

研究課題名 ワークショップ開催「多自由度が協奏する分子システムの科学」

研究代表者名

東北大学・金属材料研究所・佐々木孝彦

1. はじめに

柔らかい分子性物質で発現する多彩な電子物性の起源は、イオンや分子格子、分子振動などと動的に相互作用したパイ電子の協奏状態の発現と密接に関係している。従来の分子性固体では、整列した分子が作る周期格子系において、電子の電荷・スピン自由度が分子の自由度と結合することで物質の性質を決めていた。これら電子および分子の自由度に加えて新しい自由度としてイオンが働く系が最近着目されている。動的に揺らぐイオンが格子の枠組みを緩め、非周期的・非局所的ポテンシャルを電子にもたらし従来の電子物性論の基本概念を逸脱する異常物性を生み出している。このような系は、イオンや分子と電子が固体内で動的に協奏した分子システムと呼ばれている。最近、分子性物質の研究分野では、このような新しい分子システムの学理の創成が強く必要とされている。最近見出された室温有機強誘電体では、プロトンの変位と電荷が協奏することで電子分極が発現し大きな自発分極を持つ強誘電性を示している。また、周期性の枠組みを超えたヘテロ界面においても同じような新しい学理が必要とされている。このような学理の構築は、より広い物質系、たとえば生体分子系物質や有機エレクトロニクスへの新しい理解と解釈につながるものである。

本金研ワークショップでは、「多自由度が協奏する分子システムの科学」という新しい学理の構築を目指すために、分子性物質の研究者に加えて、物理・化学・デバイス・生体分野の研究者が参加した新しい研究コミュニティの構築を図ることを目的として、多くの研究者、学生の参加を得たワークショップの開催を試みた。本ワークショップでは、柔らかい分子性物質および界面の開拓・設計、非周期・非局所的なイオンの動きにより揺らぐ新たな電子系との協奏現象の発見・開拓、そして複雑系物理へのパラダイムシフトに繋がる外場下での新たな機能の創出について研究発表、討論を行うとともに、研究グループ間、研究者個人間のネットワーク構築も重要なテーマである。

2. 研究経過

本ワークショップ開催にあたり、講演者、講演テーマの選定、プログラムの作成において、これまでの分子性導体の分野を主導してきた物性物理、物理化学の分野の研究者に加えて、有機エレクトロニクスデバイス・生体系などの異なる研究領域からも参加いただき議論やアイディアの交換、さらに共同研究のきっかけを作る機会を十分に考慮した。

また、本ワークショップは、中心となる研究者によって東北大学金属材料研究所－東京大学物性研究所－分子科学研究所の3研究所間で連携して主題を少しずつ変化させながら定期的に開催する連携シリーズ研究会としての意味合いもある。これまで、以下に記す研究会が、金研ワークショップも含めて継続的に行われ、研究コミュニティの形成、研究の方向性の検討を行う場として認知されてきた。

- 金研ワークショップ「電子自由度による強誘電体最前線」(2011年11月1-2日)
- 分子研研究会「生物物質科学の展望」(2013年1月10日-11日)
- 東京大学物性研究所短期研究会「エネルギーと新材料の物性・物質科学」(2013年11月11-13日)

このため、本ワークショップの運営、講演者の選定、プログラム編成に関しては、本研究代表者を中心にして、森初果教授(東大物性研)、鹿野田一司教授(東大工)、寺崎一郎教授(名大理)、山本浩史教授(分子研)、石原純夫教授(東北大理工)、澤博教授(名大工)、加藤礼三主任研究員(理研)により各専門分野における研究動向、トピックスなどを検討して行った。また、分野の若手研究者、学生の発表機会、交流を進めるために口頭発表に加えてポスターセッションを行い、特に、実質的な時間をかけた討論と交流がポスターセッションを中心に行われることを意図し、そこから共同研究の機会を形成することができるように懇談会と組み合わせるなどのプログラム編成に工夫を行っている。

ワークショップは、平成26年7月18日-19日に金属材料研究所2号館講堂で行った。前記のようなプログラム編成のためにポスターは3日間の会期中、常時掲示し、講演会場内にポスターボードを配置することで休憩時間、懇談会時間においてもポスターを囲んだ討論ができるように配慮した。

ワークショップ参加者数は、18日 31名、19日 44名、20日 33名の計(延べ)108名であったが、この数は、受付で出席表に各日に記名した人数であるため、複数日の参加者や金研内から参加の学生などに記名もれがあるようで、今回のワークショップ運営の反省点である。

具体的なプログラムは、以下の通りである。

金研ワークショップ「多自由度が協奏する分子システムの科学」
(2014年7月18日—20日東北大学金属材料研究所2号館講堂)

7月18日(金)

13:30 はじめに 佐々木孝彦 (東北大金研)

[

Session 1] 座長 山本浩史 (分子研)

13:40-13:10 「電子とプロトンが協奏する分子システムの開発」
森初果 (東大物性研)

14:10-14:40 「有機強誘電体における π 電子とプロトンの協奏」
堀内佐智雄 (産総研)

14:40-15:10 「トライマー型酸化物絶縁体における電荷自由度」
岡崎竜二 (名大理)

15:10-15:30 休憩

[Session 2] 座長 加藤礼三 (理研)

15:30-16:00 「有機磁性体による磁気格子設計と量子物性」
細越裕子 (大阪府立大)

16:00-16:30 「フォトクロミック錯体の多重機能」
西原寛(東大理)

16:30-17:00 「ヘムモデルと外部刺激の協奏により創出される多重安定な電子状態」
大胡恵樹 (帝京大医)

17:00-17:30 「 $M(dmit)_2$ 単純塩の光で誘起される磁性と伝導性」
内藤俊雄 (愛媛大理工)

7月19日(土)

[Session 3] 座長 澤博 (名大工)

9:00-9:30 「電荷秩序系におけるコストリッツ・サウレス転移」
宇治進也 (物材機構)

9:30-10:00 「反強磁性量子臨界揺らぎと超伝導」
芝内孝禎 (東大新領域)

10:00-10:30 「フラーレン超伝導体の超伝導発現機構の第一原理計算による研究」
有田亮太郎 (理研)

10:30-10:50 休憩

[Session 4] 座長 石原純夫 (東北大理)

10:50-11:20 「協奏する自由度が生み出す光誘起相転移と隠れた物質相」
腰原伸也 (東工大理)

11:20-11:50 「相関電子系における光誘起相転移の新展開」
岡本博 (東大新領域)

11:50-12:20 「多自由度系分子性導体の有効モデルによる理論研究」
妹尾仁嗣 (理研)

12:20-14:00 昼食

[Session 5] 座長 森初果 (東大物性研)

14:00-14:30 「単一分子種伝導体 $M(tmtd)_2$ における、 d 軌道とパイ軌道の協奏と分子運動自由度との結合の可能性」
鹿野田一司 (東大工)

14:30-15:00 「 θ -(ET) $_2$ X 塩における電荷フラストレーションと電荷ガラス形成能の相関」
賀川史敬 (理研)

15:00-15:30 「有機伝導体におけるディラック電子の輸送現象、電荷秩序」
小形正男 (東大理)

15:30-15:50 休憩

[Session 6] 座長 鹿野田一司 (東大工)

15:50-16:20 「有機スピン液体物質の熱容量」

中澤康浩 (大阪大理)

16:20-16:50 「量子スピン液体の素励起の研究」

山下穰 (東大物性研)

16:50-17:20 「1.5 サイクル瞬時強電場が拓く強相関電子の超高速限界駆動」

岩井伸一郎 (東北大理)

17:20-17:50 「ダイマーモット系における電荷揺らぎとスピン液体」

石原純夫 (東北大理)

18:00-20:00 ポスターセッション (軽食)

7月20日(日)

[Session 7] 座長 佐々木孝彦 (東北大金研)

9:00-9:30 「有機モットFETにおける相転移挙動」

山本浩史 (分子研)

9:30-10:00 「有機大電流発光素子」

竹延大志 (早稲田大理工)

10:00-10:30 「分子性ディラック電子系へのキャリア注入と量子伝導現象」

田嶋尚也 (東邦大理)

10:30-10:50 休憩

[Session 8] 座長 佐々木孝彦 (東北大金研)

10:50-11:20 「分子性結晶における分子軌道分布の自由度」

澤博 (名大工)

11:20-11:50 「レーザー光電子分光による分子性導体の研究」

石坂香子 (東大工)

11:50-12:20 「多バンド系分子性導体」

加藤礼三 (理研)

12:20-12:30 「まとめと提言 I」

榎敏明 (科学技術振興機構)

12:30-12:40 「まとめと提言 II」

福山秀敏 (東京理科大)

ポスターセッション (7月19日(土) 18:00-20:00)

P1 「水素結合ユニット型伝導体 κ' -[H₃(Cat-EDO-TTF)₂]BF₄; ユニット屈曲を伴う分子配列変化と連動した電子物性のスイッチング機能」 吉田順哉 (東大物性研)

P2 「プロトンと π 電子の協奏による電子物性スイッチング」 上田顕 (東大物性研)

P3 「プロトンダイナミクスによる電子系への影響」 松浦弘泰 (東京大学)

P4 「ダイマーモット系における電荷自由度と非磁性状態の理論」 中惇 (理化学研究所)

P5 「 θ -(BEDT-TTF)₂X における長周期ストライプ型電荷揺らぎ」 中惇 (理化学研究所)

P6 「ダイマー内自由度を有する拡張ハバード模型の電子状態」 渡邊努 (千葉工業大学)

P7 「 β' -(BEDT-TTF)₂(ICl₂)_{1-x}(AuCl₂)_x の磁化率と誘電率測定」 米山直樹 (山梨大学)

P8 「高圧下におけるダイマーモット絶縁体 β' -(BEDT-TTF)₂ICl₂ の光学伝導度スペクトル」 橋本頭一郎 (東北大学)

P9 「フラストレート電荷秩序系における光誘起ダイナミクス」 橋本博志 (東北大学)

P10 「 θ -(BEDT-TTF)₂TlZn(SCN)₄ における電荷ガラス的低周波ダイナミクス」 佐々木智 (東北大学)

P11 「配向制御による導電性高分子 PEDOT/PSS 膜の高電気伝導化」 本間優太 (東北大学)

P12 「分子性導体 κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Br のモット転移に対する乱れの効果」 斎藤みく (東北大学)

P13 「準一次元強相関電子系有機導体(BPDT-TTF)₂ICl₂ の赤外分光測定」 小林亮太 (東北大学)

P14 「ダイマーモット絶縁体 κ -(BEDT-TTF)₂Cu₂(CN)₃ における光誘起相転移とテラヘルツ応答」 伊藤桂介 (東北大学)

本ワークショップ開催の経費は以下の通りである。

配分額 旅費：1,472,000円 消耗品費：60,000円 計 1,532,000円

執行額 旅費：1,341,400円 消耗品費：71,700円 計 1,413,100円

差額 118,900円（返納 H26年9月5日）

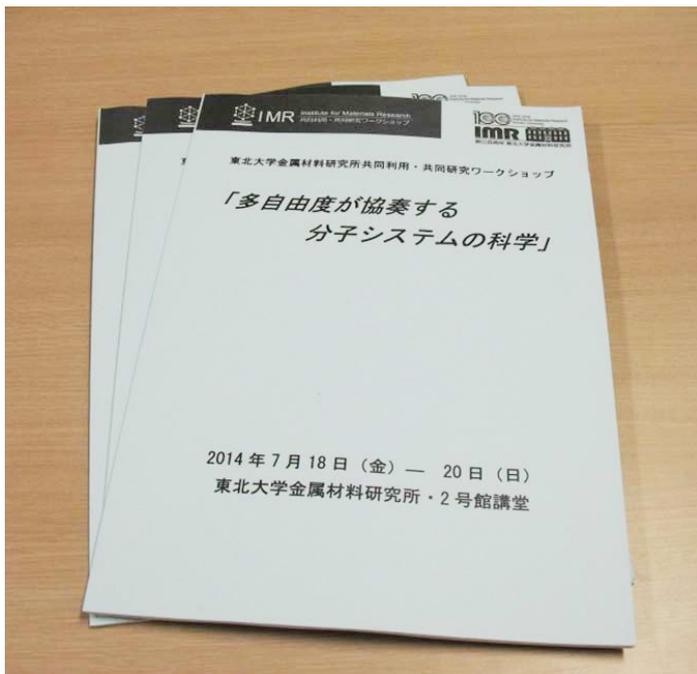
旅費に関しては、申請時の旅費配分予定者が28名であったが、実際の支給者は26名であった。これは、ワークショップの参加に関して、他の用務との連続性の関係や参加者自身による負担の要望があったため申請時人数よりも2名分少なくなった。ほぼこの旅費の差額が配分額に対する執行額の差となり、その残余については返納した。

消耗品費に関しての内訳は、

アブストラクト集（100部） 37,497円

インクカートリッジ、用紙他、会議の開催用文房具など 34,203円

となっている。



ワークショップで作製した、アブストラクト集（40ページ）

3. 研究成果

本ワークショップを開催することにより、もっとも重要な目的とした研究分野の異なる研究者間の交流と情報交換を促進することができた。具体的には、ポスターセッションでの討論などから共同研究に発展するなどしている。また、本ワークショップのプログラム編成を行ったメンバーを中心とした大型科学研究費の申請が計画、実施されるなど、研究コミュニティの構築に十分な寄与があったと考えられる。

また、個々の講演、ポスター発表においても主催者、プログラム編成者の意図を十分に理解していただき発表していただいたので、単なる研究発表では無い、プログラム主題の「多自由度の協奏」に向けて集約され、十分に内容、焦点が絞られたワークショップとして意義があるものとなった。

4. まとめ

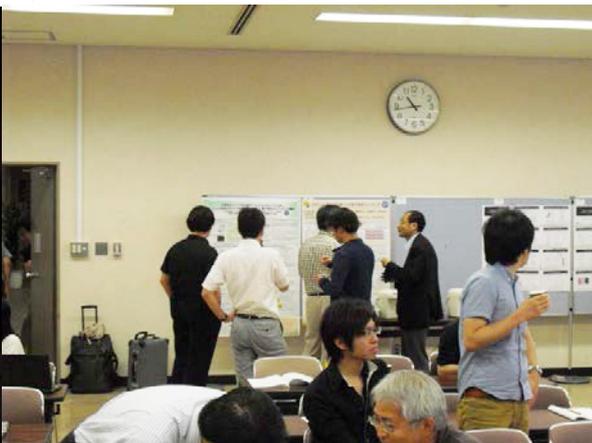
本ワークショップの開催により、「多自由度が協奏する分子システムの科学」をテーマとする分野融合的な共同研究を進展させる機会の形成という成果があった。このような融合研究を進展させる枠組みとしては、共同利用・共同研究拠点間での連携が重要であり、今後も金研－物性研－分子研を中心とした連携活動を進めていきたいと考えている。このような活動を推進することで、新たな新学術領域研究の創成につながることを期待でき、共同利用・共同研究拠点としての責務の一つであると考えられる。

最後に、本ワークショップ開催にあたり運営に助言していただいた各研究コミュニティの先生方、ワークショップ実施のコアメンバー、会場設営、準備などを手伝っていただいた研究代表者の研究室の教職員、学生、共同利用係の皆さんに御礼を申し上げます。

ワークショップ開催の様子（2014年7月18-20日）



オープニングの開催目的、概要の説明



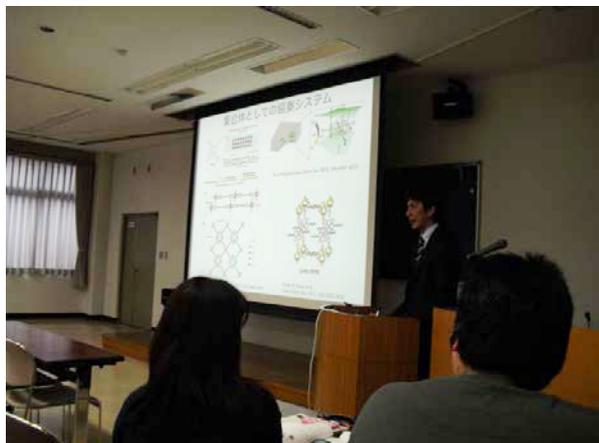
休憩時間中：掲示ポスター前での討論 I



休憩時間中：掲示ポスター前での討論 II



口頭発表の様子 I



口頭発表の様子 II



口頭発表の様子 III



ポスターセッションの様子（軽食付）



プログラム最後のまとめと提言