

二国間交流事業 共同研究報告書

令和5年4月28日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[日本側代表者所属機関・部局]
熊本大学・大学院先端科学研究部
[職・氏名]
教授・速水真也
[課題番号]
JPJSBP 120218818

1. 事業名 相手国: 韓国 (振興会対応機関: NRF) との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 動的電子状態に基づいた極性分子材料の開発

(英文) Development of Polar Molecular Materials Based on Dynamic Electronic State

3. 共同研究実施期間 2021年4月1日 ～ 2023年3月31日 (2年0ヶ月)【延長前】 年 月 日 ～ 年 月 日 (年 ヶ月)

4. 相手国側代表者(所属機関名・職名・氏名【全て英文】)

Kyungpook National University・Professor・Kil Sik Min

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額		2,280,000 円
内訳	1年度目執行経費	1,140,000 円
	2年度目執行経費	1,140,000 円
	3年度目執行経費	- 円

6. 共同研究実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	21 名
相手国側参加者等	13 名

* 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣・受入実績

	派遣		受入
	相手国	第三国	
1年度目	0	0	0(0)
2年度目	0	5	2(0)
3年度目			()

* 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣: 委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。

受入: 相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流の概要・成果等

(1)研究交流概要(全期間を通じた研究交流の目的・実施状況)

エネルギーや環境問題の解決、高度情報化社会の構築に向けて高性能デバイスや革新的機能を有する新物質の開発を目指した研究が広範に行われている。科学技術におけるイノベーション創出をもたらすものは、科学技術的に新しいコンセプトをもたらす基礎・応用的研究である。物質開発の立場から持続可能な社会の実現や超スマート社会の構築に貢献するためには、斬新な視点に立脚した物質設計に基づき、これまで実現されていない新機能を有する新材料や、現行の物質の機能を凌駕する新材料を創出し、社会に応用する必要がある。本研究交流では、極性における分極変化の源が電子移動やスピン状態変化である新しいタイプの極性分子材料を開発することを目指した。電子移動やスピン状態変化に基づいた極性分子は、電場や磁場あるいは光による高速分極制御特性や分極メモリー特性をはじめ様々な高度な機能を発現することが期待される。

初年度は、コロナ禍ということもあり、お互いに ZOOM 会議などでディスカッションしながら、サンプルの合成や測定などを行い、電子移動に起因した極性分子の創製を行った。次年度は、韓国からの研究者 5 名が来日し、研究成果を発表しながら、ディスカッションを行い、今後の展開について方向性を確認した。

(2)学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

極性材料は強誘電メモリー、キャパシター、アクチュエーター、センサー、光学デバイスなどとして社会に広く利用されている。また焦電特性は環境発電への応用が期待されている。これらの極性材料における分極特性を利用したデバイスを高性能化、省エネ化するために様々な物質開発が行われてきた。また分極スイッチのメカニズムとしてイオン変位や分子配向変化が利用され、それらのメカニズムが詳しく研究されてきた。現在、極性材料として強誘電物質が用いられており、これまでに BaTiO_3 に代表される酸化物をはじめ多くの無機系強誘電材料が開発されてきた。分子性物質においても優れた特性を示す強誘電材料が開発されており、クロコン酸やジイソプロピルアンモニウムブロマイドなどが知られている。また電子強誘電物質についても最近興味深い物質がいくつか報告されており、酸化物では LuFe_2O_4 、分子性物質では $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{I}_3$ や TTF-CA などがよく知られている。

これまで種々の極性材料が開発されてきたが、現在利用されている極性材料の分極変化のメカニズムに電子の特性や自由度が十分に生かされていない。そこで本研究では、物質における最も重要な機能の一つであり、広く社会で利用されている極性材料の分極機能に着目し、極性における分極変化の源が電子移動やスピン状態変化である新しいタイプの極性分子材料を開発することを目指す。図 1 に混合原子価鉄(II,III)ピフェロセニウムにおける電子移動に伴う分極変化を示しており、電子移動に伴った分極変化を示す極性分子材料である。したがって、電子移動やスピン状態変化に基づいた極性分子材料は、電場や磁場あるいは光による高速分極制御特性や分極メモリー特性をはじめ様々な高度な機能を発現することが期待される。

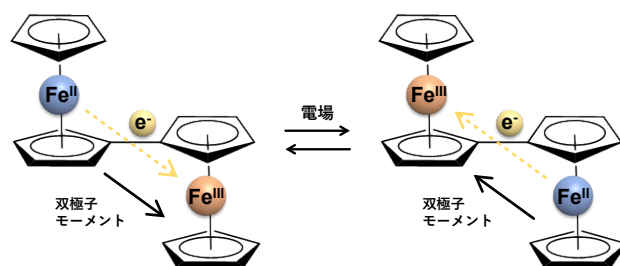


図 1 混合原子価鉄(II, III) 錯体における電子移動に伴う分極変化

日本側は、電子移動やスピン状態変化だけでなくキラル配位子やキラル対イオンを利用した独自の手法により極性構造を構築し電子移動に基づく分極制御を目指し実験を行った。韓国・キョンポク大学・

磁性研究グループは、キラル対イオンを利用した極性分子の開発および原子価異性化合物の電子移動に伴った極性分子の開発を進めた。これらの材料開発の取り組みにより、電子移動やスピン状態変化に基づいた極性分子の構造物性相関を明らかにすることができ、今後も情報科学と連携して極性分子科学を確立することとなった。

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学術交流することによって得られた成果)

本研究では、動的電子状態を有する金属錯体すなわち、混合原子価、プロトン移動、スピנקロスオーバー、ドナー・アクセプター、原子価異性などの金属錯体をコアとして、電子移動やスピン状態変化による極性分子材料の研究開発を行った。

エントロピー駆動の電子移動やスピン状態変化(混合原子価、プロトン移動、スピנקロスオーバー、ドナー・アクセプター、原子価異性など)による極性分子材料の開発を行う。混合原子価では、図1に示したように電子移動に伴うダイポールの変化を観測することに成功した。スピנקロスオーバーでは、図2に示したように高スピン状態のダイポールモーメントは低スピン状態よりも大きく、スピン状態変化で極性分子の開発に成功した。また原子価異性においても電子移動に基づいた分極の制御により極性分子の設計指針を立てることができた。

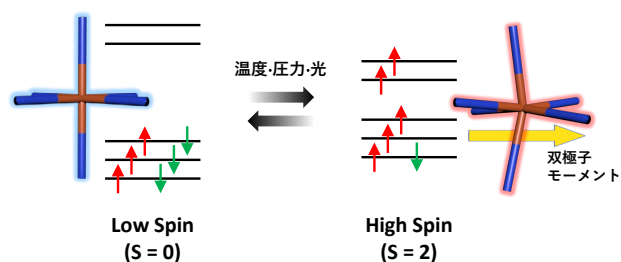


図2 スピנקロスオーバーによる分極の制御

(4)社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

高速な情報社会が求められている中で、分子材料の開発も高速化が求められている。日本で出遅れている分野であるケモインフォマティクスを積極的に導入する必要がある、実際に行われている相手国の研究知識・技術を知らずして、本研究課題である極性分子科学の創製を円滑に進めることは非常に困難を極める。そのため、相手国の研究知識・技術を十分に理解し、かつ極性分子および分子材料インフォマティクスに関連する諸分野において優れた知見を有する相手国の研究者らと我が国が国際共同研究を行うことは、互いの知識や技術、文化に対する理解の相互補完を可能にするための非常に有効的な手段である。また本共同研究では、日本-韓国の一貫した電子ダイナミクスと極性材料に焦点を絞り、従来までのスイッチング材料と比較して格段に速いスイッチング分子材料の開発に成功し、電子材料における社会基盤の確立を行った。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取組、成果)

若手研究者を海外拠点国へ派遣し、現地研究者と交流して現状を肌で感じ、どこに課題があるのか、何が必要なのか、また今できることは何なのかを深く考える機会を設けることが挙げられる。日本でのセミナーの開催は、情報共有の迅速化はもちろん、若手研究者にとってはグローバルな視野を獲得するための貴重な機会となった。相手国の研究者とのディスカッションにおいて現場の生の声を聴くことも、問題の本質を掴むための非常に重要な活動の一つである。若手研究者を招聘することも、国際共同研究において重要な要素であると考えられる。

(6)将来発展可能性(本事業を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

本研究では、先に示した極性における分極変化の源が電子移動やスピン状態変化である新しいタイプの極性分子材料を開発することを目指した。またこれらの材料開発の取り組みにより、電子移

動やスピン状態変化に基づいた極性分子の構造物性相関を明らかにし、情報科学と連携して極性分子科学を確立するアプローチはまさに始まったばかりで斬新な試みであり、社会的インパクトは大きいものと考えられる。

(7)その他(上記(2)～(6)以外に得られた成果があれば記載してください)

大学間協定は、すでに締結していたが、期間延長を行った。