究助成「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の自在合成」櫻井英博(2005年).

住友財団基礎科学研究助成「 C_3 対称曲面 π 共役系拡張バッキーボウルの合成」東林修平(2009年).

C) 研究活動の課題と展望

バッキーボウルの化学に関しては、数年来の課題であった、 C_3 対称バッキーボウルの一般的合成法の完成が近づいてきた。合目的な分子デザインが可能となってきたことで、今後物性評価に関する共同研究を積極的に進めていく必要がある。また、合成面では、「通常の」有機合成と「ナノ」サイエンスのギャップ領域に入ってきており、新たな方法論の創出の必要性がいよいよ顕在化してきつつある。本領域を担当している各研究者の今後の益々の奮闘を期待する。

金属ナノクラスター触媒の化学は、環境調和型触媒としての側面が評価されており、「目に見える」成果が求められてきている。ただし、より本質的な反応過程の理解に関する研究も同時に進めていくことを心がけている。

毎年のことではあるが、合成化学は最終的には人材の確保が極めて重要である。今後も積極的に共同研究を進めていくと同時に、研究グループとしても人員の増強に努めていきたい。また、JENESYSプログラム等を通じて我々の研究を広め、多くの研究者の参加を促していきたいと思う。

田 中 彰 治 (助教) (1989 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：非ベンゼン系芳香族化学，分子スケールエレクトロニクス

A-2) 研究課題：

a) 大型パイ共役分子内における単一荷電キャリアーの外的制御原理の探索

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 「逐次精密合成法に基づく，単一電子トンネル回路素子の単一分子内集積化」について分子開発研究を進めている。単一キャリアーを単一 π 共役分子骨格内で自在に操作するための前提条件は，分子内荷電キャリアーであるポーラロンのサイズよりも十分に大きな規模の非周期的・定序配列型 π 共役システムの構築である。かつてポーラロン長は 2 nm 程度とされていたが，大型分子に対する理論評価が可能となった現在では，対イオンがない場合には 10 nm 以上の主鎖領域に非局在化するとの予想も出てきた。よって，その一桁上の数 100 nm 長クラスのパイ共役系を自由に精密構築するためのノウハウを確立することにした。例によって，本研究で用いる合成ブロックは中 / 低エネルギーギャップ高分子のモノマーユニットでもあるので (π 共役高分子の低エネルギーギャップ化については世界記録を保持している)，分子鎖内にポテンシャル井戸や障壁を作製する際の自由度は，市販分子ブロックベースのモノとは一線を画する。本年度の到達点は，「絶縁被覆」かつ「HUB 機能ユニット (これを基点として数ステップ以内に 20 種以上の機能ユニットに変換可能)」を装備したチオフエン 432 量体。その主鎖長は 166 nm，分子式は $C_{6912}H_{12098}N_{288}S_{432}Si_{576}$ ，分子量は 129,275, 2,592 π 電子系を有する 20,306 原子分子である。大型分子専門の計算化学の皆さん，面白い分子設計指針の大予言よろしくね。また 主鎖の伝導特性を外的に制御するための側鎖ユニットを導入するため 各種ジャンクションブロックを開発し，1-10 nm 長の側鎖ブロックを接続可能なことを実証した。主鎖と側鎖との電子的接合の程度は，松・竹・梅の 3 種を用意してあるので，系統的な (将来の総説・教科書で存在感を示しうる) 一連のナノ計測研究に対応可能である。共同研究としては (阪大・多田 / 山田 G)，報告済みの「基準オリゴチオフエン系」の単一分子鎖伝導計測に続いて，HUB 機能ユニットを活用して電子的モジュレーションを主鎖に種々導入した「比較系」の検討をすすめている。また，一段階で低分子を 5-10 nm 級に巨大化できる「クロスカップリングサイト付き長鎖合成ブロック群」をグラムオーダーで京大・田中 (一) G に供給し，発光機能や磁性機能を有する分子ユニットとの接合を実施している。

B-1) 学術論文

R. YAMADA, H. KUMAZAWA, S. TANAKA and H. TADA, "Electrical Resistance of Long Oligothiophene Molecules," *Appl. Phys. Express* 2, 025002 (3 pages) (2009).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

分子研分子物質開発研究センター・特別シンポジウム「分子スケールエレクトロニクスにおける新規分子物質開発」主催者 (1998).

応用物理学会・日本化学会合同シンポジウム「21世紀の分子エレクトロニクス研究の展望と課題——分子設計・合成・デバイスからコンピュータへ——」日本化学会側準備・運営担当 (2000).

第12回日本MRS学術シンポジウム: セッション H 「単一電子デバイス・マテリアルの開発最前線～分子系・ナノ固体系の単一電子デバイス～」共同チェア (2000).

First International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics 組織委員 (2001).

B-10) 競争的資金

日本学術振興会科研費基盤研究(C), 「高度の電子輸送能を有するナノスケール単一分子電線の創出」田中彰治 (1998年–1999年).

日本学術振興会科研費基盤研究(C), 「シリコンナノテクノロジーとの融合を目指した機能集積型巨大パイ共役分子の開発」田中彰治 (2000年–2001年).

日本学術振興会科研費基盤研究(C), 「単一分子内多重トンネル接合系の精密構築法の開拓」田中彰治 (2007年–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

単一分子内のポラロンのサイズの予想値が、年々大きくなっている。対イオンのような局所的電荷がない場合、例えば基板上に単一分子鎖を設置したようなケースでは、分子構造や外部電場に応じて伸縮自在であるのが分子内ポラロンの本来の姿なのであろう。うちでは、裏目標として 200–300 nm 級の非周期的・定序配列型 π 共役分子の構築を想定してきたので、好ましい傾向なのであるが、いろんな意味で評価のモノサシが追いついてこないのが苦しいところである。例えば、MALDI-TOF Mass 法といえども分子量が5万界限からはピークの半値幅が増大してくる。分子量 43,093 の分子の分子鎖端に臭素を一個だけつけた分子(分子量 43,172)を単離精製しても、両者を区別するのは容易ではない。S社の技術に相談したが、スルーされた模様。機が熟するまでじっと我慢の子で、「異形のように、実は必要な物理的要件を完備した分子」の開発をブレることなく実施するべし。

安全衛生管理室

戸村 正 章 (助教) (2004 年 6 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：有機化学，構造有機化学，有機固体化学

A-2) 研究課題：

- a) 弱い分子間相互作用による分子配列制御と機能性分子集合体の構築
- b) 新しい機能性電子ドナーおよびアクセプター分子の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 以前より，新しい機能性電子ドナーとして 1,2,5-チアジアゾール環が縮合した非対称なテトラチアフルバレン分子の開発を行ってきたが，今回，いくつかの誘導体を合成し，その構造について検討したところ，結晶構造中に分子間の短い S...S 相互作用により形成されるジグザグ状分子テープ構造を見出した。
- b) ハロゲン原子と π 電子系との間のノンコバレントな相互作用 ($C-X\cdots\pi$) は結晶工学上有用なツールとなり得る可能性を秘めているが，水素結合系と比較してその報告例は少ない。そこで，結晶構造中に多く見られる塩素原子とアセチレン三重結合間の相互作用の理論的解析を電子相関をも考慮した高いレベルの計算方法により行いその本質を探究した。その結果，分散力の寄与が大きいことが明らかになった。
- c) 1,3,4-オキサジアゾール，オリゴチオフェン，テトラセンなどのヘテロ環および芳香環骨格を持つ新しい機能性分子を合成・開発し，その構造ならびに機能性について検討したところ，いずれも有用な知見を得た。1,3,4-オキサジアゾール環を含む大環状分子では，その自己組織化により，水の一次元ネットワークを包接する超分子ナノチューブの構築に成功した。また，パーフルオロテトラセン骨格を有するホウ素錯体はすぐれた n 型半導体特性を示した。

B-1) 学術論文

K. ONO, K. TSUKAMOTO, R. HOSOKAWA, M. KATO, M. SUGANUMA, M. TOMURA, K. SAKO, K. TAGA and K. SAITO, "A Linear Chain of Water Molecules Accommodated in a Macrocyclic Nanotube Channel," *Nano Lett.* **9**, 122–125 (2009).

K. ONO, K. NAKAGAWA and M. TOMURA, "1,4-Bis[(3,5-dimethoxyphenyl)ethynyl]benzene," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **65**, o346–o346 (2009).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "5-Isopropylidene-1,3-dithiolo[4,5-d][1,3]dithiole-2-thione," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **65**, o1050–o1050 (2009).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "5-(1,3-Dithiolo[4,5-d][1,3]dithiol-2-ylidene)-1,3-dithiolo[4,5-c][1,2,5]thiadiazole: An Unsymmetrical Tetrathiafulvalene with Fused 1,2,5-Thiadiazole and 1,3-Dithiole Rings," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **65**, o1082–o1082 (2009).

M. TOMURA, "Theoretical Study of Noncovalent Interactions between Triple Bonds and Chlorine Atoms in Complexes of Acetylene and Some Chloromethanes," *Chem. Phys.* **359**, 126–131 (2009).

K. ONO, K. TSUKAMOTO and M. TOMURA, “5,5’-Di-4-pyridyl-2,2’-(5-*tert*-butyl-*m*-phenylene)bis(1,3,4-oxadiazole),” *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **65**, o1873–o1873 (2009).

K. ONO, O. TOKURA and M. TOMURA, “(3*Z*,3’*Z*)-3,3’-(Ethane-1,2-diylidene)diisobenzofuran-1(3*H*)-one,” *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **65**, o2118–o2118 (2009).

K. ONO, J. HASHIZUME, H. YAMAGUCHI, M. TOMURA, J. NISHIDA and Y. YAMASHITA, “Synthesis, Crystal Structure, and Electron-Accepting Property of BF₂ Complex of a Dihydroxydione with a Perfluorotetracene Skeleton,” *Org. Lett.* **11**, 4326–4329 (2009).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, “Unsymmetrical Tetrathiafulvalene with a Fused 1,2,5-Thiadiazole Ring and Methylthio Groups,” *Molecules* **14**, 4266–4274 (2009).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会コンピューター統括委員会 CSJ-Web 統括的管理運営委員会委員 (2001–2002).

日本化学会広報委員会ホームページ管理委員会委員 (2003–).

C) 研究活動の課題と展望

有機固体における電気伝導性、磁性、光学的非線形性などの物性の発現には、その分子固有の特質のみならず、集合体内でどのように分子が配列しているかということが大いに関与している。そのために、このような機能性物質の開発には分子配列および結晶構造の制御、すなわち、「分子集合体設計」というコンセプトが極めて重要となってくる。しかしながら、現状では、簡単な有機分子の結晶構造予測さえ満足には成し遂げられていない。このことは、逆に言えば、拡張π電子系内に、水素結合などの分子間の弱い相互作用を導入し、種々の分子集合体を設計・構築するという方法論には、無限の可能性が秘められていることを示している。今後は、水素結合だけではなく、ヘテロ原子間相互作用・C–H…π 相互作用・立体障害といった新しいツールによる分子集合体設計、特に、格子状有機超分子構造体の構築に取り組みたい。さらに、合成された分子の分子配列を決定づけているこれらの分子間相互作用の理論的な精密解析を行い、得られた情報に基づいてその構造や機能を理解すると共に、これらの構造を再現しうる高速計算手法の開発を通じて、結晶構造の計算化学的な予測方法を探求することを最終的な目的としたい。また、この分野の研究の発展には、新規化合物の開発が極めて重要であるので、「新しい機能性電子ドナーおよびアクセプター分子の開発」の研究課題も続行する。加えて、以上のような研究活動と安全衛生管理業務の効率的な両立を常に念頭に置いている。