

未踏探索空間における革新的物質の開発
2021年度採択研究代表者

2022年度
年次報告書

竹谷 純一

東京大学 大学院新領域創成科学研究科
教授

電子閉じ込め分子の二次元結晶と汎用量子デバイスの開発

主たる共同研究者:

岡本 敏宏 (東京大学 大学院新領域創成科学研究科 准教授)

小林 伸彦 (筑波大学 数理物質系 教授)

研究成果の概要

電子閉じ込め分子の二次元結晶化によって、有機量子エレクトロニクスを実現することを目的として、新規量子井戸分子の合成および結晶構造予測によるスクリーニングを進めるとともに、既存の量子井戸分子結晶の二次元ホールガスにおいて、外部圧力および高密度キャリアドーピングによる電子相制御の手法を開発し、量子デバイスの基となる新規異常金属電子相および縦型構造の新規伝導過程の発見など下記に示す顕著な進捗を得た。

有機二次元キャリア閉じ込め系の電子相転移を目標として、①有機二次元キャリア閉じ込め系に形成した二次元正孔ガス(two-dimensional hole gas, 2DHG)への高密度キャリアドーピングと詳細なキャリア密度変調、および②圧縮歪み印可による有機 2DHG への面内圧力効果を再現よく実現する有機量子エレクトロニクスデバイスの構造を確立した。有機量子エレクトロニクス応用の候補物質として多彩なパイ電子系骨格、側鎖置換基および電子状態を有する新規量子井戸分子の合成、結晶構造解析、電荷輸送能評価を実施し、新規物質探索空間のデータ基盤を構築している。また、電子閉じ込め分子の結晶構造予測にて、量子井戸分子群に対して従来の結晶構造予測計算より高精度な予測が可能であることを実証した。量子デバイスの基となる新規異常金属電子相として、電子相関が非常に強いことを明らかに、その結果生じる擬ギャップを見出した。さらに、有機半導体薄膜や金属表面の分子層コーティングにより、電気二重層を安定に形成し、0.7 eV もの表面準位シフトを見出して、ダイオードなどの高性能縦型デバイスの開発にも成功した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Electron-deficient benzo[*de*]isoquinolino[1,8-*gh*]quinoline diamide π -electron systems”, Craig P. Yu, Akito Yamamoto, Shohei Kumagai, Jun Takeya, Toshihiro Okamoto, *Angew. Chem. Int. Ed.*, vol. 62, Issue 4, e202206417, 2023, 10.1002/anie.202206417 (プレスリリース)
- 2) “ π -Extended Zigzag-Shaped Diphenanthrene-Based p-Type Semiconductors Exhibiting Small Effective Masses”, Masato Mitani, Shohei Kumagai, Craig P. Yu, Ayako Oi, Masakazu Yamagishi, Shuhei Nishinaga, Hiroki Mori, Yasushi Nishihara, Daisuke Hashizume, Tadanori Kurosawa, Hiroyuki Ishii, Nobuhiko Kobayashi, Jun Takeya & Toshihiro Okamoto, *Adv. Electron. Mater.*, vol. 8, Issue 11, 2200452, 2022, doi: 10.1002/aelm.202200452
- 3) “Improvement of contact resistance at carbon electrode/organic semiconductor interfaces through chemical doping”, K. Watanabe, N. Miura, H. Taguchi, T. Komatsu, H. Nosaka, T. Okamoto, Y. Yamashita, S. Watanabe, and J. Takeya, *Appl. Phys. Express*, Volume 15, Number 10, 101005, (2022), DOI:10.35848/1882-0786/ac92c0
- 4) “Doped semiconducting polymer nanoantennas for tunable organic plasmonics”, A. Karki, Y. Yamashita, SZ. Chen, T. Kurosawa, J. Takeya, V. Stanishev, V. Darakchieva, S. Watanabe, and MP. Jonsson, *Communications Materials* volume 3, Article number: 48 (2022), DOI:10.1038/s43246-022-00268-w
- 5) "Conduction band structure of high-mobility organic semiconductors and partially dressed polaron formation", Haruki Sato, Syed A Abd Rahman, Yota Yamada, Hiroyuki Ishii, Hiroyuki Yoshida, *Nature Materials*, 21, 910, (2022), DOI: 10.1038/s41563-022-01308-z