

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 4 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21K05004

研究課題名(和文) 超分子相互作用による集積化と振電相互作用の制御によるエネルギー変換材料の開発

研究課題名(英文) Development of energy-conversion materials by control of supramolecular organization and vibronic interaction

研究代表者

中野 義明 (Nakano, Yoshiaki)

京都大学・理学研究科・助教

研究者番号：60402757

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：有機熱電材料の開発を目的として、アルキル基を導入CnDABCO ($C_n = C_nH_{2n+1}$)カチオンとTCNQ系分子から成る有機導電体を中心に構造と物性の関係を検討した。TCNQは1D積層構造を形成しやすいのに対し、F2TCNQ、F4TCNQは、1D積層構造に加え、2D構造を形成した。CnDABCOは、DABCO部位やアルキル鎖間の弱い相互作用、低い対称性により、柔粘性の付与、構造の複雑化に寄与することが分かった。これらの物質では、柔粘性に起因する秩序-無秩序転移を示すものが多数見出された。また、(C6DABCO)(TCNQ)2は低い熱伝導率を示し、熱伝導率を制御するための指針を得ることができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

持続可能な社会の実現に向け、希少・毒性元素を含まず、廃棄が容易な有機熱電材料の高性能化が求められている。研究が遅れているものの構造を明確にできる低分子系材料を対象として有機熱電材料開発を行った。アルキル基を導入した有機カチオンとテトラシアノキノジメタン系アクセプター分子から成る様々な有機導電体の結晶構造・物性について検討したところ、アルキル鎖間の弱い相互作用や結晶構造の複雑化が、熱電材料に求められる熱伝導率の低減化に寄与していることが示唆された。本研究の成果は、アルキル基の導入による分子レベルでの熱伝導率制御という学術的意義のみならず、資源・エネルギー・環境問題解決へ向けて社会的意義は大きい。

研究成果の概要(英文)：In order to develop organic thermoelectric materials, we investigated the structure-property relationship with a focus on organic conductors composed of alkyl group-incorporated CnDABCO ($C_n = C_nH_{2n+1}$) cations and TCNQ-based molecules. TCNQ tends to form 1D stacking structures, whereas F2TCNQ and F4TCNQ, in addition to 1D stacking structures, formed 2D structures. CnDABCO was found to contribute to plasticity and structural complexity due to weak interactions between DABCO moieties and alkyl chains and the low symmetry. A number of these materials were found to exhibit order-disorder transitions due to the plasticity. In addition, (C6DABCO)(TCNQ)2 exhibits low thermal conductivity, providing a guideline for controlling thermal conductivity.

研究分野：物性有機化学

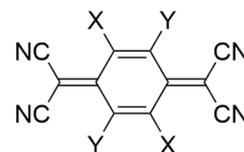
キーワード：有機導電体 超分子化学 熱電材料

1. 研究開始当初の背景

熱電材料の開発は持続可能な社会を実現する上で重要であるが、実用レベルの熱電材料は無機物であり、希少・毒性元素を含有している。一方、有機物は豊富な元素から構成され、廃棄処理も容易で環境負荷が小さい。熱電材料の性能を示す無次元性能指数 ZT は、ゼーベック係数 S 、電気伝導度 σ 、電子熱伝導度 κ_e 、格子熱伝導度 κ_{ph} を用いて $ZT = S^2\sigma T / (\kappa_e + \kappa_{ph})$ で表され、大きいほど性能がよい。これまでの無機系熱電材料の研究において、高い ZT を実現するには、熱伝導の担い手であるフォノン(格子振動)にとってはガラスのように構造の乱れた物質でありながら、電子にとっては結晶のような高導電性物質であればよいという開発指針が提案されている。この概念は PGEC (Phonon Glass Electron Crystal) と呼ばれ、カゴ状物質でカゴ内のゲスト原子がおもちゃのガラガラのように運動するラットリングにより実現可能とされている。また、カゴ状構造がなくてもラットリング様の大振幅振動や構造的乱れの導入により、 κ_{ph} を抑制できることが指摘されている。さらに、低次元性に由来するバンド端での電子状態密度の特異性や強相関電子系を利用することにより、高い ZT を達成できると提案されている。一方、 C_{60} フラーレンを含む様々な低分子系半導体において、巨大ゼーベック効果が発見された。その発現機構の詳細は未だ解明されていないが、振電相互作用との関連が指摘されており、これまで熱電材料としてあまり注目されてこなかった低分子系材料の中から優れた熱電材料が見出される可能性は大いにある。

2. 研究の目的

有機材料は、一般的に熱伝導度が低い、低次元、かつ、強相関電子系といった特徴を有し、巨大ゼーベック効果が発見される等、高い ZT を示す可能性を有するものの未だ実用レベルの熱電特性を示す物質が開発されていない。また有機熱電材料の中でも、特に n 型の材料開発が遅れている。さらに、優れた有機熱電材料を開発するためには、PGEC、低次元性、強相関電子系、振電相互作用といった複数の概念を適切に物質開発に取り入れる必要がある。以上を鑑み、本研究では、低次元強相関電子系を構築することが知られているテトラシアノキノジメタン (TCNQ) 系アクセプター分子を中心に、形状・大きさのミスマッチ、構造的乱れ、ラットリング様の非調和振動の導入によるフォノン散乱を誘起し、 κ_{ph} の低減が期待される対成分と組み合わせた有機導電体を開拓する。得られた物質の結晶構造と物性の相関を明らかにすることにより、有機熱電材料のための設計指針を導出することを目的とする。



TCNQ: X = Y = H
F₂TCNQ: X = F, Y = H

3. 研究の方法

n 型有機熱電材料を開発するため、導電性成分として TCNQ 系アクセプター分子を用い、アルキル基を導入した有機カチオンを対成分とする有機導電体を作製し、その結晶構造、導電性、磁性、ゼーベック係数、熱伝導率の物性との関係を調べた。また、さらに詳細に物性発現機構を明らかにするため、結晶構造に基づく強束縛近似のバンド計算、分光学的測定を行った。

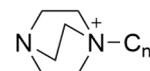
4. 研究成果

(1) TCNQ 錯体

各種 TCNQ 錯体の結晶は、TCNQ と $(C_n\text{DABCO})\text{I}$ の混合、TCNQ と $(C_n\text{DABCO})(\text{TCNQ})$ の混合、複分解法により作製した。

$(C_1\text{DABCO})(\text{TCNQ})_2$ (1) は、TCNQ と $(C_1\text{DABCO})\text{I}$ の混合法により作製した。ただし、同時に $(C_1\text{DABCO})_2(\text{TCNQ})_3$ も得られることが分かった。錯体 1 では、300 K では結晶学的に 1 種類の TCNQ 分子が 2 量化した 1 次元積層カラムを形成していたが、100 K では結晶学的に 2 種類の TCNQ 分子がそれぞれ 2 量化した 1 次元積層カラムを形成していた。 $C_1\text{DABCO}$ は 300 K ではディスオーダーしていたが、100 K ではオーダーしていた。導電性を評価したところ、室温導電率 $1.1 \times 10^{-4} \text{ S cm}^{-1}$ 、活性化エネルギー $E_a = 0.29 \text{ eV}$ の半導体的挙動を示した。バンド計算を行ったところ実効のハーフフィルドとなっており、錯体 1 はダイマーモット絶縁体であると考えられる。

$(C_2\text{DABCO})(\text{TCNQ})_2$ (2) は、TCNQ と $(C_2\text{DABCO})\text{I}$ の混合法により作製した。錯体 2 では、結晶学的に独立な TCNQ 分子が 2 種類存在し、それぞれ均一な 1 次元積層カラム、2 量化した 1 次元積層カラムを形成していた。 $C_2\text{DABCO}$ は 300 K ではディスオーダーしていたが、100 K ではオーダーしていた。導電性を評価したところ、室温導電率 2.9 S cm^{-1} 、活性化エネルギー $E_a = 36 \text{ meV}$ の半導体的挙動ながら、室温付近では高い導電性を示した。これは、TCNQ の均一な積層カラムに由来すると考えられる。しかしながら、150 K 以下の低温域で $E_a = 0.18 \text{ eV}$ と活性化エネルギーが増大することが分かった。バンド構造は 300 K と 100 K でほとんど変化は無く、300 K では均一な 1 次元積層の方は、バンドギャップ $E_a = 0.001 \text{ eV}$ と小さな値であったのに対し、2



$C_n\text{DABCO}$
($C_n = C_n\text{H}_{2n+1}$, $n = 1-10$)

量化した1次元積層の方は $E_a = 0.11$ eV で実効的にハーフフィルドとなっていた。また、磁化率を測定したところ、1次元反強磁性鎖とパウリ常磁性的な成分の和で記述できるような温度依存性が観測された。低温域での活性化エネルギーの増大については、今後、赤外・ラマン分光法により TCNQ 分子の価数を追跡することにより、検討する予定である。

(C₃DABCO)(TCNQ)₂ (3)は、TCNQ と(C₃DABCO)I の混合合法により作製した。錯体 3 では、結晶学的に独立な2種類の TCNQ 分子が交互に積層し、やや2量化した1次元積層カラムを形成していた。結合長より、TCNQ の価数は-0.3 価、-0.7 価と見積もられた。バンド構造は実効的ハーフフィルドになっており、ダイマーマット状態と電荷秩序状態が共存していると考えられる。導電性を評価したところ、室温導電率 7.1 S cm⁻¹、活性化エネルギー-0.15 eV の半導体的挙動を示した。また、1次元反強磁性鎖のような、90 K 付近に極大を持つ磁化率の温度依存性が観測された。

(C₄DABCO)(TCNQ)₂ (4)は、TCNQ と(C₄DABCO)I の混合合法により作製した。錯体 4 では、結晶学的に独立な2種類の TCNQ 分子が2量体を形成し、さらにその2量体が2量化した1次元積層カラムを形成していた。導電性を評価したところ、室温導電率 8.0×10^{-1} S cm⁻¹、活性化エネルギー-0.29 eV の半導体的挙動を示した。100 K でのバンド構造は、バンド絶縁体となっていたが、磁化率を測定したところ、1次元交互反強磁性鎖とキュリー不純物の和で記述されるような温度依存性を示した。したがって、錯体 4 は低次元強相関電子系であると考えられる。

(C₅DABCO)(TCNQ)₂ (5)は、TCNQ と(C₅DABCO)I の混合合法により作製した。錯体 5 では、結晶学的に独立な TCNQ が6種類、C₅DABCO が3種類存在していた。その6種類の TCNQ 分子は、6量化した1次元積層カラムを形成していた。C₅DABCO はオーダーしており、TCNQ の積層方向に平行に配向したものと垂直に配向したものが存在し、結晶構造がより複雑になっていた。導電性を評価したところ、室温導電率 1.5×10^{-1} S cm⁻¹、活性化エネルギー-0.19 eV の半導体的挙動を示した。磁化率は、6量体に3スピンの直線的に配置したモデルで記述することができ、低次元強相関電子系であると考えられる。

(C₆DABCO)(TCNQ)₂ (6)は、TCNQ と(C₆DABCO)I の混合合法により作製した。錯体 6 では、300 K では結晶学的に独立な2種類の TCNQ 分子が、4量化した1次元積層カラムを形成していたが、100 K では結晶学的に独立な TCNQ 分子が4種類となり、2種類の4量体が交互に積層し、1次元積層カラムを形成していた。C₆DABCO は、300 K では結晶学的に1種類でディスオーダーしていたが、100 K では結晶学的に2種類となりオーダーした。また、ヘキシル基間には接近が見られた。導電性を評価したところ、TCNQ 積層方向で、室温導電率 2.8 S cm⁻¹、活性化エネルギー-0.29 eV、TCNQ 積層に垂直な方向で、室温導電率 9.0×10^{-3} S cm⁻¹、活性化エネルギー-0.29 eV の半導体的挙動を示した。TCNQ 積層に垂直な方向で、熱伝導率の測定を行ったところ、室温で 0.4 W m⁻¹ K⁻¹ という低い値が観測された。これは、イオニックな結晶の中に、ヘキシル基間に働く分散力という弱い分子間相互作用を導入したことに起因すると考えられる。

(C₇DABCO)(TCNQ)₂ (7)は、TCNQ と(C₇DABCO)I の混合合法により作製した。錯体 7 では、結晶学的に独立な2種類の TCNQ が2量体を形成し、さらにその2量体が2量化した1次元積層カラムを形成していた。C₇DABCO は300 K 以上ではディスオーダーしており、ヘプチル基間に接近が見られた。導電性を評価したところ、室温導電率 2.0×10^{-1} S cm⁻¹、活性化エネルギー-0.29 eV の半導体的挙動を示した。バンド計算からはバンド絶縁体と考えられたが、磁化率は1次元交互反強磁性鎖で記述されるような温度依存性を示し、錯体 7 は、低次元強相関電子系と考えられる。

TCNQ と(C₈DABCO)I の混合合法では、(C₈DABCO)₂(TCNQ)₅ (8)、(C₈DABCO)₄(TCNQ)₉ (9)が混合物として得られたため、TCNQ と(C₈DABCO)(TCNQ)の混合比を調整することにより、錯体 8、錯体 9 を得た。

錯体 8 では、結晶学的に独立な3種類の TCNQ 分子が5量化した1次元積層カラムを形成し、結晶学的に1種類の C₈DABCO のオクチル基間に接近が見られた。バンド計算の結果、バンド絶縁体であった。導電性を評価したところ、室温導電率 2.1×10^{-4} S cm⁻¹、活性化エネルギー-0.23 eV の半導体的挙動を示した。

錯体 9 では、結晶学的に独立な5種類の TCNQ 分子が9量化した1次元積層カラムを形成し、結晶学的に2種類の C₈DABCO のオクチル基間に接近が見られた。バンド計算の結果、バンド絶縁体であった。室温導電率 1.6×10^{-3} S cm⁻¹、活性化エネルギー-0.24 eV の半導体的挙動を示した。

(C₉DABCO)₂(TCNQ)₅ (10)は、TCNQ と(C₉DABCO)I の混合合法により作製した。錯体 10 では、結晶学的に独立な3種類の TCNQ 分子が5量化した1次元積層カラムを形成し、C₉DABCO の

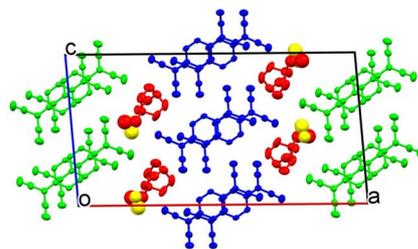


図 1 錯体 3 の結晶構造。

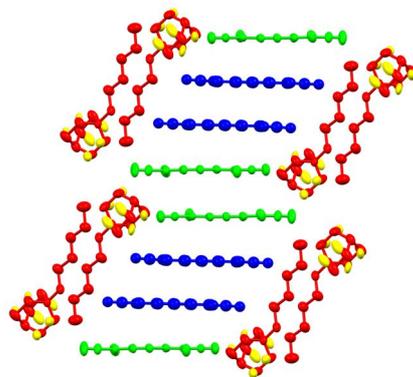


図 2 錯体 6 における TCNQ の C₆DABCO のヘキシル基の接近。

ノニル基間に接近が見られた。バンド計算の結果、バンド絶縁体であった。導電性を評価したところ、室温導電率 $1.3 \times 10^{-4} \text{ S cm}^{-1}$ 、活性化エネルギー 0.28 eV の半導体的挙動を示した。

(C₁₀DABCO)(TCNQ)₃ (**11**)は、TCNQ と(C₁₀DABCO)I の混合法により作製した。錯体 **11** では、結晶学的に独立な 3 種類の TCNQ 分子が孤立した 6 量体を形成していた。C₁₀DABCO のデシル基間に接近が見られ、C₁₀DABCO が 6 量体間に挿入されていた。バンド計算の結果、バンド絶縁体であった。導電性を評価したところ、室温導電率 $4.7 \times 10^{-4} \text{ S cm}^{-1}$ 、活性化エネルギー 0.18 eV の半導体的挙動を示した。

以上、得られた錯体の傾向として、C₁₀DABCO 塩(**11**)では TCNQ の 1 次元積層カラムの形成が阻害されていたが、基本的には TCNQ は 1 次元積層カラムを形成し、半導体的導電挙動を示す。また、強束縛近似のバンド計算でバンド絶縁体と予想される塩であっても、低次元局在スピン系の磁化率の温度依存性が観測されている。得られた全ての塩の磁化率の測定を行っていないものの、基本的には低次元強相関電子系であると考えられ、今後、さらに磁化率の解析を進める予定である。C_nDABCO カチオンは、結晶に柔粘性を付与し、オーダー - ディスオーダー転移を誘起している。また、ブチル基以上の長さのアルキル基を有する C_nDABCO カチオンは、アルキル鎖間に分散力に起因すると考えられる接近が見られる。現在までに熱電材料の性能を示す無次元性能指数が 0.1 以上の物質は得られていないが、(C₆DABCO)(TCNQ)₂ (**6**)における熱伝導率の低減は、イオン性の結晶中に弱い分子間相互作用の導入が原因と考えられる。本成果は、DABCO 部位のように柔粘性を示す骨格やアルキル基の導入といった化学修飾により、熱電材料に求められる熱伝導率の低減を実現できることを示唆する。

(2) F₂TCNQ 錯体

F₂TCNQ と (C₁DABCO)I との混合法により、(C₁DABCO)₄(F₂TCNQ)₄(I₂) (**12**) と (C₁DABCO)₄(F₂TCNQ)₄I₃·THF (**13**)を得た。錯体 **12** では、結晶学的に独立な 4 種類の F₂TCNQ 分子が 2 量化した 1 次元積層カラムを形成していた。また、C₁DABCO は I₂ で架橋され、C₁DABCO⋯I₂⋯C₁DABCO のダンベル型構造で結晶中に存在していた。バンド計算の結果、バンド絶縁体であり、室温導電率 $8.0 \times 10^{-10} \text{ S cm}^{-1}$ の絶縁体であった。

錯体 **13** では、結晶学的に独立な 4 種類の F₂TCNQ 分子が 2 量化した 1 次元積層カラムを形成していた。また、F₂TCNQ 積層カラムに平行に、C₁DABCO の 1 次元鎖、THF と I₃ が交互に配列した 1 次元鎖が形成されていた。バンド計算の結果、バンド絶縁体であり、室温導電率 $4.9 \times 10^{-9} \text{ S cm}^{-1}$ の絶縁体であった。

(C₂DABCO)₂(F₂TCNQ)₂·THF (**14**)は、THF 中での F₂TCNQ と(C₂DABCO)I との混合法により作製した。錯体 **14** では、結晶学的に独立な 2 種類の F₂TCNQ 分子が 2 量化した 1 次元積層カラムを形成し、C₂DABCO が F₂TCNQ の積層カラムに平行に 1 次元鎖を形成していた。THF は、C₂DABCO の 1 次元鎖の間に挿入されていた。バンド計算の結果、バンド絶縁体であった。

錯体 **14** をアセトニトリルに溶解し、ジエチルエーテルを蒸気拡散させることにより、(C₂DABCO)(F₂TCNQ) (**15**)を得た。錯体 **15** では、F₂TCNQ 分子が 2 量化した 1 次元積層カラムを形成し、C₂DABCO が F₂TCNQ の積層カラムに平行に 1 次元的に配列していた。バンド計算の結果、バンド絶縁体であった。

(C₂DABCO)₂(F₂TCNQ)₃ (**16**)は、THF/アセトニトリル中での F₂TCNQ と(C₂DABCO)I との混合法により作製した。錯体 **16** では、300 K において結晶学的に独立な 2 種類の F₂TCNQ 分子が存在し、-1 価の F₂TCNQ 分子が 2 量体を形成し、0 価の F₂TCNQ の単量体が、-1 価の 2 量体を架橋することで、波打った 2 次元シート構造を形成していた。C₂DABCO は 1 次元鎖を形成しており、ディスオーダーしていた。100 K において、結晶学的に独立な分子は、F₂TCNQ は 3 種類、C₂DABCO は 2 種類に増え、C₂DABCO はオーダーしていた。バンド計算の結果、バンド絶縁体となっており、室温導電率 $3.3 \times 10^{-3} \text{ S cm}^{-1}$ 、活性化エネルギー $E_a = 0.11 \text{ eV}$ の半導体的挙動を示した。237 K 付近に、電気抵抗率の異常が見られたことから、この温度付近で C₂DABCO のオーダー - ディスオーダーが関連する相転移が起きているのではないかと考えられる。

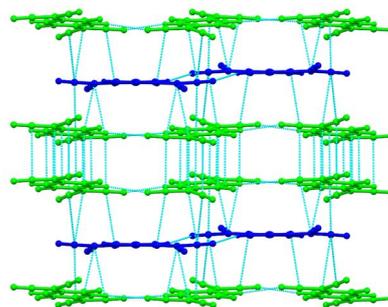


図3 錯体 **16** における F₂TCNQ の 2 次元シート構造。

以上のように、TCNQ にフッ素を導入した F₂TCNQ では電子アクセプター性が向上した結果、-1 価の状態を取りやすくなり、-1 価の塩や、-1 価、0 価に不均化した塩になる傾向があり、TCNQ 錯体でよく見られた、C₂DABCO : F₂TCNQ = 1 : 2 の錯体は得られなかった。一方、フッ素を導入した結果、分子間相互作用に変化が見られ、TCNQ 錯体では観測されなかった 2 次元シート構造が観測された。また、F₂TCNQ 錯体においても C_nDABCO は結晶に柔粘性を付与する成分として機能し、(C₂DABCO)₂(F₂TCNQ)₃ (**16**)において、C₂DABCO のオーダー - ディスオーダーに起因すると考えられる相転移が観測された。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Huang Pingping, Yoshida Yukihiro, Nakano Yoshiaki, Yamochi Hideki, Hayashi Mikihiro, Kitagawa Hiroshi	4. 巻 61
2. 論文標題 Strong Proton Electron Coupling in Planar Metal Complex with Redox Active Ligands	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202204521/1~6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/anie.202204521	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Romanenko Nikita R., Kuzmin Alexey V., Khasanov Salavat S., Faraonov Maxim A., Yudanova Evgeniya I., Nakano Yoshiaki, Otsuka Akihiro, Yamochi Hideki, Kitagawa Hiroshi, Konarev Dmitri V.	4. 巻 51
2. 論文標題 Complexes of transition metal carbonyl clusters with tin(II) phthalocyanine in neutral and radical anion states: methods of synthesis, structures and properties	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 2226~2237
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/d1dt04061h	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計24件（うち招待講演 3件/うち国際学会 4件）

1. 発表者名 増田怜旺, 矢野亜実, 石川優季, 石川学, 大塚晃弘, 中野義明
2. 発表標題 アルキル基を導入したカチオンとのフッ素化TCNQラジカルアニオン塩の結晶構造と物性
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023大阪
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 立木実, 中井暁量, 石川学, 大塚晃弘, 中野義明
2. 発表標題 N-アルキル化DABCOカチオンとのTCNQラジカルアニオン塩(CnDABCO)x(TCNQ)yの構造と物性
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023大阪
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 矢野亜実, 増田怜旺, 石川学, 大塚晃弘, 中野義明
2. 発表標題 アルキル基を有するカチオンを対成分とするフッ素化TCNQラジカルアニオン塩の結晶構造と物性
3. 学会等名 第31回有機結晶シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 立木実, 中井暁量, 石川学, 大塚晃弘, 中野義明
2. 発表標題 N-アルキルDABCOカチオンとTCNQラジカルアニオンからなる電荷移動錯体の結晶構造と物性
3. 学会等名 第31回有機結晶シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小濱智宏, 増田怜旺, 石川学, 大塚晃弘, 中野義明
2. 発表標題 N-アルキルイソキノリニウムを対カチオンとするTCNQ系ラジカルアニオン塩の構造と物性
3. 学会等名 第31回有機結晶シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 KIM YONGJIN, 梁瀬歩輝, 山田覚巳, 石川学, 大塚晃弘, 中野義明
2. 発表標題 環状第4級アンモニウムTCNQ錯体の結晶構造と物性
3. 学会等名 第19回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 澤田卓寛, 小濱智宏, 増田怜旺, 石川学, 中野義明, 大塚晃弘
2. 発表標題 N-アルキル化(イソ)キノリニウムとTCNQ系アクセプター分子から成る電荷移動錯体の構造と物性
3. 学会等名 第19回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 立木実, 中井暁量, 石川学, 大塚晃弘, 中野義明
2. 発表標題 中鎖アルキル化DABCOとTCNQから成るラジカルアニオン塩の結晶構造と物性
3. 学会等名 第19回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Y. Nakano, A. Nakai, R. Masuda, T. Yano, M. Tsuiki, Y. Ishikawa, M. Ishikawa, A. Otsuka, H. Yoshino
2. 発表標題 Crystal Structures and Physical Properties of TCNQ and Fluorinated TCNQ Radical Anion Salts with N-Alkylated DABCO Cations
3. 学会等名 International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) Bali 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Nakano, A. Nakai, R. Masuda, T. Yano, M. Tsuiki, Y. Ishikawa, T. Kohama, T. Sawada, I. Yanase, K. Yamada, M. Ishikawa, A. Otsuka, H. Yoshino
2. 発表標題 Development of TCNQ and Fluorinated TCNQ Radical Anion Salts with Alkylated Organic Cations toward Thermoelectric Application
3. 学会等名 MRM2023/IUMRS-ICA2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中井暁量, 小川凌平, 石川学, 大塚晃弘, 矢持秀起, 吉野治一, 中野義明
2. 発表標題 N-アルキルDABCOを対成分とするTCNQラジカルアニオン塩の結晶構造と物性
3. 学会等名 第32回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 矢野亜実, 清水さらら, 石川学, 大塚晃弘, 矢持秀起, 中野義明
2. 発表標題 N-アルキルDABCOを対成分とするF4TCNQラジカルアニオン塩の結晶構造と物性
3. 学会等名 第30回有機結晶シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 増田怜旺, 石川学, 大塚晃弘, 中野義明
2. 発表標題 N-アルキルDABCOを対成分とするF2TCNQラジカルアニオン塩の結晶構造と物性
3. 学会等名 第30回有機結晶シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Ishikawa, Y. Nakano, Y. Takahashi, K. Ishida, R. Ogawa, H. Fukushima, H. Yamochi, A. Otsuka, H. Yoshino
2. 発表標題 Thermoelectric property of molecular conductor based on 4,5-ethylenedioxy-4'-iodotetrathiafulvalene (EDO-TTF-I) showing electronic and structural phase transition
3. 学会等名 International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) Kota Kinabalu 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Nakano, M. Ishikawa, R. Ogawa, A. Nakai, K. Ishida, S. Shimizu, S. Okamoto, H. Yamochi, A. Otsuka, H. Yoshino
2. 発表標題 Development of TCNQ Conductors with N-Alkylated DABCO Cations toward Thermoelectric Application
3. 学会等名 International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) Kota Kinabalu 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 増田怜旺, 石川学, 大塚晃弘, 中野義明
2. 発表標題 N-アルキル化DABCOを対成分とするF2TCNQ陰イオンラジカル塩の結晶構造と電気特性
3. 学会等名 第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 立木実, 中井暁量, 石川学, 中野義明, 大塚晃弘
2. 発表標題 N-アルキル化DABCOとTCNQから成る電荷移動錯体の構造と物性
3. 学会等名 第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 矢野亜実, 石川優李, 石川学, 大塚晃弘, 中野義明
2. 発表標題 N-アルキル化DABCOとF4TCNQから成る分子性導体の結晶構造および物性
3. 学会等名 第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中井暁量, 立木実, 石川学, 中野義明, 大塚晃弘
2. 発表標題 N-アルキル化DABCOを対成分とするTCNQ部分電荷移動塩の構造と物性
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会(2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 増田怜旺, 石川学, 大塚晃弘, 中野義明
2. 発表標題 N-アルキルDABCOを対カチオンとするF2TCNQラジカルアニオン塩の結晶構造と物性
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会(2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 川村泰喜, 橋本顕一郎, 吉見一慶, 石川学, 中野義明, 大塚晃弘, 矢持秀起, 小林晃人
2. 発表標題 有機導体(EDO-TTF-I)2ClO4の第一原理計算と秩序状態の解析
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小川凌平, 石田耕大, 岡本尚大, 石川学, 中野義明, 大塚晃弘, 矢持秀起
2. 発表標題 モノアルキル化DABCOとTCNQ誘導体から成るラジカルアニオン塩の構造と物性
3. 学会等名 第15回分子科学討論会2021札幌
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 川村泰喜, 橋本顕一郎, 吉見一慶, 石川学, 中野義明, 大塚晃弘, 矢持秀起, 春木理恵, 熊井玲児, 足立伸一, 小林晃人
2. 発表標題 第一原理計算による有機導体(EDO-TTF-I)2ClO4の電子状態の解析
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会(2022年)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉野治一, 石川学, 小川凌平, 中井暁量, 中野義明, 大塚晃弘, 矢持秀起
2. 発表標題 改良型定常比較法による有機伝導体(EDO-TTF-I)2ClO4のzT
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会(2022年)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

分子性材料分科ホームページ http://kuchem.kyoto-u.ac.jp/mms/index.html 京都大学大学院理学研究科化学専攻分子性材料分科 http://www.kuchem.kyoto-u.ac.jp/mms.html

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	吉野 治一 (Yoshino Harukazu) (60295681)	大阪公立大学・国際基幹教育機構・教授 (24405)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	小川 凌平 (Ogawa Ryohei)		
研究協力者	清水 さらら (Shimizu Sarara)		
研究協力者	中井 暁量 (Nakai Akikazu)		
研究協力者	増田 怜旺 (Masuda Reo)		
研究協力者	矢野 亜実 (Yano Tsugumi)		
研究協力者	立木 実 (Tsuiki Minoru)		
研究協力者	石川 優李 (Ishikawa Yuri)		
研究協力者	足立 裕太 (Adachi Yuta)		

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	澤田 卓寛 (Sawada Takuhiro)		
研究協力者	梁瀬 歩輝 (Yanase Ibuki)		
研究協力者	山田 寛巳 (Yamada Kakumi)		
研究協力者	小濱 智宏 (Kohama Tomohiro)		
研究協力者	Kim Yongjin (Kim Yongjin)		
研究協力者	石田 耕大 (Ishida Kohdai)		
研究協力者	岡本 尚大 (Okamoto Syota)		
研究協力者	石川 学 (Ishikawa Manabu)		

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	大塚 晃弘 (Otsuka Akihiro)		
研究協力者	矢持 秀起 (Yamochi Hideki)		
研究協力者	春木 理恵 (Haruki Rie)		
研究協力者	熊井 玲児 (Kumai Reiji)		
研究協力者	足立 伸一 (Adachi Shin-ichi)		
研究協力者	川村 泰喜 (Kawamura Taiki)		
研究協力者	橋本 顕一郎 (Hashimoto Kenichiro)		
研究協力者	吉見 一慶 (Yoshiimi Kazuyoshi)		

6. 研究組織(つづき)

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	小林 晃人 (Kobayashi Akito)		
研究協力者	Huang Pingping (Huang Pingping)		
研究協力者	吉田 幸大 (Yoshida Yukihiro)		
研究協力者	林 幹大 (Hayashi Mikihiro)		
研究協力者	北川 宏 (Kitagawa Hiroshi)		
研究協力者	Romanenko Nikita (Romanenko Nikita)		
研究協力者	Kuzmin Alexey (Kuzmin Alexey)		
研究協力者	Khasanov Salavat (Khasanov Salavat)		

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	F a r a o n o v M a x i m (Faraonov Maxim)		
研究協力者	Y u d a n o v a E v g e n i y a (Yudanov Evgeniya)		
研究協力者	K o n a r e v D m i t r i (Konarev Dmitri)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
ロシア連邦	化学物理研究所	固体物理研究所	