



平成 28 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」 調査研究報告書(公開版)

【研究題目】機能性分子液体の基礎物性探索ならびに印刷デバイス応用

【整理番号】TK16-30

【代表機関】物質・材料研究機構 (NIMS)

【調査研究代表者 (氏名、連絡先 TEL & Mail)】

中西尚志、029-860-4740、NAKANISHI.Takashi@nims.go.jp

【TIA 内連携機関：連携機関代表者】

東京大学、物性研究所附属中性子科学研究施設：山室修 教授

産業技術総合研究所、フキソブルエレクトロニクス研究センター印刷デバイスチーム：吉田学 研究チーム長

【TIA 外連携機関】

学習院大学：高屋智久 助教

横浜国立大学：川村出 准教授

京都大学：林重彦 教授、倉重佑輝 准教授 (採択時；神戸大学)

【報告書作成者】中西尚志

【報告書作成年月日】2017 年 4 月 3 日

【連携推進 (具体的な連携推進活動内容とその活動の効果等)】

『「機能性液体」に関する研究会』と題した全体会議を 2016 年 7 月 1 日に第一回、2017 年 2 月 20 日に第二回を代表機関である NIMS にて開催した。第一回では、TIA 内連携機関の参加者全員での会合とし、研究内容ならびに各参加者の研究担当役割を確認した。また、各参加者の専門とする研究分野を紹介し合うことで、TIA かけはし課題に限定しない連携の可能性も検討した。

第二回に関しては下記プログラム (抜粋) にあるように TIA 外連携機関からも全員参加する形で研究の進捗確認、ならびに成果発表 (論文、特許) の戦略に関して議論した。

中西尚志@MANA-NIMS 「趣旨説明」

Fengniu Lu@MANA-NIMS 「Liquid Pyrenes」

Bhawani Narayan@MANA-NIMS 「Liquid Naphthalenes」

Avijit Ghosh@MANA-NIMS 「Liquid Porphyrins」

高屋智久@学習院大学 「超高速分光によるアルキル化 π 液体分子の励起ダイナミクス計測」

林重彦@京都大学 「液体ピレンの構造と励起状態過程に関する理論的研究」

名倉和彦@ICYS-NIMS 「機能性液体の分子軌道計算に基づく電子構造解析」

倉重佑輝@京都大学 「分子集合系の三重項エネルギー移動効率の理論的解析」

川村出@横浜国立大学 「固体 NMR を用いた機能性分子液体の構造解析」

山室修@東大物性研 「超高エンタルピー液体 アルキル化テトラフェニルポルフィリンの熱容量とガラス転移」

末森浩司@産総研 「機能性液体のエレクトレットへの展開に関する研究」

全体討論

取り組みの成果として、現在特許 1 件および原著論文 3 報の発表に向けて準備を行っている。

【調査研究内容（実験等中心に背景・課題と実行された課題解決の内容と結果）】

光・熱安定性に優れ、基板やデバイスの幾何学構造に依存せず配置・コーティングできる優れた加工性、ならびに材料機能のテーラー性に魅せられ、機能性分子液体の開発が近年世界中で活発化している。研究代表（中西）は、「液体フラーレン」、「発光液体」の開発など、先駆的な分子性液体材料を見出してきた。これら開発途上の機能性分子液体に関する基礎物性の理解・蓄積を行うと共に、印刷エレクトロニクス応用へ向けたプロトタイプデバイスの構築・評価に関して、液体材料の創成（NIMS）、先端解析技術による物性計測（東大物性研）、印刷デバイス応用（産総研）の検討を三研究機関の連携で取り組んだ。また、理論計算を含む励起状態ダイナミクスや分子運動ダイナミクスの検討に関しては、TIA 外連携機関からの協力を要請し、より深い材料物性の本質に迫った。本調査研究を通して、「機能性分子液体」サイエンスの重要性、発展の可能性等を俯瞰的に検討し、学術・応用の両側面において重要な知見を得ることを目指した。

基本材料となる光電子機能を有す機能性分子液体を【NIMS】にて創成した。光電子機能を司る機能性部位として π 共役系分子（ポルフィリン、ピレンなど）を、その周囲を嵩高く、柔軟性に富む分岐アルキル鎖で直接被覆することで、常温液体分子群の合成に成功した。液体基礎物性として粘性と固体 NMR で得られる分子ダイナミクスの相関を明らかとした。液体ピレンに関しては、分光測定を中心に検討し、アモルファス液体内に潜む不均質性（ナノ会合体）の存在を世界に先駆けて提唱するに至った。液体ポルフィリンに関しては、バルク液体熱物性を精密熱容量測定【東大】にて評価した結果、150~225 K の広い温度範囲で大きな熱容量ジャンプを有するガラス転移が観察された。これは、アルキル鎖の配向無秩序による巨大なエントロピーが液体状態を安定化させていること（超高エントロピー液体）を示唆している。さらに、同液体ポルフィリンをエレクトレットデバイスへ試験加工した結果【AIST】、良好なエレクトレット応答（押圧→出力電圧、交流電圧印加→特定周波発生）が得られ、活性が1ヶ月以上もの長期間保持できることが確認された。

上記結果の一部は、既に学会発表（日本 MRS シンポジウム、IPC2016、日本物理学会第 72 回年次大会など）を行っており、現在、特許（液体エレクトレットデバイス）、論文投稿（①ソフトクロモフォア特性を持つ液体ポルフィリンの創成、②液体ポルフィリンの熱物性ならびに構造解析、③液体エレクトレットデバイス）を目指して取り組みを継続している。また、ナノテック 2017 の TIA ブース・かけはし紹介ボードや TIA の HP（サイクリックに変わる部分）での研究概要の掲示など、積極的な情報発信にも取り組んだ。

【今後の予定】

上記の調査研究の結果を基に、特許、論文としてまとめる作業、それに向けて追加実験等を行うことを最優先とする。東大物性研・山室を中心として進める液体ポルフィリンの熱・構造物性の解析に関しては、東海村 J-PARC の中性子散乱実験 (AMATERAS) の他、USA の NIST における HFBS による実験に関しても研究計画書の申請を行っており、これら二つの実験の組合せにより、0.1 ps~10 ns の広範囲の緩和時間を網羅した分子運動のダイナミクスを検討する。印刷エレクトロニクス応用に向けた取組では、液体ポルフィリンに限定せず、液体ピレンや液体フラーレンなど、各液体物質の特徴を活かしたデバイス評価（加工法、基板選択、出力方法、性能最適化）を行う。

新たな資金獲得に向けて方針としては、i) H29 年度の TIA 連携プログラム調査研究に継続申請する。ii) 2 機関で申請した科研費萌芽（挑戦）が結果待ちであり、採択から漏れた場合は、3 機関＋外部連携機関も含めて再申請を行う（基盤 A 又は基盤 S を想定）。iii) AIST を中心とするデバイス研究では NEDO 予算の申請を計画中である。また、研究の継続、成果発表、全体会議の開催を重ねるなどして、大型予算申請への準備を継続する。iv) 国内の液体材料やソフト材料の研究者らと協力することで、科研費新学術領域の立ち上げに関しても、早急に議論を開始できる母体作りを進める。

以上。