

【領域番号】 2009

【領域略称名】 新分子物質科学

【領域代表者（所属）】 鹿野田一司（東京大学工学系研究科・教授）

[背景]

固体物質における伝導性、磁性、誘電性、光物性など多岐に渡る物性の発現は、ひとえに原子あるいは分子がどのように凝集するか、その凝集の様式に依存している。様々な物理現象の普遍性と多様性を追求する物性科学も、手にする構成要素の種類、あるいは、個性によってその展開が大きく変わってくる。原子が積み上げられることによって生じる無機物質に比べると、分子という単位で積み上げられる分子性物質には、質的に異なる自由度が存在する。例えば、ある格子点に位置する分子には、その向きの自由度である剛体自由度が存在する。その結果、同じ分子からなる物質であっても、各分子がその環境に応じて異なる向きや配列で凝集することによって、全く異なる物性が生じ得る。また、分子内で空間的に広がった分子軌道は、化学修飾や原子置換によって、そのエネルギーや形状を大きく変化させる。このことから、非常に似通った分子配列を持つ物質でも、分子の軌道自由度によってその物性を広範に制御することが可能である。さらに、分子には屈曲や伸縮などの内部変形の自由度も存在するが、それらは、上記の剛体自由度や軌道自由度と密接に関係してくる。このような“分子自由度”は、他の物質群には無い分子性物質に特有のものであり、分子性物質の多彩な物性の源泉となるものである。

[目的]

以上の観点から、**分子自由度が新しい物質科学のパラダイムをつくる可能性に注目し、この自由度が積極的に関与する物性を開拓することを目指して、これまで発展を遂げてきたそれぞれの領域（伝導性、磁性、誘電性、光物性）の枠を超えた統合的な新しい学術領域「分子自由度が拓く新物質科学」を提案した。**

[概要]

分子性伝導体においては、各種絶縁体から超伝導体まで多様な電子相の存在が明らかになっているが、分子の幾何学的自由度をパラメータとして統一的に理解されつつある。特に、同一物質において加圧による分子配列の制御を行うことにより、電荷秩序強誘電相、超伝導相、そしてゼロギャップ伝導相へと転移することが見出されており、当該分野を越えて注目を集めている。一方、多くの分子性伝導体の伝導バンドは、分子あたり一つの分子軌道から構成されているが、最近の研究から、複数の軌道を有する物質が高い転移温度を持つ金属的反強磁性を示したり、スピン液体と非磁性一重項状態との競合を示すことが最近見出されている。また、 π 軌道と d 軌道が相互作用する電子系においては、磁場誘起超伝導をはじめ伝導性と磁性が絡み合う興味ある現象が見出されている。さらに、水素結合を有する分子性固体においては、水素の微小変位による分子軌道の大きな分極が観測され新しい誘電現象として注目されている。これらの結果は、分子の軌道自由度が新しい物性発現の鍵を握っていることを物語っている。物質の状態制御という観点では、光による電子励起をきっかけとして固体内の分子自由度の変化を誘起し、非平衡相転移へと導く光相制御の研究が活発に行われている。特に、電荷秩序と分子の形状の自由度が強く結合する系において、巨大な光応答や電場応答が見出されている。このように、分子性物質に特有で興味深い物性が続々と明らかにされつつあるが、その背後にあるものは、設計・制御可能な分子が持つ自由度である。

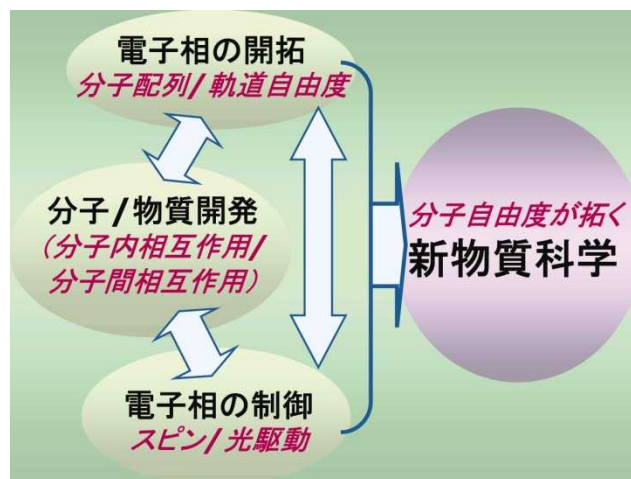
ここでは、

(1)電子相の開拓

(2)外部刺激による電子相の制御

(3)分子及び分子配列の開発と制御

を3本柱として研究を推進する。これにより、分子自由度が決定的な役割を果たす新規な物性を開拓し、外場による分子自由度の応答感性を用いた物質相制御への道筋をつける。これは、固体物質の格子点に内在する自由度を化学的物理的に設計、開発し、そこから新しい電子相の創出と制御を行う真のボトムアップ型物性研究であり、物質科学において新しい潮流となることが期待される。



(1) 電子相の開拓

a) 分子配列自由度を利用した新規電子相の開拓；分子性物質における多様な分子配列と柔らかな格子が物性の多様性を生むことに注目し、化学的、物理的圧力を用いることで、分子配列の連続的な制御を行い、質的に異なるウィグナー結晶、誘電転移、超伝導転移、Dirac 粒子の物理学を繋ぐ。さらに、従来、それぞれの物性に依拠して独立して研究されてきた物質群の境界で、新しい電子相を探索する。

b) 分子軌道設計による新規電子相の開拓；原子軌道と異なり、分子軌道は設計・構築することができる。また、分子軌道は空間的広がりを持つため、環境に応じて敏感に変化する。そこで、分子内の化学置換による軌道の設計や、プロトンの変位等の環境に対する軌道の高い感性を利用して新規電子相を開拓し、伝導性から磁性、誘電性に渡る広汎な物性の発現を目指す。

(2)外部刺激による電子相の制御

a) スピン自由度を利用した電子相制御；物質の巨視的磁性は、電子位置に作用する内場とその揺らぎで規定され、内場は一般に相互作用する電子スピンから作られる。そこで、 π -d 相互作用系に注目し、静的及び動的な外場で局在d 電子スピンを制御することにより、 π 電子に作用する π -d 交換内場を操り、磁場誘起超伝導の高速制御や、金属-絶縁体転移の制御などの可能性を追求する。スピンチャンネルを用いた多軌道系の新しい静的及び動的相制御に挑む。

b) 光による電子相制御；分子性導体の特徴的な電子相の出現とその安定化には、電子間相互作用と同時に、多様な分子自由度が本質的な役割を演じている。実際に、適当な外場を加えることによって相転移が生じるとき、その相転移点近傍において、電子系と分子自由度との相互作用が複雑に絡み合った集団応答がしばしば顕著に現れる。これらの特徴的な集団応答や相転移を能動的に誘起する最も有効な方法は、光励起による方法である。そこで、電子系と分子自由度との相互作用に基づく集団光応答の精密検出を行い、その機構を解明する。さらに、物質の最適化によって集団光応答から相転移を誘起させ、超高速かつ高効率の物性制御を実現する。

(3)分子及び物質の開発

a) 分子内自由度の開発；新規な自由度を有する物質の開発は、本学術領域研究の根幹をなす。ここでは物質を構成する分子の内部構造自由度の開発を目指した分子設計から合成までを行う。特に、電子移動と分子の形状自由度が強く相互作用する分子、導電性と光機能性など分子内で相互作用し得る複数の機能中心が存在する分子や、新しい骨格を有する分子を開発する。

b) 分子間相互作用の制御；分子そのものの開発と、分子の凝集形態の開発は、分子性物質開発の両翼である。ここでは、後者、すなわち多様な分子の自由度を利用して分子間相互作用の制御を行なう。特に、バンド幅制御や外場応答性を示す分子凝集形態の開発を行うが、同時に熱電効果等の機能に関する理論計算も行い、合成にフィードバックする。