

6-4 物質分子科学研究領域

電子構造研究部門

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線磁気円二色性などの分光学的手法を用いた磁性薄膜の表面磁性解析
- b) 雰囲気制御型硬X線光電子分光法の開発と固体高分子形燃料電池への応用
- c) 時間分解X線吸収分光による光触媒のダイナミクス解明と固体の熱的性質の検討

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，分子研シンクロトロン放射光源 UVSOR-III 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い，合わせて国内外との共同研究を広く実施してきた。今年度は，有機金属分子ニッケロセン薄膜の強磁性基板上の磁性の検討を始めた。
- b) SPring-8 の BL36XU で新しく開発した雰囲気制御型硬X線光電子分光装置により固体高分子形燃料電池電極触媒の in situ 測定に成功し，電圧に依存して変化する白金の酸化状態を検出した。この結果はプレスリリースを行った。
- c) シンクロトロン放射光とX線自由電子レーザーを用い，光触媒材料の光励起過程での電子状態及び構造変化を，X線吸収微細構造 (XAFS) 分光を用いて明らかにする目的で，ナノ秒 (シンクロトロン放射光) あるいはピコ秒 (X線自由電子レーザー) の時間領域での変化を追跡している。

B-1) 学術論文

J. OKABAYASHI, J. W. KOO, H. SUKEGAWA, S. MITANI, Y. TAKAGI and T. YOKOYAMA, “Perpendicular Magnetic Anisotropy at the Interface between Ultrathin Fe Film and MgO Studied by Angular-Dependent X-Ray Magnetic Circular Dichroism,” *Appl. Phys. Lett.* **105**, 122408 (5 pages) (2014).

Y. TAKAGI, H. WANG, Y. UEMURA, E. IKENAGA, O. SEKIZAWA, T. URUGA, H. OHASHI, Y. SENBA, H. YUMOTO, H. YAMAZAKI, S. GOTO, M. TADA, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA, “In Situ Study of an Oxidation Reaction on a Pt/C Electrode by Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *Appl. Phys. Lett.* **105**, 131602 (5 pages) (2014).

M. DABROWSKI, T. R. F. PEIXOTO, M. PAZGAN, A. WINKELMANN, T. NAKAGAWA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, U. BAUER, F. YILDIZ, F. BISIO, M. PRZYBYLSKI and J. KIRSCHNER, “Oscillations of the Orbital Magnetic Moment due to d-Band Quantum Well States,” *Phys. Rev. Lett.* **113**, 067203 (5 pages) (2014).

K. EGUCHI, Y. TAKAGI, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, “Magnetic Interactions of Vanadyl Phthalocyanine with Ferromagnetic Iron, Cobalt, and Nickel Surfaces,” *J. Phys. Chem. C* **118**, 17633–17637 (2014).

- N. ISHIGURO, S. KITAYAKARN, O. SEKIZAWA, T. URUGA, T. SASABE, K. NAGASAWA, T. YOKOYAMA and M. TADA**, “Rate Enhancements in Structural Transformations of Pt–Co and Pt–Ni Bimetallic Cathode Catalysts in Polymer Electrolyte Fuel Cells Studied by in Situ Time-Resolved X-Ray Absorption Fine Structure,” *J. Phys. Chem. C* **118**, 15874–15883 (2014).
- N. ISHIGURO, T. URUGA, O. SEKIZAWA, T. TSUJI, M. SUZUKI, N. KAWAMURA, M. MIZUMAKI, K. NITTA, T. YOKOYAMA and M. TADA**, “Visualization of the Heterogeneity of Cerium Oxidation States in Single Pt/Ce₂Zr₂O₈ Catalyst Particles by Nano-XAFS,” *ChemPhysChem* **15**, 1563–1568 (2014).
- S. KITAYAKARN, T. SAIDA, A. SODE, N. ISHIGURO, O. SEKIZAWA, T. URUGA, K. NAGASAWA, T. YAMAMOTO, T. YOKOYAMA and M. TADA**, “In Situ Time-Resolved XAFS of Transitional States of Pt/C Cathode Electrocatalyst in an MEA During PEFC Loading with Transient Voltages,” *Top Catal.* **57**, 903–910 (2014).
- H. UEHARA, Y. UEMURA, T. OGAWA, K. KONO, R. UENO, Y. NIWA, H. NITANI, H. ABE, S. TAKAKUSAKI, M. NOMURA, Y. IWASAWA and K. ASAKURA**, “In Situ Back-Side Illumination Fluorescence XAFS (BI-FXAFS) Studies on Platinum Nanoparticles Deposited on a HOPG Surface as a Model Fuel Cell: A New Approach to the Pt-HOPG Electrode/Electrolyte Interface,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 13748–13754 (2014).
- Y. UEMURA, H. UEHARA, Y. NIWA, S. NOZAWA, T. SATO, S. ADACHI, B. OHTANI, S. TAKAKUSAKI and K. ASAKURA**, “In Situ Picosecond XAFS Study of an Excited State of Tungsten Oxide,” *Chem. Lett.* **43**, 977–979 (2014).

B-4) 招待講演

- 横山利彦, 「日本 XAFS 研究会 XAFS 光源検討委員会の活動報告」PF 研究会「次世代放射光源で期待される XAFS を活用したサイエンス」高エネルギー加速器研究機構, 茨城, 2014 年 7 月.
- 高木康多, 「燃料電池 Pt/C カソード触媒の雰囲気型硬 X 線光電子分光測定」放射光学会第 7 回若手研究会「最先端オペランド観測で明らかになる物性科学」東京大学, 千葉, 2014 年 9 月.

B-6) 受賞, 表彰

- 中川剛志, 日本物理学会第 4 回若手奨励賞 (2010).
- 高木康多, 日本物理学会第 2 回若手奨励賞 (2008).
- 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).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

- 日本 XAFS 研究会幹事 (2001–2007, 2010–).
- 日本放射光学会評議員 (2004–2005, 2008–2010, 2011–2012, 2014–2015).
- 日本放射光学会編集幹事 (2005–2006).
- Executive Committee member of the International X-ray Absorption Society (2003.7–2009.8).

学会の組織委員等

- 第 14 回 XAFS 討論会実行委員長プログラム委員長 (2011).
- XAFS 討論会プログラム委員 (1998–2014).

第15回X線吸収微細構造国際会議プログラム委員 (2011–2012).

日本放射光学会年会組織委員 (2005), プログラム委員 (2005, 2011).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会学術システム研究センター化学班専門研究員 (2010–2012).

文部科学省ナノテクノロジー・ネットワーク運営委員 (2007–2011).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2004–2005, 2008–2009).

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 (2003–2009), 同化学材料分科会主査 (2005–2009).

SPring-8 ユーザー協同体(SPRUC)機関代表者 (2012–).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (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

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム分子・物質合成プラットフォーム代表機関運営責任者 (2012–).

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム分子・物質合成プラットフォーム分子科学研究所, 実施責任者 (2012–).

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 (2007.4–2012.3).

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, 「物性科学概論」2014年.

名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻, 客員教授, 2012年–.

B-10) 競争的資金

科研費特別研究員奨励費, 「時分割DXAFS-PEEMの開発と固体表面上の光励起 - 電子移動過程の直接観測」上村洋平 (2013年).

科研費基盤研究(C), 「レーザー誘起磁気円二色性STMによるフタロシアニン分子のスピン分布マッピング」高木康多 (2012年–2014年).

科研費若手研究(B), 「レーザー誘起光電子顕微鏡による磁性薄膜のフェムト秒イメージング」中川剛志 (2011年–2012年).

科研費基盤研究(A), 「キラル光電子顕微鏡の開発」横山利彦 (2010年–2012年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「レーザー誘起磁気円二色性STMの開発」横山利彦 (2008年–2009年).

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).

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).

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).

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).

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).

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).

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 (2003年-2013年).

受託研究, NEDO 固体高分子燃料電池実用化推進技術開発「基盤技術開発」MEA 材料の構造・反応物質移動解析,「時間分解X線吸収微細構造(XAFS)等による触媒構造反応解析」横山利彦 (2011年-2014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,さらには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。

また,2011年度から,広域X線吸収微細構造(EXAFS)法と経路積分法を併用して,磁性合金の熱膨張等の研究を始め,既に成果が挙がっている。今後も,この独自の手法によって,局所構造の見地から固体の熱的性質を検討していきたい。

さらに,2011年度から,唯グループとともに,SPRING-8の超高輝度硬X線を利用した燃料電池のin situ X線吸収分光による解析を行っているが,今年度は,雰囲気制御型硬X線光電子分光法の開発を行い,燃料電池動作下(湿った酸素中)での硬X線光電子分光測定に世界で初めて成功した。さらなる展開を目指す。

これらに加えて,2013年7月から,上村洋平助教が着任した。ナノ・ピコ秒時間分解X線吸収微細構造分光法の開発的研究を進め,光触媒等の高速時間依存電子状態・幾何構造の変化を追跡する研究を行い始めている。

電子物性研究部門

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) 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・電荷ダイナミックスを明らかにするために磁気共鳴測定を行っている。一次元電子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 測定ならびにパルス ESR を行い，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，新規な自己ドーブ型有機導体の強磁場 ESR を用いた研究，新規な金属錯体や導電性分子物質に関する微視的研究も行っている。
- b) 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ダ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稼働した。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

M. YOSHIDA, M. KONDO, T. NAKAMURA, K. SAKAI and S. MASAOKA, “Three Distinct Redox States of an Oxo-Bridged Dinuclear Ruthenium Complex,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **53**, 11519–11523 (2014).

T. TERAUCHI, S. SUMI, Y. KOBAYASHI, T. NAKAMURA, K. FURUKAWA and Y. MISAKI, “ Stable Metallic State of (TTPCOO)₂NH₄ with Mobile Dopant,” *Chem. Commun.* **50**, 7111–7113 (2014).

B-6) 受賞，表彰

古川 貢, 電子スピンサイエンス学会奨励賞 (2012).

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, 2013–).

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 (2004–2005).

電子スピンサイエンス学会運営理事 (2006–2011).

電子スピンサイエンス学会副会長 (2014–2015).

アジア環太平洋EPR/ESR 学会(Asia-Pacific EPR/ESR Society)秘書 / 財務 (2004–2008) , 日本代表 (2010–2014).

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).

第49回電子スピンサイエンス学会年会(名古屋) プログラム委員 (2010).

Asia Pacific EPR/ESR Symposium 2012, Oct. 11th–15th, 2012, Beijing, China, International Organizing Committee (2012).

Joint Conference of APES2014, IES and SEST2014 (APES-IES-SEST2014), Nov. 12th–16th, 2014, Nara, Japan, Program Chair , 座長 (2014).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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).

東京大学物性研究所物質設計評価施設運営委員会委員 (2011–2013).

学会誌編集委員

電子スピンサイエンス学会編集委員 (2003).

電子スピンサイエンス学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンサイエンス学会編集アドバイザー (2006–2013).

B-8) 大学での講義, 客員

電気通信大学, 平成26年度UEC パスポートセミナー「電気を流す有機物とは? 伝導性・磁性を理解しよう。」2014年11月27日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「先端磁気共鳴計測による電子対相関の解明」中村敏和 (2013年–2015年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「パルスESRによる距離計測技術を用いたプリオン凝集体構造の解明」中村敏和 (2012年–2013年).

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クス研究」中村敏和 (2008年–2011年).

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).

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 薬師久弥(中村敏和は準代表者で実質独立) (2003年–2007年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「機能性物質の時間分解ESRイメージング研究」古川貢 (2011年–2013年).

科研費若手研究(A),「次世代太陽光エネルギー 希土類色素増感太陽電池」のスピンドダイナミクス研究』古川 貢 (2009年–2011年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型)「分子自由度が拓く新物質科学」公募班「光誘起機能性材料のアドバンストESRによるスピンドダイナミクス研究』古川 貢(2009年–2010年).

科研費若手研究(B),「色素増感太陽電池の光電変換特性とスピンドダイナミクスの相関』古川 貢 (2006年–2008年).

科研費若手研究(B),「セミマクロスコピックスケールの巨大磁気モーメントイメージング』古川 貢 (2004年–2005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。有機導体など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、生体関連試料を含む分子性物質の機能性に関する研究を行っている。多周波ESR(X-, Q-, W-bands)・パルス二重共鳴法(ELDOR, ENDOR)を用いた他に類を見ない磁気共鳴分光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、分子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

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) ドーピングイオン化率増感
- b) 1 ppm 極微量ドーピングによる有機太陽電池の性能向上

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機半導体に不純物を極微量加えるドーピングの効率を 100% にすることに成功した。シリコンに代表される無機半導体のドーピング効率は 100% であることが知られているが、これまで有機半導体のドーピング効率は 10% 以下で、仮に不純物を 10 個加えても、そのうちの 1 個にしか電子を発生させることができなかった。

今回、2 種の有機半導体を混合した共蒸着膜においてドーピング効率が 100% に達することを発見し、本現象を「ドーピング増感効果」と命名した（論文 5）。これは、有機半導体においても、加えた不純物 10 個のすべてが電子を発生し、無機半導体と同じ効率 100% でドーピングができるようになったことを意味している。詳細な機構として、電荷分離超格子モデルと直接カスケードイオン化モデルを提出した。ドーピング増感効果は、高性能の有機太陽電池や有機デバイス作製の基盤となる技術である。

- b) ppm 極微量ドーピングによって、有機太陽電池の性能向上できることを証明した。

光電変換層への直接ドーピングによって、初めて、多数キャリアと少数キャリアの概念を有機太陽電池に導入した。1 ppm の極微量ドーピングで、多数キャリア濃度の増大による、セル抵抗低下効果と再結合抑止効果で、曲線因子が大きく向上した。1 から 10 ppm にドーピング濃度を大きくすると、空乏層形成のため、光電流が系統的に向上した。ドーピング濃度が 100 ppm 以上になると、ドーパント不純物散乱のために、少数キャリア拡散距離が減少し、光電流量が逆に減少した。

1–10 ppm 極微量のドーピングによる多数キャリア濃度増大が光電流増大を引き起こす結果は、有機太陽電池において、世界初の観測である。

B-1) 学術論文

M. HIRAMOTO, M. KUBO, Y. SHINMURA, N. ISHIYAMA, T. KAJI, K. SAKAI, T. OHNO and M. IZAKI, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” *Electronics* 3, 351–380 (2014).

Y. SHINMURA, T. YOSHIOKA, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Mapping of Band Bending for Doped C₆₀ Films,” *Appl. Phys. Express* 7, 071601 (4 pages) (2014).

K. HARAFUJI, H. SATO, T. MATSUURA, Y. OMOTO, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Degradation in Organic Solar Cells under Illumination and Electrical Stresses in Air,” *Jpn. J. Appl. Phys.* 53, 122303 (9 pages) (2014).

S. KATSUBE, T. HARADA, T. UMECKY, T. TAKAMUKU, T. KAJI, M. HIRAMOTO, Y. KATSUMOTO and K. NISHIYAMA, “Structures of Naphthol-AOT Self-Assembly Organogels and their Applications to Dispersing Media of Rare-Earth Complexes,” *Chem. Lett.* 43, 1861–1863 (2014).

Y. SHINMURA, Y. YAMASHINA, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Ionization Sensitization of Doping in Co-Deposited Organic Semiconductor Films,” *Appl. Phys. Lett.* **105**, 183306 (5 pages) (2014).

B-3) 総説, 著書

平本昌宏, 「有機半導体のpn 制御と太陽電池応用」 *Molecular Electronics & Bioelectronics* **25**, 81–86 (2014).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Thin-Film Solar Cells,” MANA (International Center for Materials Nanoarchitectonics) International Symposium, Tsukuba (Japan), March 2014.

平本昌宏, 「イントロダクトリー」第6回有機薄膜太陽電池サテライトミーティング, 理化学研究所和光キャンパス鈴木梅太郎ホール, 和光, 2014年3月.

平本昌宏, 「有機半導体のpn 制御と太陽電池応用」M&BE 研究会「有機分子・バイオエレクトロニクスが拓く新しい世界」キャンパスプラザ京都, 京都, 2014年6月.

平本昌宏, 「有機太陽電池のバンドギャップサイエンス」第25回東海地区光電気化学研究会, 豊橋技術科学大学駅前サテライトオフィス, 豊橋, 2014年8月.

平本昌宏, 「有機半導体のpn 制御と有機太陽電池への応用」有機エレクトロニクス研究会——有機系太陽電池の研究最前線, JR 博多シティ会議室9F 会議室3, 福岡, 2014年12月.

B-6) 受賞, 表彰

嘉治寿彦, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会奨励賞 (2013).

嘉治寿彦, 第31回(2011年秋季)応用物理学会講演奨励賞 (2011).

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).

東京大学物性研究所2011年度後期短期研究会「エネルギー変換の物性科学」オーガナイザーメンバー (2011).

有機薄膜太陽電池サテライトミーティング世話人代表 (2009-).

The 37th International Symposium on Compound Semiconductors (ISCS2010), Programm Committee Member of the Session “Organic Semiconductor Materials and Devices,” 31 May–4 June 2010, Takamatsu Kagawa, Japan (2010).

The 40th International Symposium on Compound Semiconductors (ISCS 2013), Program Committee Member, “Organic Semiconductors and Flexible Materials,” Kobe Convention Center, Kobe, Japan, May 19–23 (2013).

The 6th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion (WCPEC-6), Program Committee Member and Chairman, Kyoto International Conference Center, Kyoto, Japan, Nov. 23–27 (2014).

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 (2012–2013). (嘉治寿彦)

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会プログラム編集委員 (2014–2015). (嘉治寿彦)

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).

京都大学化学研究所全国共同利用・共同研究拠点連携基盤専門小委員会委員 (2011–2012).

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-).

戦略的創造研究推進研究(CREST)「低エネルギー, 低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出(ACT-C)」研究領域 領域アドバイザー (2012-).

その他

岡崎ビジネス大賞評価委員 (2012).

岡崎ものづくり協議会学識委員 (2011-).

B-9) 学位授与

久保雅之, 「pn-Homojunction Organic Solar Cells」2014年9月, 博士(理学)

B-10) 競争的資金

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).

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).

NEDO「太陽光発電システム未来技術研究開発」超階層ナノ構造を有する高効率有機薄膜太陽電池の研究開発」平本昌宏(分担)(2006年度–2009年度).

科学技術振興機構CREST 研究,「二酸化炭素排出抑制に資する革新的技術の創出」,「有機薄膜太陽電池の高効率化に関する研究」平本昌宏(分担)(2008年度-2009年度).

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-2012年).

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-2010年).

科研費挑戦的萌芽研究,「クロスドーピングによる有機薄膜太陽電池」平本昌宏(2012年-2013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-2015年).

科学技術振興機構先端的低炭素化技術開発(ALCA)「有機薄膜太陽電池の結晶性理想構造の共蒸発分子誘起結晶化法による実現と高効率化」嘉治寿彦(2012年-2018年).

科研費基盤研究(B),「共蒸着膜のpn制御による15%効率有機タンデム太陽電池の開発」平本昌宏(2013年-2015年).

科研費若手研究(B),「共蒸発分子誘起結晶化法の異種材料展開と原理探求」嘉治寿彦(2013年-2014年).

C) 研究活動の課題と展望

CREST プロジェクト「有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」(研究代表者:平本)の遂行のために 研究員4名(久保, 新村, 菊池, 山品(~ 8/31))を雇用している。また, 博士後期課程学生である, 大橋が4月より加わった。2014年は, 嘉治助教, 片山(ALCA 雇用研究員(4/11 ~ 1/31)), 中尾研究員, 杉原(秘書)と私の5名とあわせ, 10名のグループで研究を行った。(2014/12/31現在7名)

12/1付けで嘉治助教が東京農工大准教授として転出した。

上記プロジェクトにより, 有機半導体の単独, 共蒸着膜のpn制御技術を完成し, ppm 極微量ドーピングによる有機太陽電池の効率向上ができることを実験的に証明できた。分子研着任後6年間で, 最初の研究目標「有機半導体のpn制御」を達成できたと考えている。これをReview(論文1)にまとめた。なお, ドーピングイオン化率増感は, 励起子を解離するために平本が1991年に提案した混合接合(バルクヘテロ接合)コンセプトのドーピング版に相当する。

来年度より, 次の目標として, 「有機単結晶pn制御」を考えている。pn制御の威力をさらに示すために, 移動度が高い単結晶薄膜にドーピングし, より本質的なドーピング機構の解明と本質的な有機太陽電池の効率向上, 有機デバイスへの展開を目指す。

2015.3に上記CREST プロジェクトが終了する。今年度は, 次の段階の国プロにつなげる努力を集中して行った。

2週に1度, 1日かけて研究報告とディスカッションを強力に行っている。研究員, 学生に論文を積極的に執筆させている。CREST 研究員の久保は, 今年度, 論文博士学位を取得した。新村は, 来年度, 論文博士取得手続き中である。来年度より, 博士課程学生がさらに1名加わり, 学生が2名になる予定。研究室の国際化も視野に入れる。

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) 2次元高分子の創生と機能開拓
- b) 多孔性共役高分子の創出と機能開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 2次元高分子の新しい機能を開拓した。電子ドナーとアクセプターからなる2次元高分子の合成に成功し，その電荷分離機能について検討した（アメリカ化学会誌 *J. Am. Chem. Soc.* 2014）。TTFをビルディングブロックとして有する新しい2次元高分子の合成手法を確立し，光伝導性について検討した（*Chem. –Eur. J.* 2014）。有機分子触媒点を導入した2次元高分子を合成し，その高い触媒機能を明らかにした（*Chem. Commun.* 2014）。
- b) 多孔性共役高分子に関して，薄膜を作製する手法を確立した（*Angew. Chem., Int. Ed.* 2014）。また，多孔性共役高分子の蓄電機能について検討し，Liイオン電池の正極材料として有望あることを明らかにした。金属ナノ粒子を多孔性共役高分子に内包し，新型金属ナノ粒子触媒を構築した。これらの金属ナノ粒子は，高い安定性と触媒活性を兼備し，水中で様々なクロスカップリング反応を触媒することができる。

B-1) 学術論文

N. HUANG, Y. XU and D. JIANG, “High-Performance Heterogeneous Catalysis with Surface-Exposed Stable Metal Nanoparticles,” *Sci. Rep.* **4**, 7228 (2014). DOI: 10.1038serp07228 (2014)

H. XU and D. JIANG, “Covalent Organic Frameworks: Crossing the Channel,” *Nat. Chem.* **6**, 564–566 (2014). (News & Views)

L. CHEN, K. FURUKAWA, J. GAO, A. NAGAI, T. NAKAMURA, Y. DONG and D. JIANG, “Photoelectric Covalent Organic Frameworks: Converting Open Lattices into Ordered Donor-Acceptor Heterojunctions,” *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 9806–9809 (2014).

X. CHEN, N. HUANG, J. GAO, H. XU, F. XU and D. JIANG, “Towards Covalent Organic Frameworks with Predesignable and Aligned Open Docking Sites,” *Chem. Commun.* **50**, 6161–6163 (2014).

S. JIN, T. SAKURAI, T. KOWALCZYK, S. DALAPATI, F. XU, H. WEI, X. CHEN, J. GAO, S. SEKI, S. IRLE and D. JIANG, “Two-Dimensional Tetrathiafulvalene Covalent Organic Frameworks: Towards Latticed Conductive Organic Salts,” *Chem. –Eur. J.* **20**, 14608–14612 (2014). (Back Cover)

C. GU, N. HUANG, J. GAO, F. XU, Y. XU and D. JIANG, “Controlled Synthesis of Conjugated Microporous Polymer Films: Versatile Platforms for Highly Sensitive and Label-Free Chemo- and Bio-Sensings,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **53**, 4850–4855 (2014).

F. XU, X. CHEN, Z. TANG, D. WU, R. FU and D. JIANG, “Redox-Active Conjugated Microporous Polymers: A New Organic Platform for Highly Efficient Energy Storage,” *Chem. Commun.* **50**, 4788–4790 (2014). (Inside Front Cover)

Y. XU and D. JIANG, “Structural Insights into the Functional Origin of Conjugated Microporous Polymers: Geometry-Management of Porosity and Electronic Properties,” *Chem. Commun.* **50**, 2781–2783 (2014).

H. XU, X. CHEN, J. GAO, J. LIN, M. ADDICOAT, S. IRLE and D. JIANG, “Catalytic Covalent Organic Frameworks via Pore Surface Engineering,” *Chem. Commun.* **50**, 1292–1294 (2014). (Back Cover)

B-4) 招待講演

D. JIANG, “Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks: A Class of Covalent Polymers with Inherent Intra- and Intermolecular Orders,” Sino-German Symposium on π -Conjugated Nanomaterials for Catalysis and Clean Energy Applications, Berlin (Germany), April 2014.

D. JIANG, “Porous Organic Materials for Electric Energy Storage and Power Supply,” 248th ACS National Meeting & Exposition, San Francisco (U.S.A.), August 2014.

D. JIANG, “Covalent Organic Frameworks,” Symposium on Computational Materials for Catalysis and Photovoltaics, Suzhou (China), May 2014.

D. JIANG, “Design and Synthesis of Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks,” The 2nd International Symposium on Polymer Ecomaterials (PEM2014), Kunming (China), August 2014.

D. JIANG, “Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks,” IUPAC International Conference on Novel Materials and their Synthesis (NMS) & International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers (FCFP), Zhenzhou (China), October 2014.

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).

Japan-China 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).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Jilin University, Changchun, July 25–28, Organizer (2010).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Beijing Normal University, Beijing, October 6–9, Organizer (2011).

Japan-China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, IMS, Okazaki, Jan. 19–21, Organizer (2013).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Soochow University, Changchun, October 25–28, Organizer (2013).

B-10) 競争的資金

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).

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).

科研費基盤研究(A) 「共役多孔性高分子による特異分子空間の創出と機能開拓」 江 東林 (2012年–2015年).

C) 研究活動の課題と展望

二次元高分子及び多孔性共役ポリマーの謎に迫る。

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，構造生命科学

A-2) 研究課題：

- a) 高速 MAS および多重パルスを用いた ^1H - 固体 NMR による分子材料の構造解析
- b) 固体 NMR を用いた安定同位体非標識合成高分子の構造解析
- c) 固体 NMR 半定量的原子間距離測定を用いた脂質二重膜中の糖脂質分子会合状態の解析
- d) 固体 NMR 半定量的原子間距離測定を用いた脂質膜結合型生理活性ペプチドの構造および配座解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体分子などの固体有機試料では，強力な ^1H 同種核間磁気双極子相互作用が存在し，スペクトルが広幅化するため，一般に高分解能 ^1H スペクトルを得るのは難しい。しかし， ^1H 核は極めて高感度で，安定同位体標識が必要ないことから，近年測定法の開発が進められている。回転周波数が 30 kHz 以上の高速マジックアングルスピンング (MAS) を適用，または，多重パルスを適用することにより ^1H の同種核間磁気双極子相互作用を時間平均し，スペクトルの高分解能化が可能である。さらに強力なラジオ波を用いれば，これらの手法を組み合わせることも可能である。600 MHz NMR を用いて，高速 MAS 下での ^1H 測定，さらに 20 kHz 以下の回転周波数の MAS と多重パルスを用いた CRAMPS 法の検討を行っている。また，これらの手法を用いて，分子材料の解析を行っている。さらに，920 MHz 超高磁場 NMR を用いて，超高速 MAS 下で生体分子材料の分子近接性の解析を行っている。
- b) 多くの分子材料や合成高分子は溶媒に不溶である。MAS 下で 2 次元 ^1H - ^{13}C 異種核間相関 NMR を用いて，有機溶媒に不溶な合成高分子の構造，および，状態の解析を行った。同測定において， ^1H の同種核間磁気双極子相互作用を時間平均しながら分極移動を行い，短い接触時間を用いて ^1H 信号帰属を行い，長い接触時間を用いて中距離の分子間相関信号の観測を試みた。天然存在比の ^1H および ^{13}C 安定同位体を観測して，らせん状合成高分子とその分子内に包摂されている化合物との分子間 ^1H - ^{13}C 異種核相関信号の検出に成功した。これに基づき，複合体分子が包摂状態にあることの検証に成功した。また，固体 NMR を用いて，機能性高分子合成における各合成反応過程での分子の状態解析を行った。
- c) 固体 NMR を用いて，脂質二重膜中での糖脂質分子間の会合状態の検証を試みている。異なる部位を各々特異的に ^{13}C 安定同位体標識した糖脂質を混合し，DMPC 膜に組み込んだ試料を用いた。MAS 下で同種核間相関 NMR 法の測定を行い，脂質膜中での標識 ^{13}C 間の分子間相関信号を得ることにより，同糖脂質分子間の半定量的原子間距離の同定に基づく，分子近接性の解析を行っている。
- d) 固体 NMR を用いて，脂質二重膜上に結合した生理活性ペプチドの状態解析，および構造解析を行っている。 ^{13}C 安定同位体標識された生理活性ペプチドを DMPC 膜に結合させた試料を用いて，MAS 下で同種核間相関 NMR 法を用いて半定量的原子間距離測定に基づく分子の局所構造解析を行った。特定構造を有すると思われるアミノ酸部位由来の明瞭な分子内相関信号が観測され，信号の帰属と共に化学シフト値に基づく二次構造解析を行った。さらに，会合している隣接分子間の相対配座の解析を目的に，より長距離の分子間相関を得る条件での同 NMR 測定を行い，隣接分子間近接性の解析を行っている。

B-1) 学術論文

T. IJIMA, T. YAMASE, M. TANSO, T. SHIMIZU and K. NISHIMURA, “Electron Localization of Polyoxomolybdates with ϵ -Keggin Structure Studied by Solid-State ^{95}Mo NMR and DFT Calculation,” *J. Phys. Chem. A* **118**, 2431–2441 (2014).
T. ASAKURA, K. YAZAWA, K. HORIGUCHI, F. SUZUKI, Y. NISHIYAMA, K. NISHIMURA and H. KAJI, “Difference in the Structures of Alanine Tri- and Tetra-Peptides with Antiparallel β -Sheet Assessed by X-Ray Diffraction, Solid-State NMR and Chemical Shift Calculations by GIPAW,” *Biopolymers* **101**, 13–20 (2014).

B-6) 受賞，表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会 優秀若手ポスター賞 (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野別専門委員 (2004–2009).

日本核磁気共鳴学会評議員 (2009–2010, 2013–2014).

日本核磁気共鳴学会選挙管理委員 (2005).

学会の組織委員等

第27回生体系磁気共鳴国際会議 (ICMRBS) 実行委員, プログラム委員 (2013–).

第51回NMR 討論会プログラム委員 (2012).

学会誌編集委員

日本生物物理学会欧文誌 *Biophysics*, Advisory board (2005–2009).

Global Journal of Biochemistry, Editorial Board (2010–2013).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「非標識固体試料解析のための固体 NMR 新規測定法開発」西村勝之 (2013年–2015年).

科研費基盤研究(C), 「固体 NMR による新規室温磁場配向膜を用いた膜表面タンパク質脂質結合機構の解明」西村勝之 (2010年–2012年).

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).

(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).

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).

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).

科研費基盤研究(C), 「タンパク質分子内情報伝達の分子機構」谷生道一 (2012年–2014年).

C) 研究活動の課題と展望

固体NMRでは、安定同位体標識を前提とした測定法が多く開発されてきた。しかし、合成高分子や天然物など、安定同位体標識が困難で、かつ溶媒に不溶な分子が多数存在する。現在、天然存在比安定同位体を観測することにより、分子の状態、および構造を解析するための測定法の開発、および手法の確立を検討している。複数の協力研究プロジェクトを通して、多様な試料の解析を行う機会が増えた。今後、研究成果と同様な試料の解析に還元していきたいと考えている。

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) 有機エレクトロニクスの研究において，ホウ素原子の機能を利用した物質開発が注目されている。1,3-ジケトンBF₂構造ユニットを含む錯体は強い蛍光とともに高い電子受容性を示すことから，光増感色素や有機半導体材料として期待される。そこで，トリフェニルアミン色素にこの錯体ユニットを導入した新規なドナー- π -アクセプター系有機色素を設計・合成し，その構造をX線結晶構造解析により決定した。その光物性および電気化学的特性から，この色素は色素増感太陽電池用色素として有望であることが明らかとなった。
- b) ねじれた分子構造をもつ有機半導体材料を用いることにより，有機太陽電池の光電変換効率の向上や有機EL素子の高性能化が期待できる。そこで，4つのCF₃基をもち，ベンゾ-1,2,5-チアジアゾール骨格が二量化した分子を設計・合成し，その構造，物性を検討した。X線結晶構造解析の結果，2つのベンゾチアジアゾール骨格間が大きくねじれており，薄膜太陽電池のn型半導体として機能することを見いだした。

B-1) 学術論文

Y. MIZUNO, Y. YISILAMU, T. YAMAGUCHI, M. TOMURA, T. FUNAKI, H. SUGIHARA and K. ONO, “(Dibenzoylmethanato)boron Difluoride Derivatives Containing Triphenylamine Moieties: A New Type of Electron-Donor/ π -Acceptor System for Dye-Sensitized Solar Cells,” *Chem. –Eur. J.* **20**, 13286–13295 (2014).

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 (2003–2012).

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

められているということを示している。今後は、水素結合のみならず、ヘテロ原子間相互作用・C-H $\cdots$ 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に取り組みたい。また、ハロゲン原子と窒素原子あるいは π 電子系との間のノンコバレントな相互作用(C-X $\cdots$ N, 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。そこでこれを用いた分子集合体設計にも注目している。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ヒューリスティックな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、データマイニング的な結晶構造の解析にも興味を持っている。最後に、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。

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) 量子効果素子回路の単一分子内集積化法の開拓
- b) 単一分子ワイヤの伝導特性の系統的解明
- c) 巨大分子系の基板表面への精密設置法の開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 本研究では、「単一巨大分子骨格内に量子効果素子回路をまるごと集積化」するための逐次精密合成プロセスの開拓を目指している。昨年度までに、単電荷トンネル素子回路の根幹パーツ群（トンネル／静電接合，クーロン島，ワイヤ／アンカー）の系統的整備を進めてきた。本年度は、新学術領域「分子アーキテクニクス」におけるナノ半導体工学チームとの議論を受けて、「抵抗」パーツの開発を始めた。「抵抗」の精密設計の重要性は、もっぱら「伝導性の向上」を目指してきた分子素子分野では無視されてきた。しかし、ナノ電子回路の専門家とのネタ合わせから、実働可能な量子効果素子回路を目指す上で「トンネル確率を自在に調整・設定」するための受動素子は必須であると認識を改めた次第である。当然、前例は無く、最初のトライアルとして、単一障壁タイプと多段トンネル接合タイプとについて、1nm 級のを各種試作した。今後、これらを 10nm 長級の分子ワイヤ系に組み込み、その単一分子伝導特性の評価から、「抵抗」の設計法を整備していく段取りである。
- b) 電極／単一分子鎖／電極系における電荷輸送特性の解明と制御法の開拓を、阪大・夢田 - 山田 G，産総研・浅井 G らと実施している。本年度は、特に分子／電極接合部の軌道間カップリング強度について実験的知見を得るため、単一分子接合系の熱起電力の分子鎖長依存性を検討した。ゼーベック係数（透過係数の微分に比例）の比較から、分子／電極間カップリングはチオフェン 8 量体までは鎖長依存するが、それを超えるとほぼ一定になることが分かった。これより、「分子鎖自体の性質」の比較検討を行う場合、チオフェン 8 量体以上の分子鎖系で実施する必要があるとの指針が得られる。なお、ゼーベック係数はいずれも正であり、最高被占軌道を通じた伝導であることも確かめられた。また現在、非弾性トンネル分光法による検討も進めている。一方、発光中心や磁性中心を導入した機能性分子ワイヤの電子特性を評価するための合成／計測研究を京大・田中（一）G と実施中である。
- c) 機能集積化巨大分子系について、「基板の定位置に配置かつ固定化」するための方法論の開発、及び「基板上での構造／物性」を実験的に解明するための研究を進めている。昨年度までに、横浜・市立大の横山 G との共同研究により、エレクトロスプレー法を用いて 10nm ~ 120nm 長クラス的大型分子を平坦／清浄基板上に配置する手法を確立した。今年度は、東大・西原 G との共同研究により、特にシリコン基板上へ的大型分子固定化法の検討を進めた。そのために、ドナー性ヘテロ環ヨウ化物で分子末端を活性化したオリゴチオフェン類の新規開発を行った。この「末端活性化オリゴチオフェン」は、パラジウム触媒により水素終端シリコン基板に接合可能である事が確認できた。これにより、巨大分子デバイス系を、微細加工技術で構築したシリコンナノ構造体に直結し、「バルク系とのインターフェース確保」や「駆動力の供給」を行う可能性が開けたものと考えている。

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

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).

科研費基盤研究(B), 「単電子 / 正孔トンネルデバイス回路の単一分子内集積化のための分子開発」田中彰治 (2010年–2012年).

C) 研究活動の課題と展望

当研究室では, 世界に先駆け, 10nm×10nm クラスの単一分子内単電荷トンネル素子回路の構築のための汎用巨大分子合成法を整備してきた。現在, その実働を確認するための評価法の開発が急務となっている。東大・長谷川Gとのネタ合わせの結果, 独立駆動型多端子STMを用いて機能評価するためには, 50nm×50nm以上の分子サイズが必要との見積もりを受けた。よって, その要請に対応可能な「超大型」の汎用分子構築ブロックの新規開発を進めている。