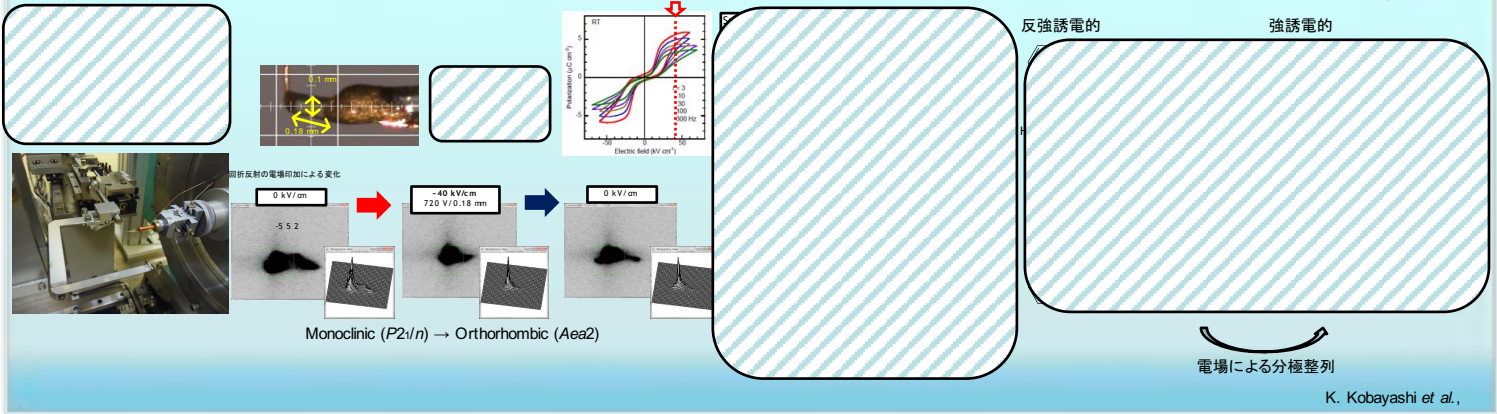


実験組織

研究代表者 熊井 玲児 (KEK 物質構造科学研究所 PF & CMRC)
 産総研FLEC(山田、峯廻、堤、野田、井上)、物構研CMRC(春木、小林、中尾、佐賀山、村上、CROSS(中尾)、岡山大(近藤、野上)、東北大(野田、渡邊)、理研(賀川)
 東大(佐藤、須波、宮川)、東大物性研(森、上田、古田、鈴木、沼尾、山田)
 課題有効期間 2014年4月~2017年3月
 研究目的
 種々の有機材料結晶(単結晶、あるいは薄膜)における電子相転移に伴う構造変化を精緻に観測することを目的とする。それぞれの結晶における精密構造解析、極限条件下(低温、低温・高圧、電場下など)における構造変調などの知見に基づき、種々の物性(電気伝導性、磁性、誘電性、あるいはそれらの交差相関物性)発現機構を明らかにする。
 実験ステーション BL-8A, BL-8B, BL-3A, BL-4C, BL-7C

2015年度の進捗状況

水素結合系有機反強誘電体の電場誘起構造相転移



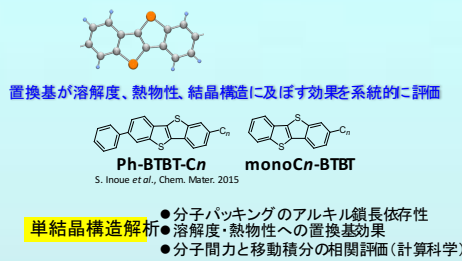
K. Kobayashi et al.

有機半導体材料の高機能化のための構造的知見からの分子設計指針の構築

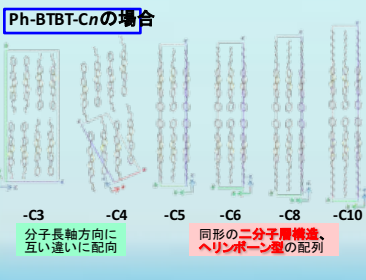
材料が解決すべき課題

- ✓ 熱安定性の向上
 高次凍結相: 優れた熱安定性, $n > 10$
 熊野ら, 2013年物性誌 19: C5-7
 H. Iino et al., Nat. Commun. 6, 6828 (2015).
- + プリントドエレクトロニクス材料として
- ✓ 優れた溶解度
- ✓ 層状結晶性
 層状構造を形成し、層状構造
 ・高い移動度の発現に必要
 ・印刷による製膜のしやすさ
- ✓ 高い輸送特性
 層状・針状結晶成長
 層状

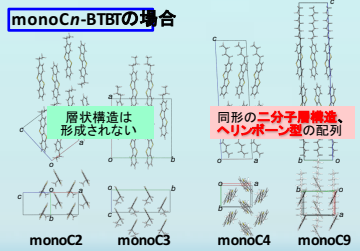
置換基効果の系統的評価



アルキル鎖長と分子パッキング①

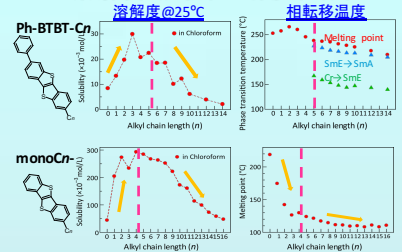


アルキル鎖長と分子パッキング②

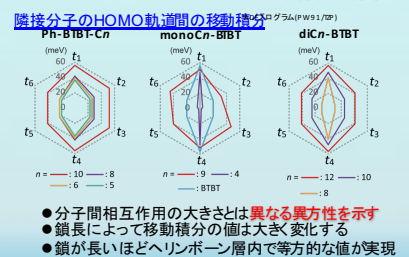


BL-8A, 8B, 7C

溶解度・熱物性の鎖長依存性



ヘリコン配列における鎖の効果

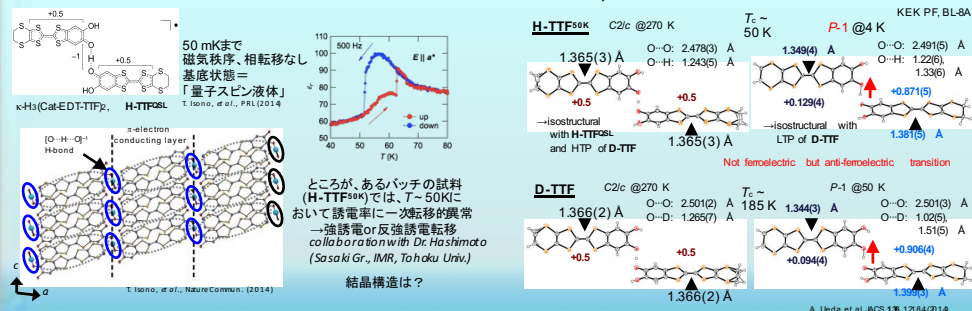


短いアルキル鎖では様々なパッキングが生じるのに対して、長鎖アルキルを導入した場合は層状構造を形成し、ファスナー効果によって鎖間の凝集力が強くなるアルキル基の長さに応じて溶解度の低下、隣接分子間の相互作用の増大が生じ、層内の移動積分はより等方的になる

水素結合を有する有機半導体の構造と物性

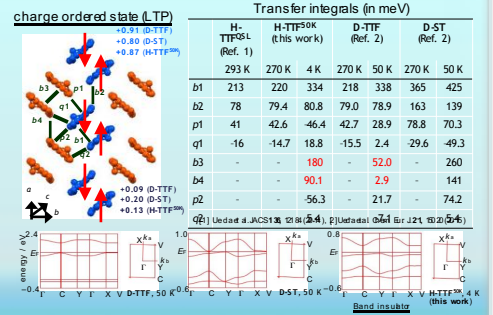
Crystal Polymorphism in κ -H₃(Cat-EDT-TTF)₂

Crystal Structure Determination of H-TTF^{50K}



BL-8A

Comparison of Electronic Structures



主な発表論文・学会発表

- S. Horiuchi, K. Kobayashi, R. Kumi, N. Mnam, F. Kagawa and Y. Shikura "Quantum ferroelectricity in charge-transfer complex crystals", *Nature Commun.*, 6, 7469:1-7 (2015).
- Akira Ueda, Akari Hatakeyama, Misyu Enomoto, Reiji Kumi, Yoichi Murakami, and Hatsuo Mouri, "Modulation of Molecular Electron System in a Perylene Organic Conductor that Shows Hydrogen-Bond-Dynamics-Base Switching of Conductivity and Magnetism", *Chem. Eur. J.*, 21, 15020-15028 (2015).
- Yuki Noda, Toshikazu Yamada, Kensuke Kobayashi, Reiji Kumi, Sadio Horiuchi, Fumitaka Kagawa, and Tatsuro Hasegawa, "Few-Volt Operation of Printed Organic Ferroelectric Capacitor", *Adv. Mater.*, 27, 6475-6481 (2015).
- 「電場誘起水素結合を有する有機半導体における電場誘起構造相転移: 水素結合系分子の構造相転移」 坂本 隆太郎, 日本物理学会2016年大会
- 「アルキル置換BTBT有機半導体の単結晶構造解析: 分子パッキングおよび分子間力・電子軌道間移動積分の系統的評価」 坂野 隆, 日本物理学会2016年大会

- 学会発表
 1. 「プリントドエレクトロニクスに向けた多層BTBT有機半導体の開発」 井上 浩, 日本物理学会2015年大会
 2. 「ブロン電子伝導有機半導体 κ -X₃(Cat-EDT-TTF)₂ (X = H, D) における圧力効果」 上田 浩, 日本物理学会2015年大会
 3. 「新規Ca²⁺TTF系有機半導体 κ -H₃(Cat-EDT-TTF)₂ における構造相転移: 水素結合系分子の構造相転移」 吉田 浩, 日本物理学会2016年大会
 4. 「電場誘起水素結合を有する有機半導体における電場誘起構造相転移: 水素結合系分子の構造相転移」 坂本 隆太郎, 日本物理学会2016年大会
 5. 「アルキル置換BTBT有機半導体の単結晶構造解析: 分子パッキングおよび分子間力・電子軌道間移動積分の系統的評価」 坂野 隆, 日本物理学会2016年大会