

物質探索空間の拡大による未来材料の創製
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

宮島大吾

理化学研究所 創発物性科学研究センター
ユニットリーダー

π 共役分子の一次元配列を基点とした未来材料探索

§ 1. 研究成果の概要

分子性材料の物性は構成する分子の構造と集合様式によって決まる。本申請研究では π 共役分子の1次元配列を起点とした分子集合技術を開発し、未踏分子集合構造を実現し、革新的機能性材料の開発を目指すものである。

本年度はお椀状 π 共役分子の1次元配列を起点として対称性の異なる様々な3次元集合構造の開拓に成功した。お椀状共役分子を1次元に優先的に配列し、そのカラムを更に2次元配列させることで3次元構造を形成する。お椀状分子が積み重なって形成される1次元カラムは極性を有しているため、カラムが平行・反平行に配列するかで空間反転対称性が破れた・破れていない集合体が形成できる。さらにキラルなお椀状 π 共役分子を用いることで、キラルかつ空間反転対称性が破れた集合体、さらに2次元カラム間に隙間(ポロシティー)のある3次元構造の作成にも成功している。有機半導体はキャリア密度が小さく導電性が低い。そのため、電荷移動塩・錯体を形成することでキャリア密度を上昇することが可能であるが、カウンターイオンなどを取り込まなければならず集合構造の制御は容易ではない。このポロシティーにうまくカウンターイオンを取り込めれば得られた集合構造を変化させることなく、キラル・ポーラーで電気を流す有機結晶の開発が期待できる。現在得られた結晶の構造的特性を生かした物性検討を行なっている。具体的には空間反転対称性が破れた結晶においてはバルク光起電力効果を観測し、その詳細を調べている。キラルな結晶においては Chirality Induced Spin Selectivity と呼ばれるスピン選択伝導を調べ、分子構造相関を議論している。