

課題名：f電子系有機分子の物質科学

氏名：小林由佳

機関名：独立行政法人物質・材料研究機構

1. 研究の背景

希土類元素(レアアース)は、現在、多くの工業材料の中で活躍している。これは、重い元素であるレアアース特有の「f電子」が大きく関係しているものと考えられる。この電子がもたらす優れた効果に着目して、これに習い、類似した効果を軽い元素によって実現できれば、科学技術の進歩に大きく貢献する。

2. 研究の目標

有機物にf電子は存在しないものの、多種多様な分子の形や、その並び方を自在にコントロールできる利点がある。そこで本研究では、f電子の有する特徴を巧みに捉えた電子の状態を人工的にデザインし、レアアースのように高い物理効果を獲得する有機分子の開発と基礎原理の確立を目標とする。

3. 研究の特色

これまでに私たちは、f電子の有する複数の特徴を併せ持つ有機物質群を見出している。その学術的な物質科学はほとんど知られていないため、ここで概念的に「f電子系有機分子」と呼ぶが、工業材料としての大きな可能性を秘めることがすでに分かっている。

4. 将来的に期待される効果や応用分野

もしも、地球上に豊富に存在し、かつ、軽量な有機物で、レアアースのような高機能の物質が創出できれば、私達の日常生活に浸透するグリーンイノベーションを担う次世代材料として極めて重要な存在となる。エネルギー変換分野や磁気メモリ分野での活躍が特に期待される。

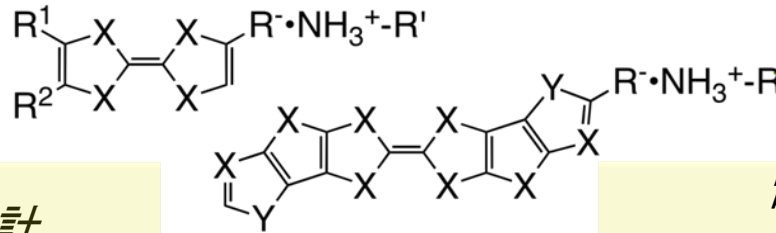
研究概要:

アンモニウムドーピングを基軸とした有機電子活性物質の開発を行う。化学分析・物性解析・理論計算から新物質設計の指針を確立する。

理論計算

ab initio 分子軌道法
第一原理バンド計算

X = S, Se, Y = C, N
R = COO, SO₃, PSO etc.



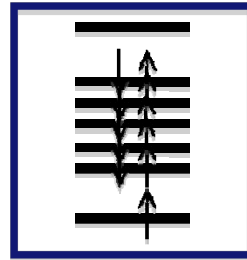
新物質開拓

物性巨大化の分子設計
新規ドナー分子の設計・合成
ソフトマテリアルへの応用
*n*型伝導体の設計・合成

新機能開拓

電気・磁気特性
光応答性
熱電・誘電特性
電子比熱
複数の外場応答性

候補化合物は無限



概念的に「*f*電子系有機分子」と呼ぶ

化学分析

ドープレベルの精密分析
NMR, IR, ESI-MS, ICP-MS,
XPS, ESR
(NIMS, 他研究機関共同利用装置)

構造解析

構造機能相関
単結晶X線構造解析
粉末X線結晶構造解析
(KEK, SPring-8の利用)