

**先端研究助成基金助成金(最先端・次世代研究開発支援プログラム)
実施状況報告書(平成 23 年度)**

本様式の内容は一般に公表されます

研究課題名	f 電子系有機分子の物質科学
研究機関・ 部局・職名	物質・材料研究機構・先端的共通技術部門高分子材料ユニット有機材料グループ・主 幹研究員
氏名	小林 由佳

1. 当該年度の研究目的

当該年度は、これまでに開発した塩橋結合を利用した新規伝導性有機物の物性評価を行うことを目的とした。粉末多結晶を加圧成形したサンプルの電場、磁場、光、熱、水素圧などの外場を付与して、その応答から物質の材料としてのポテンシャルを調査し、物性発現機構を明らかにすることを目標とした。さらに、得られた知見を基にして、物性値を巨大化させる物質設計を行い、実証することも目的の一つとした。研究の進捗状況に従って、必要とされるスキルを有した博士研究員を雇用し、複数の専門家で成り立つ研究チームを構成することや、得られた研究成果を効率的に国民に発信するための環境整備を行うことも目的とした。

2. 研究の実施状況

前年度までに導入した物性解析装置を用いて、合成したサンプルの電気的特性、光応答性、磁場応答性、熱起電力を測定した。その結果、いくつかの物質において、これまでに知られた伝導性有機物には見られない応答が確認されている。これらの物性は、新材料としての高いポテンシャルを示すだけでなく、学術的にも大きな価値があるため、詳細な検討を継続して行っている。そのためには、サンプルの単結晶化が重要な課題であるため、合成的な手法を再検討したところ、いくつかの物質において微小ではあるが、単結晶化に成功した。現在は、外部研究機関との連携により、微小単結晶の構造解析に取り組んでいる。また、単結晶に金属端子を設置することができれば、精密な物性評価を行うことが可能となり、研究の飛躍的な加速が期待される。そこで、微小単結晶の物性評価用のガラス基板を新たに設計し、試作段階にある。また、伝導性向上のための新規物質設計を行ったところ、室温における電気伝導度を 4 桁向上させることに成功した。詳細については検討中である。

当該年度の後半では、物性測定に必要な装置開発が整ったため、物性測定を専門とする経験豊富な博士研究員 1 名を新たに雇用した。さらに、合成面でのさらなる強化をはかるために、2 名の研究業務員を雇用した。現在は、それぞれの専門を活かしたチーム構成となっている。また、研究成果を発信するための専用のホームページを開設した。ここで、原著論文や学会発表状況をリアルタイムで発信している。所属機関の催す一般向けイベントに出展するなど、研究成果の公表および国民との対話に尽力した。

様式19 別紙1

3. 研究発表等

<p>雑誌論文 計 2 件</p>	<p>(掲載済み一査読有り) 計 1 件</p> <ul style="list-style-type: none"> Protonic defect induced carrier doping in TTF₂COO⁻NH₄⁺: Tunable doping level by solvent T. Terauchi, <u>Y. Kobayashi</u>, H. Iwai, A. Tanaka, <i>Syn. Met.</i> 2012, 162, 531-535. <p>(掲載済み一査読無し) 計 0 件 (未掲載) 計 1 件</p> <ul style="list-style-type: none"> Synthesis of bis-fused tetrathiafulvalene with mono- and dicarboxylic acids T. Terauchi, <u>Y. Kobayashi</u>, Y. Misaki, <i>Tetrahedron Letters</i>. 2012, <i>in press</i>. http://dx.doi.org/10.1016/j.tetlet.2012.04.064
<p>会議発表 計 9 件</p>	<p>専門家向け 計 8 件</p> <ul style="list-style-type: none"> 2012/03/26 寺内毅, <u>小林由佳</u>, 御崎洋二 “縮環ドナー分子を用いた塩橋型分子性導体の開発” 日本化学会2012年春季年会, 慶應藤沢キャンパス 2012/03/24 中村敏和, <u>小林由佳</u> “TTF₂COONH₄塩の¹H-NMR”, 日本物理学会2012年春季大会, 関西学院大学 2011/11/25-26 Y. Kobayashi, T. Terauchi, H. Kino “Solvent-dependent carrier doping in TTF₂COO⁻NH₄⁺” MDF International mini-Workshop, 神戸ポートタワーホテル 2011/09/21-24 <u>小林由佳</u>, 日比野高士, 金永成, 岩井秀夫, 田中彰博 “TTF₂COONH₄塩のプロトン拡散能” 日本物理学会2011年秋季大会, 富山大学 2011/09/21-24 <u>小林由佳</u>, 木野日織, 西堀英治, 澤博 “TTF₂COONH₄塩の電子状態” 日本物理学会2011年秋季大会, 富山大学 2011/09/21-24 小林哲也, 西堀英治, 澤博, <u>小林由佳</u>, 木野日織 “TTF₂COONH₄塩の結晶構造” 日本物理学会2011年秋季大会, 富山大学 2011/09/20-23 寺内毅, <u>小林由佳</u> “TTF₂COONH₄塩の混合原子価状態変化による物性制御への試み” 分子科学討論会2011札幌大会, 北海道 2011/09/05-08 <u>Y. Kobayashi</u>, T. Terauchi “NEW CARRIER GENERATION IN TTF-BASED AMMONIUM SALTS” The 14th Asian Chemical Congress 2011, バンコク (招待講演) <p>一般向け 計 1 件</p> <p>2011/10/26 NIMS フォーラム <u>小林由佳</u> 東京国際フォーラム</p>
<p>図書 計 0 件</p>	
<p>産業財産権 出願・取得状況 計 0 件</p>	<p>(取得済み) 計 0 件 (出願中) 計 0 件</p>
<p>Webページ (URL)</p>	<p>http://www.nims.go.jp/personal/ykobayashi/index.html</p>
<p>国民との科学・技術対話の実施状況</p>	<p>2011/10/26 NIMS フォーラム 東京国際フォーラム においてポスター発表を行った。</p>
<p>新聞・一般雑誌等掲載 計 0 件</p>	
<p>その他</p>	

4. その他特記事項

実施状況報告書(平成23年度) 助成金の執行状況

本様式の内容は一般に公表されます

1. 助成金の受領状況(累計)

(単位:円)

	①交付決定額	②既受領額 (前年度迄の 累計)	③当該年度受 領額	④(=①-②- ③)未受領額	既返還額(前 年度迄の累 計)
直接経費	127,000,000	89,400,000	0	37,600,000	0
間接経費	38,100,000	26,820,000	0	11,280,000	0
合計	165,100,000	116,220,000	0	48,880,000	0

2. 当該年度の収支状況

(単位:円)

	①前年度未執 行額	②当該年度受 領額	③当該年度受 取利息等額 (未収利息を 除く)	④(=①+②+ ③)当該年度 合計収入	⑤当該年度 執行額	⑥(=④-⑤) 当該年度未執 行額	当該年度返還 額
直接経費	89,067,780	0	0	89,067,780	86,119,674	2,948,106	0
間接経費	26,718,000	0	0	26,718,000	26,718,000	0	0
合計	115,785,780	0	0	115,785,780	112,837,674	2,948,106	0

3. 当該年度の執行額内訳

(単位:円)

	金額	備考
物品費	77,019,073	磁気特性測定装置、自動有機物性解析装置等
旅費	387,130	研究成果発表旅費(ACC2011参加)等
謝金・人件費等	8,310,902	人件費(ポスドク研究員、研究業務員)
その他	402,569	学会参加費、英文校閲、有機元素分析等
直接経費計	86,119,674	
間接経費計	26,718,000	
合計	112,837,674	

4. 当該年度の主な購入物品(1品又は1組若しくは1式の価格が50万円以上のもの)

物品名	仕様・型・性能 等	数量	単価 (単位:円)	金額 (単位:円)	納入 年月日	設置研究機関 名
電子状態計算ソフト ウェア	VASP 4.6 nonprofit research	1式	562,752	562,752	2011/5/16	(独)物質・材料 研究機構
磁気特性測定装 置	MPMS- XL5NKTO XLシ リース 5.0テスラ	1式	20,895,000	20,895,000	2011/10/11	(独)物質・材料 研究機構
自動有機物性解 析装置	PPMS-9NKTO 9.0テスラ	1式	48,433,350	48,433,350	2011/11/9	(独)物質・材料 研究機構