

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年6月12日現在

機関番号：12601

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2008 ～ 2012

課題番号：20110001

研究課題名（和文） 新学術領域研究「分子自由度が拓く新物質科学」の研究総括

研究課題名（英文） Conducting board of Project, 「New Frontier of Materials Science Opened by Molecular Degrees of Freedom」

研究代表者

鹿野田 一司（KANODA KAZUSHI）

東京大学・大学院工学系研究科・教授

研究者番号：20194946

研究成果の概要（和文）：本新学術領域研究は、分子自由度が積極的に関与する新しい物性研究領域の開拓を目指してきたが、本総括班は、研究活動を促進するための研究項目毎あるいは研究項目間に跨るテーマ重視の小規模研究会の開催、成果の発信と国際的な研究の連携を強化するための国際シンポジウムや成果報告会の開催と成果報告書の刊行、若手研究者の育成のための国際スクールの開催等、本領域研究の活動全般を統括し、所望の成果を得た。

研究成果の概要（英文）：The present research project aimed to explore new frontiers in condensed matter research, where molecular degrees of freedom play an essential role in materials' properties. As the conducting board of the project, we held numbers of small workshops highlighting particular topics dealt with in each research sub-groups or across them, held international symposiums and published research reports to disseminate the achievements and promote the international collaboration/coalition, and co-hosted international schools for graduate students. Through the project period, we have presided over the project to have fruitful outcomes.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	3,000,000	900,000	3,900,000
2009年度	4,500,000	1,350,000	5,850,000
2010年度	9,000,000	2,700,000	11,700,000
2011年度	10,800,000	3,240,000	14,040,000
2012年度	13,500,000	4,050,000	17,550,000
総計	40,800,000	12,240,000	53,040,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性II

キーワード：強相関電子系、磁性、低温物性、半導体物性、分子性固体

1. 研究開始当初の背景

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。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。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、類似の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。したがって、この自由度が積極的に関与する物性の開拓が強く望まれていた。

2. 研究の目的

分子性物質は多様で制御可能な分子配列、設計・開発可能な分子軌道、さらにこれらと強く結合する分子の屈曲など、他の物質群には無い独特な自由度を持つ。本領域では、これらの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す。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るが、新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、(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) 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) スピン自由度の操作と電子系と分子自由度の集団光応答による相制御
- (iii) 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拓

本総括班は、この領域研究の活動を強力に推進するための施策の立案と研究全体の統括を目的としている。

3. 研究の方法

本申請が掲げる分子自由度という視点で統合的・組織的に分子性物質の研究を推進するためには、物理、化学の異なる分野の研究者が同じ言葉で議論できる組織をつくる必要がある。それにより初めて問題意識を共有でき、物質科学に新しい流れをつくることができる。これを促進するには、各計画研究内での協力はもとより、各計画研究間での協力を強く促す機構が必要とされる。本総括班はこの任を担う。本研究では、各計画研究の代表者の6名に2名の物性理論研究者を加えて総括班を構成する。総括班の専門分野は固体物理（実験3名と理論2名）と有機化学（3名）であり、分子内自由度を利用した物理と化学が融合する新しい物質科学の創成に向けて、常に研究全体を様々な角度から高い見

地で眺め、下記の業務を遂行する。

- 1) 各研究項目における研究計画の立案と推進
- 2) 各計画研究間の密接な連携・協力の推進、および提案
- 3) 新しい研究課題・問題点の探索・調査
- 4) 国内研究会、国際会議の立案と遂行、国際協力の立案と推進

4. 研究成果

まず、初年度（20年度）に計画研究参加者による研究会（キックオフミーティング）を開催し本学術領域研究の目指すところを確認した。21年度には、公募研究メンバーを含めた領域会議（全体会議）を開催し、本学術領域研究の全メンバーの協力体制を確認した。

本領域の発足以来、国内および国際ワークショップや topical meeting を適時開催してきた。特に、21年9月に「結晶性有機伝導体・超伝導体・強磁性体に関する国際シンポジウム（ISCOM2009）」を共催、22年7月に「合成金属の科学と技術に関する国際会議（ICSM2010）」を協賛することで、海外拠点の研究協力者と討論を行い、この分野における我が国のハブとしての役割を強固なものにした。21年9月には、若手研究者が企画から開催までを担う国際ワークショップを開催した。

23年度には、第2次公募研究の決定を受けて領域会議（全体会議）を開催し、領域全体のテーマ構成と新たな協力体制を確認した。

また、毎年度、物性科学に係る新学術領域研究と特定領域研究が参加する物性科学領域横断研究会を共催し、国内における領域間の連携を深めた。

24年12月には、5年間にわたる本領域の研究活動を総括し、国内外にその成果を発信するための国際シンポジウムを開催した。

研究期間中、適宜総括班会議を開催し、領域研究の活動全般の把握に努めた。また、毎年度末に領域会議（成果報告のための全体会議）を開き、21、22、23年度末には成果報告集を刊行した。尚、領域ホームページを利用して、本領域の研究成果を速報（MDF New Flash）という形で国内外に随時発信している。

尚、研究期間中、各研究項目を主体とした小規模研究集会や、異なる研究項目にまたがるテーマを絞った国内、国際ワークショップ、および国際スクールを開催/共催した。それらを以下にまとめる。

活動状況

平成25年3月1日 - 3日

第7回領域会議の開催

平成 24 年 12 月 1 日 - 4 日
国際シンポジウム MDF2012 の開催

平成 24 年 11 月 29 日 - 30 日
Tokyo workshop on spin/charge liquids
near ordering の開催

平成 23 年 11 月 25 日 - 26 日
MDF International mini-Workshop,
Development of Molecular Degree of Freedom
towards Novel Functionality 「新しい電子
機能を目指した分子自由度の開発」の開催

平成 23 年 11 月 10 日 - 12 日
“分子アンサンブル” 理研、新学術領域
(A02 班)、東北大 G-COE 共催

平成 23 年 6 月 28 日 - 7 月 2 日
The 4-th International Conference on
Photo-induced Phase Transitions and
Cooperative Phenomena (PIPT4) の共催

平成 23 年 1 月 5 日 - 7 日
第 6 回領域会議の開催

平成 23 年 12 月 16 日 - 17 日
有機固体若手の会・冬の学校 2011 の共催

平成 23 年 11 月 19 日 - 20 日
第 5 回物性科学領域横断研究会の共催

平成 23 年 10 月 12 日
A04 班会議の開催

平成 23 年 10 月 11 日 - 12 日
有機導体におけるディラック粒子に関する
討論会 (A01 班拡大討論会) の開催

平成 23 年 6 月 8 日 - 9 日
第 5 回領域会議の開催

平成 23 年 1 月 5 日 - 7 日
第 4 回領域会議の開催

平成 22 年 12 月 10 日 - 11 日
有機固体若手の会・冬の学校 2010 の共催

平成 22 年 11 月 22 日 - 23 日
A03 班会議の開催

平成 22 年 11 月 19 日 - 20 日
A05 班共同会議の開催

平成 22 年 11 月 13 日 - 15 日
第 4 回物性科学領域横断研究会の共催

平成 22 年 10 月 22 日
 α -(ET)₂I₃ の Dirac 電子相、電荷不均化金
属相、電荷秩序絶縁相に関する討論会 (A01 班
拡大討論会) の開催

平成 22 年 7 月 31 日
Japan-UK Joint Seminar (A05b の拡大班会
議) の開催

平成 22 年 7 月 31 日
フラストレーション誘起スピン液体・電荷
液体に関する討論会 (A01 班拡大討論会) の
開催

平成 22 年 7 月 1 日 - 3 日
“International Conference on Science
and Technology of Synthetic Metals
2010” (ICSM2010) の協賛

平成 22 年 7 月 1 日 - 3 日
ISSP-MDF Joint International Workshop,
“Spin-related Phenomena in Organic
Materials” 東大物性研究所と共催

平成 22 年 4 月 22 日 - 23 日
CMRC 研究会「分子性結晶と構造物性研究」
高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学
研究所と共催

平成 22 年 1 月 5 日 - 7 日
第 3 回領域会議の開催

平成 21 年 12 月 18 日 - 19 日
有機固体若手の会・冬の学校 2009 の共催

平成 21 年 12 月 12 日
A02 班会議の開催

平成 21 年 11 月 29 日 - 12 月 1 日
第 3 回物性科学領域横断会議の共催

平成 21 年 10 月 6 日 - 7 日
第 2 回領域会議の開催

平成 21 年 9 月 17 日 - 19 日
International workshop on Theories on
Strongly Correlated Molecular Conductors
(SCMS) の開催

平成 21 年 9 月 12 日 - 17 日
The 8th International Symposium on
Crystalline Organic Metals,
Superconductors and Ferromagnets.
(ISCOM2009) の協賛

平成 21 年 6 月 9 日 - 10 日
A05ab 物質開発と理論の合同班会議の開催

平成 21 年 2 月 27 日 - 28 日

A03 班会議の開催

平成 21 年 1 月 7 日 - 8 日

キックオフミーティング(第 1 回領域会議)
の開催

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 12 件)

① F. Kagawa, T. Sato, K. Miyagawa, K. Kanoda, Y. Tokura, K. Kobayashi, R. Kumai, “Charge-cluster glass in an organic conductor”, Nature Physics, [査読有] 掲載決定 (2013) DOI: 10.1038/NPHYS2642

② M. Hirata, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Tamura, “Electron correlations in the quasi-two-dimensional organic conductor θ -(BEDT-TTF)₂I₃ investigated by ¹³C NMR”, Physical Review B, [査読有] **85** (2012) 195146 DOI: 10.1103/PhysRevB.85.195146

③ M. Hirata, K. Ishikawa, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Tamura, “¹³C NMR study on the charge-disproportionated conducting state in the quasi-two-dimensional organic conductor α -(BEDT-TTF)₂I₃”, Physical Review B, [査読有] **84** (2011) 125133-1-12 DOI: 10.1103/PhysRevB.84.125133

④ F. L. Pratt, P. J. Baker, S. J. Blundell, T. Lancaster, S. Ohira-Kawamura, C. Baines, Y. Shimizu, K. Kanoda, I. Watanabe, G. Saito, “Magnetic and non-magnetic phases of a quantum spin liquid”, Nature, [査読有] **471** (2011) 612-616 DOI: 10.1038/nature09910

⑤ K. Kanoda, R. Kato, “Mott Physics in Organic Conductors with Triangular Lattices”, Annual Review of Condensed Matter Physics, [査読有] **2** (2011) 167-188 DOI: 10.1146/annurev-conmatphys-062910-140521

⑥ K. Miyagawa, M. Hirayama, M. Tamura and K. Kanoda, “¹³C NMR Study on Zero-Gap State in the Organic Conductor θ -(BEDT-TTF)₂I₃ under Pressure”, Journal of Physical Society of Japan, [査読有] **79** (2010)

063703-1-3 DOI: 10.1143/JPSJ.79.063703

⑦ Y. Shimizu, H. Kasahara, T. Furuta, K. Miyagawa and K. Kanoda, “Pressure-induced superconductivity and Mott transition in spin-liquid κ -(ET)₂Cu₂(CN)₃ probed by ¹³C NMR”, Physical Review B, [査読有] **81** (2010) 224508 DOI: 10.1103/PhysRevB.81.224508

⑧ F. Iwase, K. Miyagawa, K. Kanoda, H. Horiuchi, Y. Tokura, “Charge-Lattice-Coupled Quantum Fluctuations in DMTTF-2,6-QBr₂C12”, Journal of Physical Society of Japan, [査読有] **79** (2010) 043709 (Editor's choice) DOI: 10.1143/JPSJ.79.043709

⑨ F. Kagawa, K. Miyagawa, K. Kanoda, “Magnetic Mott criticality in a kappa-type organic salt probed by NMR”, Nature Physics, [査読有] **5** (2009) 880-884 DOI: 10.1038/nphys1428

⑩ K. Okuma, S. Yamashita, Y. Nakazawa, M. Oguni, K. Miyagawa, K. Kanoda, “Spin ordering and enhancement of electronic heat capacity in an organic system of (DI-DCNQI)₂(Ag_{1-x}Cu_x)”, Journal of Physics : Condensed Matter, [査読有] **21** (2009) 015602 DOI: 10.1088/0953-8984/21/1/015602

⑪ H. Oike, K. Miyagawa, K. Kanoda, H. Taniguchi, K. Murata, “Contactless conductivity measurements on the organic conductor, κ -(ET)₄Hg_{2.89}Br₈, under pressure”, Physica B, [査読有] **404** (2009) 376-378 DOI: 10.1016/j.physb.2008.11.023

⑫ Y. Kurosaki, A. Furuta, H. Taniguchi, K. Miyagawa, K. Kanoda, “Inhomogeneous spin state in the organic conductor κ -(BEDT-TTF)₄Hg_{2.78}Cl₈”, Physica B, [査読有] **404** (2009) 3138-3149 DOI: 10.1016/j.physb.2009.07.070

[学会発表] (計 10 件)

① K. Kanoda, “Quantum spin liquid in organics with quasi-triangular lattices”, The March Meeting 2013 of the American Physical Society (招待講演) 2013 年 3 月 18 日~23 日, ボルチモア(アメリカ)

② K. Kanoda, “Overview of

superconductivity and Mott physics in organic materials”, 10th MATERIALS & MECHANISMS OF SUPERCONDUCTIVITY CONFERENCE (M2S 2012), (基調講演) 2012年7月29日-8月3日、ワシントン(アメリカ)

③ K. Kanoda, “Correlated electrons in triangular-lattice organics with variable Mottness”, International Conference on Highly Frustrated Magnetism (HFM2012), (基調講演) 2012年6月4日-8日、ハミルトン(カナダ)

④ K. Kanoda, “NMR study of massless Dirac Fermions in an Organic Conductor”, The “International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2012” (ICSM 2012) (招待講演) 2012年7月8日~13日、アトランタ(アメリカ)

⑤ K. Kanoda, “Mott transition, frustrated magnetism and superconductivity in triangular-lattice organics”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2011) (招待講演) 2011年8月29日~9月3日、ケンブリッジ(イギリス)

⑥ K. Kanoda, “Mott physics revealed by triangular-lattice organics”, International Conference on Science and Technology Synthetic Metals 2010 (ICSM2010), (キーノート講演) 2010年7月5日、京都

⑦ K. Kanoda, “Correlated electrons in quasi-2D organics with triangular lattice”, Gordon Research Conference on Superconductivity, (招待講演) 2009年6月7日~12日、香港(香港)

⑧ K. Kanoda, “Spin Liquid in Triangular-Lattice Organic Mott Insulator”, Joint European Japanese Conference: Frustration in Condensed Matter, (招待講演) 2009年3月12日~15日、リヨン(フランス)

[図書] (計1件)

① 鹿野田一司、超伝導ハンドブック(共著)、朝倉書店、2009年12月

[その他]

ホームページ

<http://www.mdf.t.u-tokyo.ac.jp/index.htm>

ml

6. 研究組織

(1) 研究代表者

鹿野田 一司 (KANODA KAZUSHI)

東京大学・大学院工学系研究科・教授

研究者番号：20194946

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者

小形 正男 (OGATA MASAO)

東京大学・大学院理学系研究科・教授

研究者番号：60185501

黒木 和彦 (KUROKI KAZUHIKO)

大阪大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号：10242091

小林 昭子 (KOBAYASHI AKIKO)

日本大学・文理学部・教授

研究者番号：50011705

宇治 進也 (UJI SHINYA)

独立行政法人 物質・材料研究機構・超伝導物性ユニット・ユニット長

研究者番号：80344430

岡本 博 (OKAMOTO HIROSHI)

東京大学・大学院新領域創生科学研究科・教授

研究者番号：40201991

矢持秀起 (YAMOCHI HIDEKI)

京都大学・低温物質科学研究センター・教授

研究者番号：20182660

森 初果 (MORI HATSUMI)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号：00334342