

研究領域名	分子自由度が拓く新物質科学
領域代表者名	鹿野田 一司 （東京大学・大学院工学系研究科・教授）
領域代表者からの応募総額	12億6700万円
研究期間	平成20年度～24年度

分子自由度を利用した新しい電子相の創出と相制御の実現

1. 本領域の目的

固体物質における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にかかっている。原子が積み上げで形成され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。分子の持つ異方的な形状によってもたらされる分子配列の多様性、分子内の化学修飾や原子置換によってそのエネルギーや空間的広がりを大きく変える分子軌道の設計性、さらに、屈曲や伸縮などの内部構造の柔軟性など、分子性物質に特有の“分子自由度”が多彩な物性を生み出す源泉となる。本領域研究では、これらの分子自由度を利用して物質科学の新しい展開を図る。

2. 本領域の内容

分子自由度を基軸とした新しい学術領域の創成という広い視点から、物質科学の3つの側面、すなわち(i)電子相の開拓、(ii)電子相の制御、(iii)物質の開発、において以下の戦略で研究を推進する。

(i) 電子相の開拓：分子配列自由度と分子軌道自由度を利用した電子相の開拓。

(ii) 電子相の制御：スピン自由度の操作と光励起による分子自由度の刺激と相制御。

(iii) 物質開発：分子内自由度と凝縮相を決める分子間相互作用自由度の開発。

3. 期待される成果

本領域研究では、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。

【キーワード】

分子自由度：分子が持つ構造、配列、電子軌道の自由度で、分子性物質に発現する多彩な物性の源泉となるものである

【科学研究費補助金審査部会における所見】

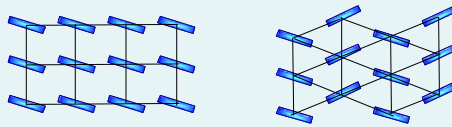
本研究領域は、分子性物質の持つ配列自由度と内部構造自由度を統合した分子自由度という視点で分子性物質の研究を統合的・組織的に推進することで、物質科学に新しい潮流を作ることをめざした提案である。領域代表者を中心として、分子自由度を利用した物理と化学を融合させた新しい物質科学の創成に向けて、適切に研究計画の立案がなされているとともに、各計画研究に理論と実験の研究者が配置されており、バランスのよい組織構成となっている。また、世界で活躍できる若手研究者の育成に対しても十分に配慮されている。

分子自由度が拓く新物質科学

分子が持つ自由度

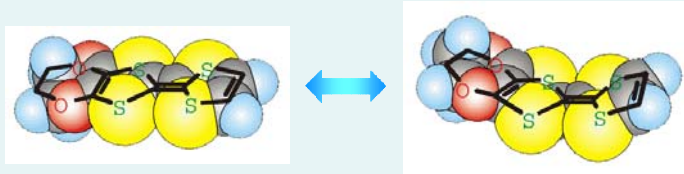
分子配列の自由度

多様性



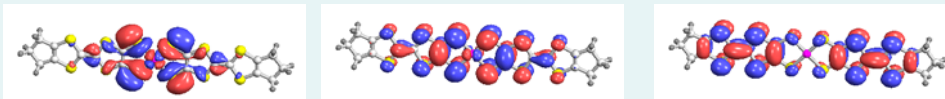
分子構造の自由度

柔軟性



分子軌道の自由度

設計性



外場による分子自由度の刺激

可視光

電子励起

テラヘルツ光

分子振動
励起

ミリ波

10-400GHz

スピン励起

絶縁体

電子密度

金属

局在スピン

π -d相互作用

伝導 π 電子

π 電子の伝導特性や
長距離秩序の制御

新しい固体電子相の創出

新しい電子相制御の実現

新規物質開発