

研究拠点形成事業
平成 28 年度 実施計画書
(平成 24～27 年度採択課題用)

A. 先端拠点形成型

1. 拠点機関

日本側拠点機関：	名古屋大学
(英国) 拠点機関：	エジンバラ大学
(カナダ) 拠点機関：	ウィンザー大学
(ロシア) 拠点機関：	ロシア科学アカデミー・シベリア支部・ノボシビルスク

2. 研究交流課題名

(和文)： 強相関分子系の新しい有機エレクトロニクス
(交流分野： 化 学)

(英文)： Organic Electronics of Highly-Correlated Molecular Systems
(交流分野： Chemistry)

研究交流課題に係るホームページ：<http://advmat.chem.nagoya-u.ac.jp/core2core.html>

3. 採用期間

平成 25 年 4 月 1 日 ～ 平成 30 年 3 月 31 日

(4 年度目)

4. 実施体制

日本側実施組織

拠点機関：名古屋大学

実施組織代表者 (所属部局・職・氏名)：総長・松尾 清一

コーディネーター (所属部局・職・氏名)：大学院理学研究科・教授・阿波賀 邦夫

協力機関：北海道大学、千葉大学、関西学院大学、東京農工大学

事務組織：研究支援課、理学部事務部、

相手国側実施組織 (拠点機関名・協力機関名は、和英併記願います。)

(1) 国名：英国

拠点機関：(英文) Edinburgh University

(和文) エジンバラ大学

コーディネーター (所属部局・職・氏名)：

(英文) School of Chemistry・Professor・ROBERTSON, Neil

協力機関：(英文) University of St Andrews

(和文) セントアンドリュース大学

協力機関：(英文) Imperial College London

(和文) インペリアル・カレッジ・ロンドン

協力機関：(英文) University of Strathclyde

(和文) ストラスクライド大学

経費負担区分 (A型)：パターン1

(2) 国名：カナダ

拠点機関：(英文) University of Windsor

(和文) ウィンザー大学

コーディネーター (所属部局・職・氏名)：

(英文) Department of Chemistry & Biochemistry・Professor・RAWSON, Jeremy

協力機関：(英文) University of Guelph

(和文) ゲルフ大学

協力機関：(英文) McGill University

(和文) マギル大学

経費負担区分 (A型)：パターン1

(3) 国名：ロシア連邦

拠点機関：(英文) Russian Academy of Sciences, Siberian Branch, Novosibirsk

(和文) ロシア科学アカデミー・シベリア支部・ノボシビルスク

コーディネーター (所属部局・職・氏名)：

(英文) Russian Academy of Sciences, Siberian Branch, Novosibirsk・Professor・ZIBAREV,
Andrey

協力機関：(英文) N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences

(和文) ロシア科学アカデミー・ゼリンスキー有機化学研究所

協力機関：(英文) Ivanovo State University of Chemical Technology,

(和文) イバノバ州立大学

経費負担区分 (A型)：パターン1

5. 全期間を通じた研究交流目標

1960年代の日本と英国に端を発する有機半導体の研究は、有機金属・超伝導体、有機磁石などへと発展する一方、有機半導体が電界発光素子やトランジスターに利用される有機エレクトロニクス的一大分野が開花しつつある。しかしその現状は、無機半導体エレクトロニクスの作動機構がそのまま有機系にコピーされたようなものが多く、有機系の長所を活かした新しい発展が待望されている。

本事業では、日本－英国－カナダ－ロシアの研究者が、「物質合成」「基礎物性探索」「デバイス展開」研究において役割分担し、有機伝導体や磁性体研究を通じて見出された有機系に顕著な絶縁化要因、すなわち電子－格子緩和、電荷不均化や電子間反発などを起点とするデバイス特性を追求し、真に有機物的な有機エレクトロニクスを追求する。その一方、トランジスターや光電セル構造をつくり込むことによって有機伝導体・磁性体に効率的な電荷注入を行い、これによって新たな分子物性の開拓を目指す。すなわち、「有機伝導体・磁性体研究」⇔「有機エレクトロニクス研究」の双方向研究から、基礎と応用において win-win の革新的成果をもたらす。

さらに本事業では、日本側で推進されているさまざまな人材育成や国際化プログラムと連携することによって、俯瞰力・展開力・国際性が必要とされる「有機分子物性・有機エレクトロニクス」の将来を担う若手人材を育成する。

6. 前年度までの研究交流活動による目標達成状況

本事業は、当初、国内3大学（名古屋大、北海道大（2グループ）、千葉大）と国外3大学・国外1研究所（英国：エジンバラ大学、セントアンドリュース大学、カナダ：ウィンザー大学、ロシア：ノボシビルスク有機化学研究所（現 ロシア科学アカデミー・シベリア支部・ノボシビルスク））のグループにより開始されたが、H26年度に英国のインペリアルカレッジロンドンおよびストラスクライド大学の2グループが、H27年度にカナダのゲルフ大学およびマギル大学の2グループとロシアのロシア科学アカデミー・ゼリンスキー有機化学研究所およびIvanova州立大学の2グループ、さらには国内より関西学院大学と東京農工大の2グループが参加し、国内5大学（6グループ）、国外8大学・国外2研究所の合計16グループへと拡大し、研究交流活動を推進している。以下、研究交流活動による目標達成状況について詳細を述べる。

これまでに、日本側の博士研究員や大学院生の短期滞在（H26年度：名大からウィンザー大学、名大および北大からインペリアルカレッジロンドン、H27年度：名大からインペリアルカレッジロンドン）により、新規チアジラジカル類の合成やTTFおよびフタロシアニン類の高品質薄膜の作製を行うとともにその実験技術を習得することで、日本においてそれらを用いた新規物性の開拓やデバイス作製、さらには新しい炭素同素体の有する結晶構造を有機ラジカル分子で実現した。また、海外から日本への長期滞在（H25年度：SKABARA（ストラスクライド大）が名大に滞在、H25、H26、H27年度：エジンバラ大から名大（大学院生、学部生）、H26年度：ロシアから名大（博士研究員））を通して、本事業の核となるジチオレン金属錯体の薄膜作成や磁気抵抗特性の発現、有機分子を用いた光応答セルの作

製と高効率な光電流の発生に成功し、さらに本事業を発展させる新規物質群である環状高分子や dendritic 錯体の開拓を行った。このような研究者の滞在による共同研究だけではなく、カナダやロシアのグループによる新規チアジラジカル類、イギリスやカナダのグループによる酸化還元活性な有機分子の提供によっても研究を進め、日本の研究グループがそれらの FET 特性や二次電池特性などのデバイス特性を見出した。なお、国内 5 大学間（名大－北大－千葉大－関西学院大－東京農工大）の研究交流も密に行っており、博士研究員や大学院生の研究機関間の行き来やサンプル提供により、有機強相関系物質のデバイス作製や物性測定に関する研究が進展している。

このような共同研究とともに、セミナーや研究室見学、研究打ち合わせのための相互訪問も多数実施している。例えば、H27 年度は、阿波賀がカナダの 2 グループ（ゲルフ大学およびマギル大学）とイギリスの 2 グループ（ストラスクライド大学およびエジンバラ大学）を、吉川がストラスクライド大学を訪問してセミナーを行うとともに、チアジラジカル類や酸化還元活性な有機分子に関する共同研究の打合せを行った。また、エジンバラ大の ROBERTSON は 2 度来日し、名古屋大および東京農工大にてセミナーや有機太陽電池関連に関する共同研究の打ち合わせを行い、名古屋大に滞在しているエジンバラ大学生の指導を行った。カナダの PREUSS も名古屋を訪問し、セミナーとチアジラジカル関連の電子構造などに関して打ち合わせを行った。一方で、年次会議（H25 年度：ロンドン、H26 年度：小樽、H27 年度：モスクワ）や関連する国際会議は、お互いの研究成果を報告するとともに、各グループの若手研究者（主に大学院生や博士研究員）をエンカレッジし、彼らが滞在型の共同研究を計画するうえで非常に重要な役割を果たした。このように本事業は若手研究者の育成面でも大きな貢献をし、彼らの国際交流や研究に対する意欲を高めることにも役立った。

上記のような研究交流を通して、交流（物質、人、情報のサイクル）が十分確立され、「新規強相関分子系の合成と物性開拓」、「強相関分子の有機エレクトロニクスへの応用」、「新規電極活物質の創製と二次電池への応用」の 3 つの共同研究について、基礎と応用の両方で研究が順調に進んだ結果、名大－エジンバラ大の研究成果は英国の学術誌において公表するに至っており（DOI: 10.1039/c6cp00093b）、上述の名大－インペリアルカレッジロンドンの共同研究についても国際的な学術誌に共著論文として投稿するに至っている。その他の共同研究についても国際会議や国内の学術会議において共著での成果公表がなされ始めている。また、大学院生の博士論文や修士論文にも成果の一部が取り込まれるなど、交流実績が目に見える形で現れつつある。

最後に、研究以外の交流成果として、名古屋大学理学研究科とエジンバラ大学化学科間の学術協定の締結とエジンバラ大で博士号を取得した 2 名の外国人研究員の名大助教就任があげられる。前者は、この制度を利用して 1 学期を超える大学院生の派遣・受入が可能になったという点で非常に意義があり、H26 年度からエジンバラ大の学生を受け入れ、本事業の加速に貢献している。また、後者については、エジンバラ大との学術協定も含めた海外大学との共同研究を円滑に進めるうえで必要不可欠な人材となっている。

7. 平成28年度研究交流目標

＜研究協力体制の構築＞

H27年度途中より、ロシア・ロシア科学アカデミー・ゼリンスキー有機化学研究所(RAKITIN, Olge)、ロシア・Ivanova 州立大学(STUZHIN, Pavel A.)、東京農工大(帯刀陽子准教授)が協力機関として加わり、国内5大学(6グループ)、国外8大学・国外2研究所の合計16グループでH28年度は事業を推進する。これまでにSTUZHINとはフタロシアニン類縁体であるポルフィラジン化合物に関する共著論文を報告しており、共同研究R1「新規強相関分子系の合成と物性開拓」およびR2「強相関分子の有機エレクトロニクスへの応用」において、このようなポルフィラジン化合物を用いた物性開拓とFETなどの有機デバイスにおける高い特性を見出せる可能性が高い。また、帯刀はROBERTSON(エジンバラ大)の研究室に約1年間の留学経験があり、TTF部位などを含む有機高分子の合成と太陽電池などへの応用に関連して、現在も継続的な共同研究を行っていることから、本事業でも共同研究R1およびR2で大きな進展が見込める。このように、新たなメンバーが加わることにより、共同研究が大幅に進展し、より多くの成果公表が期待される。

上記のような協力体制のもと、H28年度は研究成果の公表に向け、より密な研究打ち合わせを要すると考え、4月10-12日の日程でWOOLINS教授のお世話のもと、セントアンドリュースにて本事業の第4回ワークショップを、9月26-30日の日程でZIBAREV教授のお世話のもと、ノボンビルスクにて本事業の第5回ワークショップを開催する。いずれのワークショップにも、本事業参加のグループリーダー全員と若手スタッフ、大学院生など総勢30~50名程度が参加することで、本事業に関連する研究成果の発表を行い、今後の共同研究、成果のまとめ方などについて議論する。

このようなワークショップとともに、お互いの研究グループへの訪問や短期・長期滞在を実施する。日本側からは、上記のセントアンドリュースでのワークショップの機会を利用して、中村(北大)と大学院生らがエジンバラ大とストラスクライド大を1週間程度訪問し、R1やR2に関する研究打ち合わせと簡単な実験を行う。また、名古屋大から大学院生や博士研究員がインペリアルカレッジロンドンやエジンバラ大に数か月滞在し、R1やR2に関連する有機ラジカルやフタロシアニン系物質の良質な薄膜作製を行い、高性能なデバイス特性を見出す。一方で、海外からは、カナダのRAWSONが、9月に名古屋で開催される分子磁性国際会議サテライトシンポジウムにて招待講演を行い、その後、名古屋大においてR1およびR2の鍵となる強相関有機系物質チアジラジカルの合成について大学院生らの指導を行う予定である。また、エジンバラ大の交換留学生2名が、名大-エジンバラ大の学術交流協定を利用して6月まで滞在し、R1やR2に関連する光応答セル関連の研究を遂行する。これに応じて、エジンバラ大のROBERTSONが6月に名古屋大を訪問し、エジンバラ大学生と面談を行い、その機会にセミナーと本事業の打合せを行う。なお、継続的に10月以降もエジンバラ大からは新たな学生を受け入れる予定である。上記に加えて、海外のグループから、大学院生や博士研究員を日本の各グループに受け入れ、本事業の出口となる有機強相関係物質の新奇物性と高性能なデバイス特性に関する成果を得る。

以上のように、これまでと同規模の交流を行う予定であるが、H28年度は、ここ3年間の協

力体制をベースに、有機カルコゲン-窒素化合物、ジチオレン金属錯体、新規チアジラジカル、有機高分子、 K_4 構造に結晶化する三角分子ナフタレンジイミド (NDI)、金属有機構造体 (MOF) など、これまでに開発してきた分子と見出してきた FET、光応答セル、電池特性などのデバイス特性をもとに、昨年度加わった新たな協力機関との連携により成果公表に向けた取り組みと交流を積極的に行っていく。

＜学術的観点＞

本事業では日本-英国-カナダ-ロシアの研究者が、「物質合成」「基礎物性探索」「デバイス展開」研究において役割分担し、有機伝導体や磁性体研究を通じて見出された有機強相関系に顕著な絶縁化要因である電子-格子緩和、電荷不均化や電子間反発などを起点とするデバイス特性を検討し、真に有機物的な有機エレクトロニクスを追求することを目標としてきた。前年度までに、有機カルコゲン-窒素化合物、ジチオレン金属錯体、新規チアジラジカル、有機高分子、 K_4 構造に結晶化する三角分子ナフタレンジイミド (NDI)、金属有機構造体 (MOF) など、強相関や高次元性といった点で特徴的な電子構造や結晶構造をもつ様々な系を開発してきた。また、これらを用いて、特徴的な FET、光応答セル、電池特性などのデバイス特性を得ている。

H28 年度は、前年度までの成果をもとに、R1「新規強相関分子系の合成と物性開拓」、R2「強相関分子の有機エレクトロニクスへの応用」、R3「新規電極活物質の創製と二次電池への応用」の3つの共同研究テーマを実施する。その過程で、「物質合成」に関して、強相関や高次元性など、特徴的な電子構造や結晶構造をもつ有機ラジカル塩、有機高分子、金属有機構造体 (MOF) が新規に開発される。また、そこでは、伝導性、磁性、誘電性といった様々な新奇物性の発現が考えられる。

一方で、「デバイス特性」について、環状チアジラジカルなどの強相関有機分子を利用した FET におけるバンド伝導的な挙動だけではなく、アントラセン-TCNQ 単結晶 CT 錯体などを用いたバイポーラー FET において、その特性が分子のダイナミクスによって変化するという新しい現象が期待される。このような FET 特性以外に、強相関有機分子の単分子膜ではバルク結晶とは異なる、極めて特異な強相関構造が得られるなど、有機薄膜を用いることで新しい研究の展開が可能である。例えば、ポリチオフェンや C60 薄膜を積層した光応答セルでは、誘電体層を様々に変えることで、新しい原理に基づいた高速かつ高出力な光過渡電流が観測される。このような現象は、昨年度より加わった STUZHIN が得意とするフタロシアニン類縁体を用いることで赤外領域の光でも可能になると考えられ、光通信などの領域で大きなインパクトを与えられるであろう。また、ROBERTSON や帯刀らは、このような化合物や原理を用いて高効率な太陽電池の創製にも取り組む。

上記のような有機エレクトロニクスに加え、高いレドックス活性を有する新奇 MOF、COF、有機高分子を正極材料とすることで、安定かつ高容量な二次電池特性が見出されることが期待される。さらに、これらの固体電気化学反応中の磁性などの物性を operando 計測することにより、電気化学によって制御される新奇な固体物性が実現される。

このように、学術的な観点から、本事業に「有機薄膜」「光過渡電流」「MOF」「固体電気化学」などの新しいキーワードが加わり、基礎から応用まで幅広く、強相関分子系の新しい

有機エレクトロニクスを展開できる。また、連携グループからの試料提供や技術の授受によりさらなる発展が見込める。

<若手研究者育成>

4月および9月に開催する本事業のワークショップに若手教員（助教クラス）および博士研究員や大学院生を多数参加させ、成果の発表や英国、カナダ、ロシアから参加する数十名の学生及び研究者との交流を行い、積極的な議論を通して、各グループへの滞在や若手研究者独自の着想に基づいた新しい共同研究の芽を育む。また、このような経験を通して若手研究者の英語によるコミュニケーション能力を上昇させる。

前年度までに、日本側の若手研究者は、有機強相関物質の合成やそれを用いた良質なデバイス作製（薄膜作成）に関する共同研究において、海外のグループに滞在するなどして、合成および成膜技術の習得を行った。H28年度は、これらの活動を通して得られた成果の公表に向けた精緻な実験と議論を行う。その結果、研究だけではなく、その公表過程について若手研究者は学ぶことができる。また、海外のグループからは、エジンバラ大の学生が、継続的に名古屋大に長期滞在予定であり、本事業に関連する研究を行ってもらうことで、新しい技術や知識を習得し、エジンバラ大での学位取得へと結びつける。

なお、日本および海外の大学院生の博士論文や修士論文にも本事業の成果の一部が取り込まれるなど、交流実績が目に見える形で現れつつあり、例えば、日本側学生の学振特別研究員（JSPS DC1、DC2）の採択などへとつながっている。このように本事業は若手研究者の育成面でも機能している。今後は、各グループに在籍する日本人および外国人博士研究員、博士課程学生のアカデミックポスト獲得に向け、後述の博士課程教育リーディングプログラムとも連携しながら、より一層の努力をする。

<その他（社会貢献や独自の目的等）>

日本側の各グループにおいては、各大学で開催されるホームカミングデイ、オープンキャンパスといった研究公開の機会を利用し、広く一般の方にも本事業の目的と内容、本研究成果を知ってもらう。将来的には、本研究で得られた成果の公開講演会の開催なども視野に入れながら、パンフレットの作製などを行うことで社会貢献への対応としたい。また、スーパーサイエンスハイスクールや高校への出前講義、さらにはJSPS ひらめき☆ときめきサイエンスを利用した小中高生への実験デモなどでも、本事業で得られた研究成果の紹介をして、若い世代も含め広く認知してもらうことにより、科学啓蒙活動の一環とすることができればと考えている。

また、本事業において構築したエジンバラ大学との協定や信頼関係を全学レベルに引き上げることを計画している。具体的には、H28年3月に申請を行い、10月に発足することを目指して、ジョイント・ディグリー制度の制定に努力している。参加予定は、名古屋大学理学研究科－物質理学専攻（化学系）、同（物理系）、生命理学専攻、素粒子宇宙物理学専攻と、エジンバラ大学－化学科、生物学科、物理学科である。日本人学生にとって、名大とエジンバラ大の学位の同時取得は極めて魅力的であろう。これが、名古屋大学の更なる

国際化に大きく寄与するもの考えている。

なお、本事業のコーディネーターである阿波賀は、「名古屋大学博士課程教育リーディングプログラム（グリーン自然科学国際教育研究プログラム（IGER）」のコーディネーターも務めており、この学位プログラムと本事業の連携をより加速させ、中長期派遣やセミナーなどによって博士課程学生の教育に有効に役立てる。また、阿波賀がセンター長を務める物質科学国際研究センターの新事業「統合物質創薬化学推進機構（H28～）」とも連携し、研究情報交換や研究員交流を促進する。

8. 平成28年度研究交流計画状況

8-1 共同研究

整理番号	R-1	研究開始年度	平成25年度	研究終了年度	平成29年度
研究課題名	(和文) 新規強相関分子系の合成と物性開拓 (英文) Synthesis and Characterization of Highly-Correlated Molecular Systems				
日本側代表者 氏名・所属・職	(和文) 阿波賀邦夫・名古屋大学・教授 (英文) AWAGA, Kunio・Nagoya Univ.・Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) RAWSON, Jeremy・University of Windsor・Professor ZIBAREV, Andrey・Russian Academy of Sciences, Siberian Branch, Novosibirsk・Professor WOOLINS, John Derek・University of St. Andrews・Professor				
28年度の 研究交流活動 計画	<p>日本、ロシア、カナダ、イギリスの各グループが協力し、本共同研究課題の縦糸となる強く多次元的な分子間相互作用とラジカル安定性を有する新しい有機分子の合成を行うとともに、その基礎物性やデバイス特性を引き続き検討する。</p> <p>これまでのカナダ滞在で習得した合成技術により、前年度に見出した新しい炭素同素体と同一の K_4 構造をもつ有機アニオンラジカル塩ナフタレンジイミドの研究をさらに展開する。具体的には、類似体の合成や電解法による様々なラジカル塩の作製を考えている。また、H28年度より本共同研究に加わったイギリスのグループが有する有機カルコゲン系分子についても精力的に研究を行う。なお、お互いのグループから様々なラジカル関連物質のやり取りを行い、その基礎物性（磁性、伝導性）を検討する。</p> <p>カナダの RAWSON が、9月に名古屋で開催される分子磁性国際会議サテライトシンポジウムにて招待講演を行い、その後、名古屋大において R1 および R2 の鍵となる強相関有機系物質チアジルラジカル合成について大学院生らの指導を行う予定である。</p>				
28年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果	<p>有機アニオンラジカル塩ナフタレンジイミド類似体の合成や電解法による様々なラジカル塩の作製を行うことにより、この分子の特異な結晶構造に由来したバンド構造を起因とする様々な新奇物性（磁性や伝導性）が期待される。</p> <p>また、イギリスのグループが有する有機カルコゲン系分子も研究対象とすることで、研究の幅が広がる。日本のグループは、有機強相関系分子群の結晶化に長けていることから、これまでに手が付けられていない分子群の結晶化を実現できれば、新奇な物性が見出される可能性は高い。</p> <p>なお、RAWSON 教授が名古屋を訪問されることで、この分野の最新の動向に関する情報を得ることができ、本事業の核となる強相関有機系物質チアジルラジカル系分子の合成について、さまざまな助言を受けることができ、研究が進展する。</p>				

平成24～27年度採択課題

整理番号	R-2	研究開始年度	平成25年度	研究終了年度	平成29年度
研究課題名	(和文) 強相関分子の有機エレクトロニクスへの応用 (英文) Application of Highly-Correlated Molecular Systems to Organic Electronics				
日本側代表者 氏名・所属・職	(和文) 阿波賀邦夫・名古屋大学・教授 (英文) AWAGA, Kunio・Nagoya Univ.・Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) ROBERTSON, Neil・Edinburgh Univ.・Professor HEUTZ, Sandrine・Imperial College London・Senior Lecturer STUZHIN, Pavel A.・Ivanova State Univ.・Professor				
28年度の 研究交流活動 計画	<p>英国と日本、ロシアの各グループが協力し、本研究提案の出口となる特徴的な電子構造を持つ分子を用いた FET、光電セル、太陽電池などのデバイス作製とその物性測定を行う。</p> <p>これまでの有機ラジカル分子を用いた FET 特性などの研究結果を基に、分子運動による相転移などが知られるアントラセン-TCNQ 単結晶 CT 錯体などを用いた FET の作製や強相関有機分子の単分子膜を用いたデバイス作製に取り組む。</p> <p>また、強相関分子の有機エレクトロニクスの一つの大きな出口として、様々な有機分子や有機高分子の薄膜から成る光応答セルを作製し、その高効率な光過渡電流の取り出しを実現する。このようなデバイスに適した物質として、H28 年度より本共同研究に加わるロシアの STUZHIN が有するフタロシアニン類縁体があげられ、これらを用いたセル作製にも取り組む。また、ROBERTSON や帯刀らは、このような化合物や原理を用いて高効率な太陽電池の創製にも取り組む。</p> <p>なお、4月のワークショップの後、北大のメンバーは、エジンバラ大やストラスクライド大に立ち寄り、セミナー、打ち合わせ、実験を行う。名大メンバーも良質な薄膜作製のため、ロンドンに短期滞在する。一方で、名大-エジンバラ大の学術交流協定により、エジンバラ大の学生が継続的に名大に長期滞在して、上記の研究を行う。</p>				
28年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果	<p>上述のアントラセン-TCNQ 単結晶 CT 錯体などを用いたバイポーラーFETでは、その特性が分子のダイナミクスによって変化するという新しい現象が期待される。また、強相関有機分子の単分子膜ではバルク結晶とは異なる、極めて特異な強相関構造が得られる。一方で、光応答セルの研究では、誘電体層を様々に変えることで、新しい原理に基づいた高速かつ高出力な光過渡電流の観測が期待され、さらにフタロシアニン類縁体を用いることで赤外領域の光でもこのような現象が可能になると考えられ、光通信などの領域で大きなインパクトを与えられるであろう。</p> <p>なお、相互の研究グループ訪問により、成果公表に向けた研究が大きく進展すると考えられるとともに、エジンバラ大の学生が名古屋大で本事業関連の有機エレクトロニクス研究を行うことで、エジンバラ大での学位取得にもつながる。</p>				

整理番号	R-3	研究開始年度	平成26年度	研究終了年度	平成29年度
研究課題名	(和文) 新規電極活物質の創製と二次電池への応用 (英文) Development of New Electrode Active Materials and Applications to Rechargeable Batteries				
日本側代表者 氏名・所属・職	(和文) 阿波賀邦夫・名古屋大学・教授 (英文) AWAGA, Kunio・Nagoya Univ.・Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) SKABARA, Peter・Strathclyde Univ.・Professor PEREPICHKA, Dmitrii・McGill Univ.・Professor				
28年度の 研究交流活動 計画	<p>イギリス、カナダ、日本のグループが協力し、イギリスやカナダのグループが有する酸化還元活性な有機分子や導電性有機高分子を対象に、それらを正極活物質とする二次電池特性の検討を行う。</p> <p>メールなどを用いた密なディスカッションにより、SKABARA および PEREPICHKA グループに、理論容量が大きくかつ電解質イオンの拡散が起きやすく、伝導性のある機能性有機高分子を新規に開発してもらい、日本では、電解液など様々な条件を検討しながら、それらを正極活物質とする二次電池において最高性能が得られるような努力をする。また、リチウム電池だけではなく、ナトリウム電池なども試みる。</p> <p>さらに、日本のグループでは、上記の結果を基に、高いレドックス活性を有する新奇 MOF、COF などの開発を行い、それらを正極材料とする安定かつ高容量な二次電池特性を見出すとともに、電池反応の operando 計測による機構解明にも取り組む。</p>				
28年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果	<p>カナダおよびイギリスのグループより提供された TTF 骨格を含む酸化還元活性な新規 π 共役有機高分子を正極活物質とするリチウム電池では、高い容量などが期待される。</p> <p>また、これらの知見を基に、日本で新たに開発される MOF や COF では、高い容量とともに、その強固な構造に由来した安定性も期待される。さらに、operando 計測により解明される電池反応機構から、より高い性能を有する電池材料の設計が可能となる。</p> <p>このような酸化還元活性材料は、電池反応において、様々な酸化還元状態（電子状態）を有することが期待され、そのような状態の新奇物性にも注目が集まる。</p> <p>上記のように、サンプルのやり取りやメールによる詳細な議論を通して、高性能な有機電極材料の創製と高い二次電池特性という成果を得ることができる。</p>				

8-2 セミナー

整理番号	S-1
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「強相関分子系の新しい有機エレクトロニクス」
	(英文) JSPS Core-to-Core Program “CtC/Leverhulme Joint Workshop, St. Andrews 2016”
開催期間	平成 28年 4月 10日～12日 (3日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) イギリス・セントアンドリュース・セントアンドリュース大学
	(英文) UK, St.Andrews・University of St. Andrews
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 阿波賀邦夫・名古屋大学・教授
	(英文) AWAGA, Kunio・Nagoya Univ.・Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外での開催の場合)	(英文) WOOLINS, John Derek・University of St. Andrews・Professor

参加者数

派遣先 派遣元		セミナー開催国 (イギリス)	
		A.	B.
日本 〈人／人日〉	A.	12/ 60	
	B.		
英国 〈人／人日〉	A.	7/ 21	
	B.	10	
カナダ 〈人／人日〉	A.	2/ 10	
	B.		
ロシア 〈人／人日〉	A.	5/ 25	
	B.		
合計 〈人／人日〉	A.	26/ 116	
	B.	10/	

- A. 本事業参加者 (参加研究者リストの研究者等)
B. 一般参加者 (参加研究者リスト以外の研究者等)

※日数は、出張期間 (渡航日、帰国日を含めた期間) としてください。これによりがたい場合は、備考欄を設け、注意書きを付してください。

<p>セミナー開催の目的</p>	<p>本事業のワークショップであり、そこでは、本事業に参加する各国の主な研究者が顔を合わせ、研究成果を発表するとともに、綿密な議論を行い、研究進行状況の確認と今年度の共同研究計画を密に打ち合わせることを主な目的とする。また、それに伴う各国の若手研究者の交流と育成も重要な目的である。</p>		
<p>期待される成果</p>	<p>普段はお互い会う機会の少ない本事業参加メンバーが本セミナーで直に顔を合わせて、これまでの研究状況や課題、共同研究の状況を確認し、今年度の共同研究計画をさらに発展させるうえで良い影響を与えることが期待される。また、それぞれのグループに短期および長期滞在して共同研究を行う予定である海外の若手研究者と国内の研究者が、本セミナーでお互いに交流を深めることにより、刺激を受けるとともに、密な連携研究を行うことが可能になると期待される。</p>		
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>本事業の日本側責任者である阿波賀（名大）を中心に、セントアンドリュース大学の WOOLINS, John Derek やエジンバラ大学の ROBERTSON, Neil らの助けを借りながら、会場の設営やプログラムのアレンジなどを行う。</p>		
<p>開催経費 分担内容 と概算額</p>	<p>日本側</p>	<p>内容 外国旅費 消費税</p>	<p>金額 3,000,000 円 230,000 円 合計 3,230,000 円</p>
	<p>(英 国) 側</p>	<p>内容 会議費 国内旅費</p>	
	<p>(カナダ) 側</p>	<p>内容 外国旅費</p>	
	<p>(ロシア) 側</p>	<p>内容 外国旅費</p>	

整理番号	S-2
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「強相関分子系の新しい有機エレクトロニクス」
	(英文) JSPS Core-to-Core Program “CtC Workshop, Novosibirsk 2016“
開催期間	平成 28年 9月 26日～30日 (5日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) ロシア・ノボシビルスク・ロシア科学アカデミー・ノボシビルスク
	(英文) Russia, Novosibirsk, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 阿波賀邦夫・名古屋大学・教授
	(英文) AWAGA, Kunio・Nagoya Univ.・Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外での開催の場合)	(英文) ZIBAREV, Andrey・Russian Academy of Sciences, Novosibirsk・Professor

参加者数

派遣先 派遣元	セミナー開催国 (ロシア)	
	A.	B.
日本 〈人／人日〉	12 / 60	
英国 〈人／人日〉	7 / 35	
カナダ 〈人／人日〉	2 / 10	
ロシア 〈人／人日〉	10 / 30	
	15	
合計 〈人／人日〉	31 / 135	
	15 /	

- A. 本事業参加者 (参加研究者リストの研究者等)
 B. 一般参加者 (参加研究者リスト以外の研究者等)

※日数は、出張期間 (渡航日、帰国日を含めた期間) としてください。これによりがたい場合は、備考欄を設け、注意書きを付してください。

<p>セミナー開催の目的</p>	<p>本事業の H28 年度第二回目ワークショップであり、ここでは、本事業に参加する各国の主な研究者が集まり、今年度の研究成果状況を確認して、以後の共同研究計画を密に打ち合わせることを目的とする。また、それに伴う各国の若手研究者間の交流も重要な目的である。</p>		
<p>期待される成果</p>	<p>本事業参加メンバーが本セミナーで直に顔を合わせて、これまでの研究状況や課題、共同研究成果を確認し、最終年度に向けて、成果の取りまとめや公表に取り組むうえで非常に良い影響を与えることが期待される。また、それぞれのグループに短期および長期滞在して行った共同研究の成果状況を確認し、成果の取りまとめに必要な実験や議論などを整理する良い機会になると考えられる。</p>		
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>本事業の日本側責任者である阿波賀（名大）を中心に、ロシア科学アカデミー・ノボシビルスクの ZIBAREV, Andrey やロシア科学アカデミーN.D.Zelinsky 有機化学研究所所長の EGOROV, Mikhail P. らの助けを借りながら、会場の設営やプログラムのアレンジなどを行う。</p>		
<p>開催経費 分担内容 と概算額</p>	<p>日本側</p>	<p>内容 外国旅費 消費税</p>	<p>金額 3,000,000 円 230,000 円 合計 3,230,000 円</p>
	<p>(英 国) 側</p>	<p>内容 外国旅費</p>	
	<p>(カナダ) 側</p>	<p>内容 外国旅費</p>	
	<p>(ロシア) 側</p>	<p>内容 会議費 国内旅費</p>	

8-3 研究者交流（共同研究、セミナー以外の交流）

所属・職名 派遣者名	派遣・受入先 (国・都市・機関)	派遣時期	用務・目的等
名古屋大学 教授 阿波賀邦夫	中国・南京	7月上旬	ICPP-9 国際学会において本事業の研究 成果を招待講演で発表し、同学会に参加 する Stuzhin 教授と研究打ち合わせ

8-4 中間評価の指摘事項等を踏まえた対応

中間評価では、大きく分けて、若手研究者の滞在型交流と育成を主とする今後の研究拠点体制に関する事項と、共同研究の具体性及び成果公表を主とする今後の研究に関する事象の二点が指摘された。これらを考慮して、今後どのような対応を行うかについて以下に述べる。

まず、相手国側からの若手研究者の積極的な受け入れや中長期スパンでの研究者交流についてであるが、例えば、名古屋大グループでは、現在、3名の外国人助教と2名の外国人博士研究員が在籍しており、今後も積極的に、本事業の海外グループで学位を取得した研究者の中長期的な受け入れを行う。学生に関しては、本事業において構築した名古屋大-エジンバラ大学の協定をベースに、H28年度半ばにも名古屋大とのジョイント・ディグリー制度が施行される。これにより、本事業の中核となるエジンバラ大からは継続的に日本グループへの長期滞在が可能となり、本事業に関連する研究などを行うことで、エジンバラ大の学生にはエジンバラ大の修士号を取得できるというメリットが生まれる。また、日本人学生にとっても、エジンバラ大に滞在して研究を行うことで、名大とエジンバラ大の学位を同時取得できる可能性が広がり、極めて魅力的なものとなる。一方で、エジンバラ大以外からの学生の日本への滞在については、現状、海外グループのマッチングファンドなどによってのみ可能であり、海外グループにはマッチングファンドの獲得とそれを利用した日本への派遣を積極的に呼び掛ける。

L大学院プログラムとの連携による若手研究者の育成、拠点研究機関での研究体制の充実や拠点機能の適切な引継ぎについてであるが、下記のように考えている。本事業のコーディネーターである阿波賀がコーディネーターを務める「名古屋大学博士課程教育リーディングプログラム（グリーン自然科学国際教育研究プログラム（IGER）」では、海外での中長期滞在や研究上の表彰などを達成することで、プログラム修了証書を手渡すなど、大学院生をエンカレッジしている。すなわち、名古屋大の博士課程学生は、本事業によって海外で滞在研究を行って成果を上げれば、上記プログラムでも認定されることになり、本事業との相乗効果が大いに期待できる。また、これらは、大学院学生がJSPS特別研究員に採用されるうえでも重要であり、実際に本事業に参加している博士課程学生の採用につながっていることから、今後も積極的にL大学院との連携を行う。なお、L大学院プログラムによって、本事業参加の海外研究者の日本でのセミナーを頻繁に企画することも連携の大きな魅力であり、継続していく。一方で、拠点機能の引継ぎについてであるが、本事業終了後は、阿波賀がセンター長を務める名古屋大学物質科学国際研究センターに事務機能

を移して、将来にわたって機能する国際研究教育拠点の構築を目指す。

続いて、本事業共同研究の具体性および独創的な研究成果の創出について述べる。本事業1～2年度は、スクリーニング的な研究に終始していたため、成果公表につながらなかったが、3年度目を終えるにあたり、研究計画を修正しながら成果が出始めている。例えば、環状チアジラジカルなどの強相関有機分子を利用した FET 特性を精力的に探索したが、そこではバンド伝導的な挙動が支配的であったため、FET 特性以外の性質を検討した。その結果、強相関有機分子の単分子膜ではバルク結晶とは異なる、極めて特異な強相関構造が得られるなど、有機薄膜を用いることで新しい研究の展開が可能であることが分かった。これは、HEUTZ と名大グループの共同研究の成果であり、現在論文準備中である。また、同じく有機薄膜を利用した系では、ポリチオフェンや C60 薄膜を積層した光応答セルにおいて、誘電体層を様々に変えることで、新しい原理に基づいた高速かつ高出力な光過渡電流が観測されつつあり、エジンバラ大と名大グループの共同研究成果として論文を多数投稿予定である。なお、このような現象は、昨年度より加わった STUZHIN が得意とするフタロシアニン類縁体を用いることで赤外領域の光でも可能になると考えられ、光通信などの領域で大きなインパクトを与えられるとともに、大きな共同研究の成果となる。さらに、ROBERTSON と昨年度より参加の帯刀らにより、このような化合物や原理を用いた高効率な太陽電池の創製も継続的に進行中である。

上記のような有機エレクトロニクスに加え、カナダやイギリスのグループと名大グループの共同研究により、高いレドックス活性を有する新奇 MOF、COF、有機高分子を正極材料とすることで、安定かつ高容量な二次電池特性が見出されつつあり、学術的な観点から、本事業に「有機薄膜」「光過渡電流」「MOF」「固体電気化学」などの新しいキーワードを加え、基礎から応用まで幅広く、強相関分子系の新しい有機エレクトロニクスを展開する。

このように、光電変換、スピントロニクス、二次電池といった出口が見え始め、それらはいずれも独創性の高い研究であり、H28年度は、現在準備中のものも含め、5報程度共著論文を予定している。また、出口が見え始めたことで、どのような物質を用いて、どのようなデバイス作製と測定をすればよいか分かり始め、R1～R3に記述したように、共同研究を推進するうえでの具体的かつ組織的な研究交流計画をたてることができ、これを遂行することで中間評価での指摘事項に対応する。

9-1 相手国との交流計画

派遣先 派遣元	日本 〈人／人日〉	英国 〈人／人日〉	カナダ 〈人／人日〉	ロシア 〈人／人日〉	中国 (第三国) 〈人／人日〉	合計 〈人／人日〉
日本 〈人／人日〉		12/60 ()	1/20 ()	12/60 ()	1/6 ()	26/146 (0/0)
英国 〈人／人日〉	(1/300)		()	(7/35)	()	0/0 (8/335)
カナダ 〈人／人日〉	(2/10)	(2/10)		(2/10)	()	0/0 (6/30)
ロシア 〈人／人日〉	(2/14)	(5/25)	()		(1/6)	0/0 (8/45)
合計 〈人／人日〉	0/0 (5/324)	12/60 (7/35)	1/20 (0/0)	12/60 (9/45)	1/6 (1/6)	26/146 (22/410)

※各国別に、研究者交流・共同研究・セミナーにて交流する人数・人日数を記載してください。(なお、記入の仕方の詳細については「記入上の注意」を参考にしてください。)

※相手国側マッチングファンドなど、本事業経費によらない交流についても、カッコ書きで記入してください。

9-2 国内での交流計画

10/25 〈人／人日〉

10. 平成28年度経費使用見込み額

(単位 円)

	経費内訳	金額	備考
研究交流経費	国内旅費	300,000	国内旅費、外国旅費の合計は、研究交流経費の50%以上であること。
	外国旅費	10,000,000	
	謝金	0	
	備品・消耗品購入費	3,000,000	
	その他の経費	400,000	
	外国旅費・謝金等に係る消費税	800,000	
	計	14,500,000	研究交流経費配分額以内であること。
業務委託手数料		1,450,000	研究交流経費の10%を上限とし、必要な額であること。また、消費税額は内額とする。
合 計		15,950,000	