

二国間交流事業 共同研究報告書

令和6年4月26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]
国立研究開発法人物質・材料研究機構
高分子・バイオ材料研究センター
[職・氏名]
主幹研究員 小林 由佳
[課題番号]
JPJSBP 120215705

1. 事業名 相手国: 英国 (振興会対応機関: The Royal Society) との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 単一成分純有機金属の物質科学

(英文) Materials science of single-component organic metals

3. 共同研究実施期間 2021年4月1日～2024年3月31日 (3年 ヶ月)【延長前】 2021年4月1日～2023年3月31日 (2年 ヶ月)

4. 相手国側代表者(所属機関名・職名・氏名【全て英文】)

Imperial College London・Professor・Aron Walsh

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		3,780,683 円
内訳	1年度目執行経費	1,900,000 円
	2年度目執行経費	1,880,683 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	3名
相手国側参加者等	6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	()
2年度目	0	0	4(0)
3年度目	1	0	(0)

* 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)

日本側で新規に開発された単一成分純有機金属の金属性発現および電子・熱輸送のメカニズムについて、イギリス側の第一原理計算によるバンド構造、トランスファー積分、フォノン計算による解明を試みた。期間中の大部分に渡り、コロナ禍の影響で双方の所属機関からの渡航制限を受けたため、その期間はオンラインでの議論となり、実質的にオンサイトでの交流は延長期間の1年で行うこととなった。しかしながら、この共同研究を通じて当初予定していた学術的な目的の主要部分は達成され、3回の国際学会発表、1報の論文投稿に繋がった。

(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)

これまで van der Waals 有機結晶である有機伝導体は分子間振動によるキャリア散乱により、無機物に比べて移動度が低いことは不可避と考えられてきた。ところが、本共同研究を通じた実験・理論計算の密接な連携により、この単一成分純有機金属はこれまでの認識を覆し、分子振動に由来する低周波数フォノンによる影響を受けることなく、電子-電子相互作用が優先されるため、結果的に無機半導体に匹敵する高い移動度が発現することを明らかになった。これは、有機結晶としての移動度の最高値であり、学術的に大きな成果となった。

(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)

キャリア形成中の複数の若手博士研究員がメンバーとして加わり、学術的な交流を行う中で、特にイギリス側の理論研究者にとっては、実際の試料観察を含む実験研究との密接な連携は貴重な経験となったと考えられる。また、日本が長年先導してきた有機伝導体の伝統分野にイギリス側の多国籍な若手研究者の共通する概念や手法を適用することにより、結果的にこれまでとは異なる新しい研究展開を迎えることが出来た。

(4)社会的貢献(社会的貢献はどのようにあったか)

短いスパンで既定路線の研究展開で完結するのではなく、時間をかけて多角的に真理を探究することにより、有機材料がもたらす今後の省エネルギーIT 社会の方向性を示す示唆に富んだ重要な知見を得るに至った。

(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)

一般的な方法論で満足に研究結果を理解出来ない場合、諦めずに新規性故と捉え、あらゆる角度から真理を探究するスタンスを貫いたことは若手研究者にとって新しい挑戦であったと思われる。イギリス側で本共同研究若手参画者の中心的な役割を担っていた Hui Yang 博士は、本共同研究を通して、これまでの常識を破り新しいメカニズムで有機物が無機物に匹敵する移動度を達成した事実に対して「it is really a piece of scientific art」とコメントした。若手の養成として、良好な成果を挙げたものと考えられる。

(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)

今後、新しいメカニズムで伝導する多くの高移動度有機物質や電子デバイスの創製が可能になっていくものと期待される。これは、IT 材料の工業プロセスをエコで安価な印刷技術で達成する有機材料へと変遷していく大きな一歩であり、有機物がシリコンに代わり IT 社会における基幹電子材料となる新展開が期待される。

(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)

本研究の柱となる部分は 2023 年に NEDO 未踏チャレンジに採択され、30年後の主要技術となるための研究開発をスタートさせた。