

## 研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名：有機材料を用いた次世代強誘電物質科学の創成

2. 研究代表者：堀内 佐智雄((独)産業技術総合研究所 フレキシブルエレクトロニクス研究センター チーム長)

### 3. 中間評価結果

本研究課題は、CREST開始前の、研究代表者らによる低分子有機化合物、炭素と酸素を主骨格とするクロコン酸の室温強誘電特性に関する成果を端緒として、有毒な鉛や希少元素に依存しない、有機化合物をベースとした強誘電体の創成を目指すものである。CRESTでは大きく分けて、物質探索、電子状態や結晶構造の解明、分極ドメインの観測、薄膜化という各要素に取り組んでいる。

物質探索では、将来のデバイス化にも応えられる塗布・印刷が可能な有機強誘電体物質の開発を基本とし、これまでに20種超の電子(またはプロトン)ドナー・アクセプター型強誘電体を見いだしている。その一つとして、炭素と窒素を主骨格とするイミダゾールやアントラニル酸が、水素結合架橋構造を基に優れた強誘電性を示すことを明らかにしたことは高く評価できる。今後はこれらの成果を核とした薄膜化・デバイス化への展開に資する物質合成(例えばオリゴマー化など)にも注力を傾けつつ、有力な物質は適宜、プロセス開発などにも取り組まれることが望まれる。

また物性評価の面では、強誘電体の高性能化に向けた新原理・設計指針の創出を目指しており、これまでに有機電荷移動錯体結晶において、動的電子過程が巨大な電気分極の起源であることを実験・理論計算の両側面から明らかにし、新たな強誘電分極発現機構「電子型強誘電性」を実証した。また、ピエゾ応答顕微鏡を用いた分極ドメイン観察手法を開発し、外部からの電場印加に対してドメインがどのように応答するのかをドメイン壁の種類ごとに観測するまでに至っている。今後はこれらの学理を追究するとともに、そこで得られた知見がどのように物質設計にフィードバックされるかに、より一層の意義を見いだしてもらいたい。

研究代表者の材料合成を核とし、物性評価をチームの構成メンバーとしつつ、CREST期間中には新たに理論計算のグループを追加するなど、必要な研究体制の運営が進められていると認められる。その一方で今後は、「物質探索」を基軸とした、成果のまとめ方等のメッセージ性を強調してもらいたい。物質ごとに物性や作用機構などが体系化され、それらが構成メンバー間で明確に共有されれば、そこから最終目標やデバイス設計指針、あるいは新たな物質設計の手がかりが得られることが十分に期待できる。