

先端材料化学と量子物性物理の融合による量子分子エレクトロニクスの創製

	研究代表者	九州大学・工学研究院・教授 安達 千波矢 (あだち ちはや) 研究者番号：30283245
	研究課題情報	課題番号：23K20039 研究期間：2023年度～2029年度 キーワード：量子分子エレクトロニクス、有機CT、ナノ分光計測、超高速分光

この国際共同研究の重要性・面白さは何か（研究の目的と意義）

●本国際共同研究が目指すところ

過去30年間において、有機エレクトロニクスはOLEDの実用化に牽引され、学理の深化と共に工業的にも大きな発展を遂げてきた。今後、OLEDの成功に引き続き、有機レーザー、有機太陽電池、有機トランジスタ、メモリ、熱電デバイス、超伝導素子などの多彩な有機デバイスの可能性の開拓が期待できる状況にある。同時に有機CTの学理においては、電荷移動、励起子生成、電荷分離、積層薄膜状態における電子分極からスピン状態制御まで、幅広い物性物理の深化と新分子の創製が期待できるステージにある。そして、有機CTはマクロなデバイス展開に加え、分子エレクトロニクスや量子エレクトロニクスの視点、さらには、有機分子が本質的に親和性の高い生体適合性などの視点から機能を再構築することで、斬新な切り口から次世代エレクトロニクスの発展をもたらすと期待される。すなわち、一時代を築いたOLEDを足がかりとし、更なる飛躍として、新しい有機分子による多種多様な新奇デバイスの創成に取り組むステージにきている。無限の分子設計を基礎とする有機エレクトロニクスは、分子集積化学等の先端材料化学との融合、ならびに、量子現象を基礎とした物性物理と融合した新たな研究学問領域の創成が期待されている。

本国際先導研究では、有機化学研究者と量子物性研究者を融合し、有機CTの科学技術の深化と次世代量子分子エレクトロニクスの創成を進める。本提案の第一の着目点は、CT現象を軸に、新しい発光分子の創製と発光デバイスへの応用、有機センシングデバイス、メモリ、熱電素子、超伝導等への展開、また、基礎的な視点から超高速分光、1分子計測技術等による分子の本質的な光電子物性の解明である。第二の着目点は、ウェアラブルデバイスや生体内への埋め込みなど、様々な環境下における有機デバイス（アンビエントエレクトロニクス）技術の本質的な確立である。有機デバイスは現在、水・酸素等の影響を完全に排除した厳密な環境が必要であるが、今後、その適用範囲を広げるためには、封止技術によらず、本質的に水・酸素等との親和性の高い材料・デバイスの構築が必須である。これが実現できれば、自然エネルギー・環境エネルギーで動作するデバイスや自己修復・回復の実現等により、メンテナンスフリーで長期間動作する低環境負荷のデバイス実現への可能性が広がる。これらの研究を通して、既存の有機エレクトロニクスの研究分野を一段高め、量子分子エレクトロニクスへと研究分野を発展させて行く。



図1 本研究が目指す量子分子エレクトロニクスの研究全体像

誰がこの国際共同研究を行うのか（優れたグループによる国際共同研究体制）

●先端材料化学と量子物性の融合

九大の安達らはTADF-OLEDの開拓によって有機CTの新基軸を開拓してきた。恩田らは超高速分光技術による分子の緩和ダイナミクスの研究において、理研の金らはSTMによる1分子計測による分光から、京大の畠山らはBN化合物の分子設計に取り組み、多重共鳴材料の創出に成功し、分子レベルでの多彩なCT状態の可能性を切り拓いてきた。これらの先進的な研究成果を基礎に、量子物性で世界をリードしている物性研究と有機分子設計・合成グループを融合し、次世代の量子分子エレクトロニクス(QME)を開拓して行く。海外研究チームとは、様々な量子現象を核とした物性を中心に据え、革新的な有機材料の創製によって新奇量子デバイスの創出を目指す。先端OLED (St. Andrews大)、低閾値有機レーザー (Paris13大、U. Queensland大)、ポラリトンレーザー (Montreal理工大)をはじめ、メモリデバイス、熱電デバイス、有機超伝導 (St. Andrews大)、有機量子センシング、量子ビット、超伝導デバイスなどの課題を通して、分子レベル、量子レベルで有機CT学理の深化を同時に進める。所望のデバイス機能を発現させるために、有機分子の多様な分子構造の検討が必須であり、超分子 (CNRS)、多重共鳴材料 (京大)等の多彩な分子骨格の検討を進める。また、AI、MI分子設計もToronto大、香港城市大学と連携して、網羅的な分子骨格の検討を進める体制を構築する。



図2 国際共同研究体制図

どのように将来を担う研究者を育成するのか（人材育成計画の内容）

本プロジェクトでは、11名の研究代表者・分担者に加え、ポスドクが8名、大学院生が10名程度参加する予定である。材料化学と物性物理の研究者をグローバルに組織化することで、異分野の視点から統合的にQMEの研究開発を推進できる大学院生・若手研究者の育成を進めて行く。特に光・電子機能材料化学を専攻する有機化学系と量子物性物理・デバイス物理を専攻する物理系の院生・若手研究者との積極的な交流を図り、QMEの研究分野を開拓できる人材育成を図る。また、基礎科学の学理の深掘りと先端デバイス工学の両分野を包括的に推進できる研究者の養成を進める。分野横断的な研究テーマを設定し、国際交流型の研究プロジェクトを立ち上げる。物性理論と分子設計・合成の研究者でアライアンスを組み、所望の物性を発現させるための分子設計を明確にし、合成と物性解析を繰り返すことで、新しい機能を発現する新分子の創出を実現する。異分野研究者の交流を進めるために、定期的なミーティングに加え、サマースクール等を企画する。研究成果に対して、学術成果の発表に対して多面的なサポートを行う。多彩なキャリアパスを準備し、アカデミックのみならず、グローバル企業でのインターンシップ、海外研究機関での就職など、国際的に活躍できる人材を輩出して行く。また、将来の量子分子エレクトロニクスの実用化を念頭に、アントレプレナーシップ教育を進める。

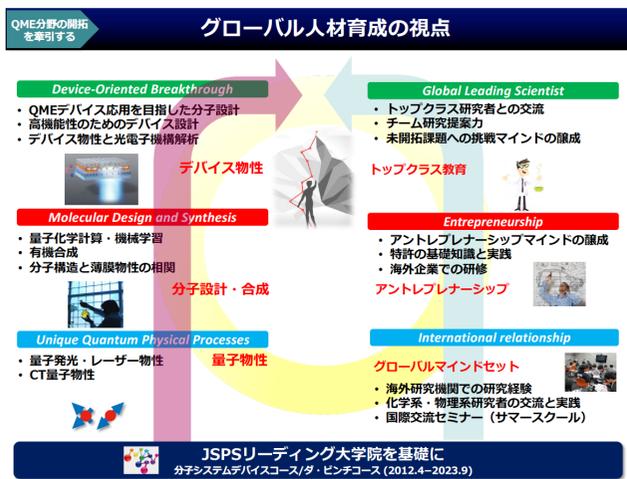


図3 QMEにおけるグローバル人材育成