

研究プロジェクト

「単分子エレクトロニクスの現状認識と近未来実現へ向けての中核体制構築」

Research Project: Formation of The Research Hub of Molelectronics
– Scientific Analysis of The Current Stage for Technological Breakthroughs実施期間： 2010～2011 年度（第 1 年次）Term of the Project: 2010-2011 fiscal years (1st year)研究代表者： 埴田 博一 大阪大学大学院基礎工学研究科教授Project Leader: Dr. Hirokazu TADA, Project Representative on the IIAS Planning Board;
Professor, Graduate School of Engineering Science, Osaka University研究目的要旨：

電子素子の微細化、高集積化技術の進歩はめざましくユビキタス社会の発展を支えている。一方で、素子の微細化に伴う誤動作の確率の増加や素子作製に必要な設備および素子そのものの消費電力が増大するといった問題が顕在化しており、高度情報化社会を引き続き発展させるためには早急に解決する必要がある。単一分子を構成要素とする分子エレクトロニクスの実現は、量子性の活用により、電気を流すエレクトロニクスからの脱却を可能とし、さらには誤動作を自己修復したり、誤動作そのものを利用する新しい情報処理素子の創出が期待できる。分子設計・合成技術、計測技術、理論の進展により、単一分子の電気伝導度をようやく定量的に議論できるようになりつつあるが、それでもなお現象の正しい理解はきわめて困難である。本プロジェクトでは、分子エレクトロニクスの創成に熱意をもって取り組む研究者を中心に、スピントロニクスやフォトリニクス、クオントロニクスの分野において第一線で活躍する研究者が自由にかつ積極的に行き来するハブ機能を持つ組織を構築し、現状の詳しい分析に基づいたロードマップの導出を行うことを目的とする。

研究目的：

①背景：

単一分子エレクトロニクス (Molecular-scale Electronics : Molelectronics, Moletronics とよぶ) は、有機 EL 等の有機薄膜エレクトロニクス (Molecular-based Electronics) とは異なり、ひとつまたは数えられるほどの分子を取り扱って究極のナノデバイスを構築しようとする研究領域である。1974 年に単一分子ダイオードの概念が発表され注目を集めたが、その実験的検証は困難をきわめ、ようやく 2009 年に信頼できる結果が報告されるに至っている。分子設計・合成技術、計測技術、理論が飛躍的に進歩したことによるが、それでもなお現象の正しい理解のためには未解決の問題が山積しており、現状の詳しい分析に基づいたロードマップの導出が不可欠であるとの認識が広がっている。

②必要性：

現在のコンピューターはエラーが許されず、ひとつのエラーが生命・財産を脅かすことになる。また、ユビキタス社会の発展は、同時にエネルギー消費量の増大をもたらしている。単一分子エレクトロニクスの進展は、量子性の活用により、電気を流すエレクトロニクスからの脱却を可能とし、さらにはエラーを自己修復したり、エラーそのものを利用する新しい情報処理素子の創出が期待でき、高度情報化社会の発展に資するところが大きい。しかしながら、その研究は極めて萌芽的・挑戦的であり、ブレークスルーをもたらすためにはナノ物質科学に関連するさまざまな分野の英知を結集して問題解決にあた

る必要がある。

③方針：

まず単一分子の電気伝導度特性を正しく理解するとともに、分子の量子機能をどのように活用するかを探索し、新しい情報処理素子の設計指針を導出する。そのため、分子エレクトロニクスの実現に熱意をもって取り組む研究者を中心に、スピントロニクスやフォトニクス、クオントロニクスの分野において第一線で活躍する研究者が自由にかつ積極的に行き来するハブ機能を持つ組織を構築し、下記の課題を設定して問題の解決にあたる。

(ア) 分子エレクトロニクスに適した分子の量子化学設計・合成

(イ) ナノギャップ電極作成・プロセス開発

(ウ) 走査プローブ顕微鏡でのイメージングとスペクトロスコピー測定

(エ) 分子・電極間の接合（電極問題）と量子輸送現象に関する第一原理計算を含む理論的解明と実証

(オ) 単分子の光学特性、磁気特性等の理論予測と実証

(カ) 単分子デバイス化へ向けての、特有のデバイスの動作予測と実現へ向けての課題抽出、エレクトロニクス実装への課題抽出

Objectives:

Great progress has been made in technologies of electronic device miniaturization and integration, which supports the sustainable development of information ubiquitous society. For further development of our advanced information society, we have to solve various issues posed by this progress: for example, an increase in energy consumed by device manufacturing equipment and the devices themselves and in the risk of device malfunction with the increasing miniaturization of electronic devices. Molecular-scale electronics technology, which utilizes single molecules as the key components, would facilitate our breaking away from the conventional forms of electronic devices to conduct electricity by exploiting the quantum properties of molecules. Furthermore, new information processing systems, which can self-repair or even take advantage of malfunctions, are expected to be created.

As progress is made in molecular design, synthesis technology, measurement techniques and theories, quantitative discussions on the electrical conductivity of single molecules are also in progress these days. However, much more still remains to be done to better understand the electrical properties of single molecules. This project aims to establish an organization serving as a hub for researchers who proactively engage in the creation of molecular-scale electronics including leading researchers in fields such as spintronics, photonics and quantronics, and to formulate a roadmap to future development based on a detailed analysis of the status quo of moletronics research.

キーワード：単一分子エレクトロニクス 電極問題 キャリア輸送

Key Word: Single molecule electronics, contact problem, carrier transport

参加研究者リスト： 25名（◎研究代表者、○幹事、□アドバイザー）

氏名	職名等
◎ 冨田 博一	大阪大学大学院基礎工学研究科教授（デバイス作成、計測）
○ 浅井 美博	産業技術総合研究所ナノシステム研究部門副研究部門長（理論）
安蘇 芳雄	大阪大学産業科学研究所教授（分子合成）
伊藤 彰浩	京都大学大学院工学研究科准教授（分子合成）

- 岡本 裕巳 自然科学研究機構分子科学研究所教授（光計測）
- 小川 琢治 大阪大学大学院理学研究科教授（分子合成、デバイス作成）
- 木口 学 東京工業大学大学院理工学研究科准教授（デバイス作成、計測）
- 桑原 裕司 大阪大学大学院工学研究科教授（作製、計測）
- 米田 忠弘 東北大学多元物質科学研究所教授（STM）
- 齋藤 軍治 名城大学総合研究所教授（有機物性化学）
- 高尾 正敏 国際高等研究所フェロー／大阪大学大学院基礎工学研究科特任教授（材料・デバイス）
- 高木 紀明 東京大学大学院新領域創成科学研究科准教授（STM）
- 田中 彰治 自然科学研究機構分子科学研究所助教（分子合成）
- 谷口 正輝 大阪大学産業科学研究所准教授（バイオナノテクノロジー）
- 橋詰 富博 株式会社日立製作所基礎研究所主管研究員
東京工業大学大学院理工学研究科連携教授（表面物性）
- 森川 良忠 大阪大学大学院工学研究科教授（理論）
- 山田 亮 大阪大学大学院基礎工学研究科准教授（デバイス作製、計測）
- 横山 利彦 自然科学研究機構分子科学研究所教授（表面磁性）
- 吉澤 一成 九州大学先導物質化学研究所教授（量子化学）
- 渡邊 聡 東京大学大学院工学系研究科教授（物性理論）
- 魚崎 浩平 物質・材料研究機構国際ナノアーキトニクス拠点主任研究者
- 川合 真紀 理化学研究所理事（ナノ化学）
- 田中 一義 京都大学大学院工学研究科教授（量子化学）
- 塚田 捷 東北大学原子分子材料科学高等研究機構教授（物性理論）
- 藤平 正道 東京工業大学大学院総合理工学研究科教授（ナノ化学）

2010年度研究活動予定：

①研究会開催予定：

1日 1回、1泊2日 1回、「合宿形式」2泊3日 1回の研究会を高等研にて開催予定。

②話題提供予定者：

予想される人数 30 名／研究期間内

基本的には参加研究者が話題提供、招へい研究者は毎回1名程度

現在のところ下記の研究者の招へいを予定している。

増尾 貞弘 京都工芸繊維大学教授

北川 勝浩 大阪大学大学院基礎工学研究科教授

浅井 哲也 北海道大学大学院情報科学研究科准教授

研究成果報告書の出版：

2013年10月出版予定

担当：尾池所長

国際高等研究所 研究プロジェクト
「単分子エレクトロニクスの現状認識と近未来実現へ向けての中核体制構築」
2010年度第1回研究会プログラム

開催日時：2010年6月25日（金） 13：30～17：30
6月26日（土） 9：30～12：00

開催場所：国際高等研究所 216号室（2F）

研究代表者：冨田 博一 大阪大学大学院基礎工学研究科教授
担当所長・副所長：尾池 和夫 所長

出席者：（14人）

研究代表者 **	冨田 博一	大阪大学大学院基礎工学研究科教授
参加研究者 **	浅井 美博	産業技術総合研究所ナノシステム研究部門副研究部門長
（12人）	岡本 裕巳	自然科学研究機構分子科学研究所教授
**	木口 学	東京工業大学大学院理工学研究科准教授
**	米田 忠弘	東北大学多元物質科学研究所教授
	齋藤 軍治	名城大学総合研究所教授
	高尾 正敏	国際高等研究所フェロー／大阪大学大学院基礎工学研究科特任教授
	高木 紀明	東京大学大学院新領域創成科学研究科准教授
	田中 彰治	自然科学研究機構分子科学研究所助教
	山田 亮	大阪大学大学院基礎工学研究科准教授
	横山 利彦	自然科学研究機構分子科学研究所教授
	多田 朋史	東京大学大学院工学研究科助教
	中村 恒夫	産業技術総合研究所ナノシステム研究部主任研究員

**：スピーカー

話題提供者 家 裕隆 大阪大学産業科学研究所准教授
（ゲストスピーカー）
（1人）

プログラム

6月25日(金)

- 13:30 趣旨説明 : 冨田 博一 大阪大学大学院基礎工学研究科教授
14:00 話題提供者: 木口 学 東京工業大学大学院理工学研究科准教授
演題「ブレークジャンクションを用いた電極と分子の接続様式に関する考察」
15:00 休憩
15:15 話題提供者: 米田 忠弘 東北大学多元物質科学研究所教授
演題「STM/STS を用いた電極/分子接合界面の電子状態に関する研究」
16:15 休憩
16:30~17:30 総合討論

6月26日(土)

- 9:30 話題提供者: 家 裕隆 大阪大学産業科学研究所准教授
演題「アンカーポイントの分子設計」
10:30 休憩
10:45 話題提供者: 浅井 美博 産業技術総合研究所・ナノシステム研究部門副研究部門長
演題「電極と分子の接続様式が
キャリア注入・輸送に与える影響に関する理論研究の現状」
11:45 連絡事項
12:00 昼食・総合討論