

領域略称名:分子アーキテクト
領域番号:2509

平成30年度科学研究費補助金「新学術領域研究
(研究領域提案型)」に係る事後評価報告書

「分子アーキテクトニクス:単一分子の組織化と新機能創成」

(領域設定期間)

平成25年度～平成29年度

平成30年6月

領域代表者 (大阪大学・基礎工学研究科・教授・畠田 博一)

目 次

1. 研究領域の目的及び概要	8
2. 研究領域の設定目的の達成度	10
3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況	13
4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況	14
5. 主な研究成果(発明及び特許を含む)	16
6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況(主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等)	19
7. 研究組織(公募研究を含む。)と各研究項目の連携状況	24
8. 研究経費の使用状況(設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む)	26
9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度	30
10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況	31
11. 総括班評価者による評価	32

研究組織

(総：総括班, 支：国際活動支援班, 計：総括班及び国際活動支援班以外の計画研究, 公：公募研究)

研究項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成員数
X00 総括	25110001 分子アーキテクトニクス：単一分子の組織化と新機能創成	平成 25 年度～ 平成 29 年度	多田 博一	大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授	14
A01 計	25110002 非対称、非線形単分子電気特性を示す有機・無機混成分子系の合成と機能集積化	平成 25 年度～ 平成 29 年度	小川 琢治	大阪大学・大学院理学研究科・教授	1
A01 計	25110003 外部刺激変換型単分子素子材料の合成とその機能化	平成 25 年度～ 平成 29 年度	宇野 英満	愛媛大学・大学院理工学研究科・教授	1
A01 計	25110004 分子アーキテクトニクスに向けた機能性分子合成と構造物性相関解明	平成 25 年度～ 平成 29 年度	家 裕隆	大阪大学・産業科学研究所・准教授	1
A02 計	25110005 単一分子磁石・基板の接合界面におけるスピンダイナミクス	平成 25 年度～ 平成 29 年度	米田 忠弘	東北大学・多元物質科学研究所・教授	1
A02 計	25110006 吸着ナノ分子系の界面原子構造と電子・スピン物性	平成 25 年度～ 平成 29 年度	石田 浩	日本大学・文理学部・教授	4
A02 計	25110007 新規ナノカーボン材料の表面／界面修飾による特性制御とデバイス応用	平成 25 年度～ 平成 29 年度	松本 和彦	大阪大学・産業科学研究所・教授	1
A02 計	25110008 分子アーキテクトニクスの土台となるヘテロシステムの構築と量子物性の探索	平成 25 年度～ 平成 29 年度	高木 紀明	東京大学・新領域創成科学研究科・准教授	2

研究項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成員数
A03 計	25110009 単一分子と組織化分子 ネットワークの非線型 伝導理論	平成 25 年度～ 平成 29 年度	浅井 美博	産業技術総合研究所・機能材料コ ンピューテーションデザインリ サーチセンター・研究センター長	3
A03 計	25110010 機能性 4 探針 S T M に よる分子の電子・スピン 輸送特性の研究	平成 25 年度～ 平成 29 年度	長谷川 修司	東京大学・大学院理学系研究科・ 教授	1
A03 計	25110011 スピン偏極 S T M によ る単一分子の磁気伝導 特性の解明	平成 25 年度～ 平成 29 年度	山田 豊和	千葉大学・大学院融合科学研究 科・准教授	5
A03 計	25110012 単一分子および分子組 織体のスイッチング機 能の創出	平成 25 年度～ 平成 29 年度	多田 博一	大阪大学・大学院基礎工学研究 科・教授	4
A04 計	25110013 単一分子集積ネットワ ークによる情報処理機 能実装と信頼性向上	平成 25 年度～ 平成 29 年度	葛西 誠也	北海道大学・量子集積エレクトロ ニクス研究センター・教授	1
A04 計	25110014 電子移動反応に基づく ネットワーク型分子電 子機能の創出	平成 25 年度～ 平成 29 年度	松本 卓也	大阪大学・大学院理学研究科・教 授	4
A04 計	25110015 粗粒デバイスのための 新規情報処理アーキテ クチャの開拓	平成 25 年度～ 平成 29 年度	浅井 哲也	北海道大学・大学院情報科学研究 科・教授	2
総括・計画研究 計 15 件					
A01 公	26110504 柔らかな金属ナノ電線の 精密合成と構造・機能制 御	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	田代 省平	東京大学・理学系研究科・助教	1
A01 公	16H00956 構造・物性を多状態制御 できる超分子錯体ナノフ ァイバーの創製	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	田代 省平	東京大学・理学系研究科・助教	1

研究 項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成 員数
A01 公	26110505 金属錯体 π ナノシートの 界面創製と物性	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	西原 寛	東京大学・理学系研究科・教授	1
A01 公	16H00957 強電子相関係配位ナノシ ートの創製	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	西原 寛	東京大学・理学系研究科・教授	1
A01 公	26110508 自発的に生じる電子密度 勾配を利用した勾配型分 子導線の創製	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	山下 建 (アルブレヒト 建)	東京工業大学・資源化学研究所・ 助教	1
A01 公	26110511 有機ラジカルのスピンの に基づく単一分子スピント ロニクス	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	松下 未知雄	名古屋大学・理学研究科・准教授	1
A01 公	16H00962 有機ラジカルのスピンの に基づく単一分子スピント ロニクス素子の開発	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	松下 未知雄	名古屋大学・理学研究科・准教授	1
A01 公	26110514 合成化学的分子配線法を 基軸とする外部刺激応答 性分子デバイスの作製	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	寺尾 潤	京都大学・工学研究科・准教授	1
A01 公	16H00965 ビルドアップ型分子配線 を基軸とする機能性分子 素子の作製	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	寺尾 潤	東京大学・大学院総合文化研究 科・教授	3
A01 公	16H00973 整流特性を有するメタロ 超分子ポリマーの開発と 素子化	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	樋口 昌芳	物質・材料研究機構・機能性材料 研究拠点グループリーダー	1
A02 公	26110503 電極間伸長固定された DNA/導電性高分子高次組 織体単一鎖の光電機能	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	小林 範久	千葉大学・融合科学研究科・教授	2

研究 項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成 員数
A02 公	16H00955 電極間伸長固定 DNA/光電 機能分子単一鎖ネットワ ークの光電機能	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	小林 範久	千葉大学・融合科学研究科・教授	1
A02 公	26110506 分子アーキテクトニクス を志向した水素終端化シリ コン表面の新規化学修 飾法の開発	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	山野井 慶徳	東京大学・理学系研究科・准教授	1
A02 公	16H00958 ナノメートルサイズの電 極基板上の化学修飾を利用 した光並びに電子デバイ スの開発	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	山野井 慶徳	東京大学・理学系研究科・准教授	1
A02 公	26110507 分子ナノアーキテクトニ クスによる低次元量子スピ ン系の構築と新奇量子 物性の開拓	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	吉田 靖雄	東京大学・物性研究所・助教	2
A02 公	26110510 金属ポルフィリン自己組 織化分子層の構造制御積 層化による新規機能性界 面構造の構築	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	近藤 敏啓	お茶の水女子大学・人間文化創成 科学研究科・教授	1
A02 公	26110515 脱着可能な分子－電極接 合法の確立と応用	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	奥山 弘	京都大学・理学研究科・准教授	1
A02 公	16H00966 脱着可能な分子－電極接 合法の確立と応用	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	奥山 弘	京都大学・理学研究科・准教授	1
A02 公	16H00963 原子層/分子集積体ヘテ ロ界面を用いた機能開拓	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	北浦 良	名古屋大学・理学研究科・准教授	1
A03 公	26110501 単一分子接合の形成過程 と構造熱揺らぎに関する 第一原理シミュレーショ ン	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	中山 哲	北海道大学・触媒化学研究センタ ー・准教授	1

研究 項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成 員数
A03 公	16H00952 不揮発性抵抗変化メモリ の動作機構解明と集積化 への展開	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	中山 哲	北海道大学・触媒化学研究センタ ー・准教授	1
A03 公	26110516 AFM/STM による単分子接 合の電気伝導度と結合様 式の関係の解明	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	杉本 宜昭	東京大学・新領域創成科学研究 科・ 准教授	1
A03 公	16H00959 A F M / S T M による力 刺激に対する分子系の応 答の解明	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	杉本 宜昭	東京大学・新領域創成科学研究 科・ 准教授	2
A03 公	26110522 ナノギャップ電極を用い た分子 ReRAM の創成	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	内藤 泰久	産業技術総合研究所・ナノシステ ム研究部門・主任研究員	2
A03 公	16H00974 低コストナノギャップ電 極作製手法と単一分子ガ スセンサの開発	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	内藤 泰久	産業技術総合研究所・ナノエレク トロニクス研究部門・主任研究員	2
A03 公	26110513 単一分子組織化を目指す 新規グラフェン分子細線 の合成	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	坂口 浩司	京都大学・エネルギー理工学研究 所・教授	1
A03 公	16H00967 表面分子アーキテクト技 術を用いる新規グラフェ ン細線の合成	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	坂口 浩司	京都大学・エネルギー理工学研究 所・教授	1
A03 公	16H00953 単一分子の物性とデバイ ス特性のギャップを埋め る時空間オペランド X 線	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	吹留 博一	東北大学・電気通信研究所・准教 授	1
A04 公	26110518 雑音発生装置を組み込ん だナノカーボン材料多形 路確率共鳴素子の開発	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	赤井 恵	大阪大学・工学研究科・助教	1

研究 項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成 員数
A04 公	16H00968 一分子雑音発生機構の解 明と確率共鳴素子への応 用	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	赤井 恵	大阪大学・工学研究科・助教	1
A04 公	26110512 分子間相互作用による電 子の秩序とその外場制御 状態の光学的観察	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	岸田 英夫	名古屋大学・工学研究科・教授	1
A04 公	16H00964 分子集合体における特異 な電子状態を利用した非 線形動作の探索とその制 御	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	岸田 英夫	名古屋大学・工学研究科・教授	2
A04 公	26110517 ヘテロナノワイヤを用い た分子素子	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	柳田 剛	九州大学・先導物質化学研究所・ 教授	1
A04 公	16H00969 自己組織化ヘテロナノワ イヤを用いた分子素子	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	柳田 剛	九州大学・先導物質化学研究所・ 教授	1
A04 公	26110521 分子・原子の協働による 新しい情報処理システム	平成 26 年度 ～ 平成 27 年度	長谷川 剛	早稲田大学・理工学術院先進理工 学研究科・教授	1
A04 公	16H00972 分子被覆硫化銀微粒子に よる綱引きモデル型情報 処理の基本動作実証	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	長谷川 剛	早稲田大学・理工学術院先進理工 学研究科・教授	1
A04 公	16H00954 プロトン-強相関パイ電 子複合系における協働的 電荷ダイナミクスのノイ ズ分光	平成 28 年度 ～ 平成 29 年度	佐々木 孝彦	東北大学・金属材料研究所・教授	1
公募研究 計 37 件					

1. 研究領域の目的及び概要（2 ページ以内）

研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募領域の着想に至った経緯、応募時までの研究成果を発展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

○本領域のめざすところ：

どのような点が我が国の学術水準の向上・強化につながる新たな研究領域であるか

アーキテクトニクスは、建築学あるいは建築構造物を意味する単語である。「[分子アーキテクトニクス](#)」には、分子を柱や梁にみたと、建築物のように組み立てることにより、調和のとれた（orchestration）電子・光・情報処理機能を発現させたいという意味をこめた。

本研究領域では、研究者は、いわば「[分子アーキテクト](#)」（[分子建築士](#)）として、「設計」と「ものづくり」に参加し、柱（分子）を土台（表面）のどの位置に、どのような様式で接続し、柱と梁をどのように組み合わせるかを緻密に設計し、組織体を作り上げることをめざす。建築物との違いは、分子組織体に電流やスピンを注入し、信号として取り出すことである。非対称および非線形伝導現象やクーロンブロッケード現象の発現機構の解明、構造-機能相関の研究を行い、本来は構造形成や信号処理における障害であるノイズやゆらぎを積極的に利用して、[個々の分子の損傷や誤動作を多数の分子の協働によってカバーする信号処理の設計指針](#)を導出する。

このように、分子設計・合成、表面物理、単一分子電気特性計測、情報処理、集積回路、物性理論を専門とする研究者でチームを組織することにより、相乗効果によりそれぞれの分野の学術水準の向上はもとより、世界に先駆けて、[単分子エレクトロニクス研究の新しい方向性を打ち出し、学問領域の創成](#)を行う。

本提案は、公募要領における下記の対象と合致する。

・異なる分野の研究者が連携して行う共同研究等の推進により当該研究領域の発展を目指すもの

分子合成、表面科学、物性物理、電子工学、ナノ科学の研究者が目標をひとつにして、単一分子エレクトロニクスの第3ステージとしての分子アーキテクトニクスの創成を目指す。

・当該領域の研究の発展が他の研究領域の研究の発展に大きな波及効果をもたらすもの

分子アーキテクトニクスの創成を通じ、新しい分子設計手法、分子組織体の構築手法および計測手法の発展と、究極の省エネルギー素子への設計指針の導出につながる。

本研究を通じ、負性微分抵抗素子を用いた確率共鳴型の論理回路や、積分型閾値素子・積分型発火素子を用いた神経回路の実現など、エレクトロニクスの進展に分子が主役となるブレークスルーをもたらす。また、共同研究に従事する若手研究者や学生は必然的に異分野の学問体系や、基礎から出口までの幅広い考え方と遭遇することを利用し、分野横断的で全体を俯瞰する能力を持つ研究者を養成する。

○領域開始時の学術的背景

1974年に Aviram と Ratner によって提案された「[分子整流器](#)」は、多くの研究者の興味をひき、分子設計技術と電極-分子-電極システムの作製および電気特性計測技術の発展をもたらした。2000年までは技術的な難しさから、[有機単分子膜を用いた擬似的な単分子計測](#)が中心であったが（[第1ステージ](#)）、40年を経てようやく実験的に整流性が確認されるに至り（Tao et. al, Nature Chemistry 2009）、精密な分子設計による高機能のスイッチング素子の作製が期待されていた。分子合成においては、日本のグループが高い技術を有し、整流特性を示す分子をはじめ、長さ 100 nm を超える分子ワイヤーなども合成され、電気伝導度の長さ依存性や温度依存性も計測可能となっていた（A03 寿田・A03 浅井美 2012）。さらには、強磁性電極間に分子を挿入し、スピン注入および輸送特性の計測

も可能となっていた (A03 山田 2011、A03 寿田 2011)。すなわち、**電極-分子-電極システムにおける単一分子の電気伝導度計測手法はほぼ確立し (第2ステージ)**、分子のもつ短所である熱的不安定性やゆらぎを克服し、個々の分子の損傷や誤動作を集団としてカバーする**分子の組織化と協働現象による機能の発現に挑戦すべき第3ステージに入った**といえる。一方、走査トンネル顕微鏡 (STM) を中心とする表面計測技術も 10T の強磁場中、1K 以下の極低温下での計測が可能となり、清浄表面に固定した分子の電子構造、振動構造、スピン状態を原子分解能で解析するに至っていた。特に、分子のスピン自由度の利用は、スピントロニクス分野および量子情報分野における新しい演算処理につながる重要な課題として注目が集まっていた。分子の持つ π 電子の配置ひとつでスピン状態が変化することも確認されており (A02 米田 2011)、より高度な構造設計によりスピン制御による演算も可能になると期待できた。こうした分子機能を工学的に有用な信号処理機能へ導き利用できるようにすることが分子アーキテクニクスの目指すところである。しかしながら、その実現にはさまざまなゆらぎやノイズが障害となる。

一方、**生物はゆらぐ環境の中でノイズを巧みに利用しながら極めて高いエネルギー効率で機能**している。個々の素子が損傷または誤動作しても、集団として機能を維持している。無機半導体分野では、生物の手法に学び素子の非線形性とダイナミクスを利用しノイズやゆらぎとの共存協調を目指す研究に期待が寄せられている。こうした手法は**有機分子材料との親和性が高く、単一分子エレクトロニクス研究の第3ステージを展開する際の有力なアプローチ**となる。

世界的には、欧米のグループが、市販の分子 (特に分子量の小さな分子) を用いて、物理的な計測に特化しているのに対し、日本のチームは、テーラーメイドで設計・合成された分子を用い、分子の個性を引き出すための計測実験を行う特徴がある。

○基本的な研究戦略

本研究領域では、精密に設計された分子を、幾何学的・電子的構造の規定された物質表面上に、接続方法を制御して配置し、キャリアおよびスピンの輸送に伴い、単一分子の組織体が協働して発現する機能の創成を目標とした (図 1)。

それは、あたかも「分子でできた建築物」(分子アーキテクチャ)を構築するようであり、研究者は、いわば「分子アーキテクト」(分子建築士)として、「設計」と「ものづくり」に参加する。したがって、基本的な戦略は、「設計図」および「設計思想」(アーキテクト)を創ることからはじまった。**「土台」となる表面の設計と精査・改質 (研究項目 A02)**、「柱や梁」となる**分子の設計と吟味・改良 (研究項目 A01)**、表面と分子 (土台と柱)、**分子と分子 (柱と梁) の接続の設計と検査・改造 (研究項目 A03)**が極めて重要となる。さらに、「建物」が、調和して地震に耐えるように、分子の持つ短所であった熱的不安定性や構造ゆらぎを積極的に信号処理に取り入れ、**協働して機能を発現するための新しい方法論と構造設計指針を導出することを目標とした (研究項目 A04)**。

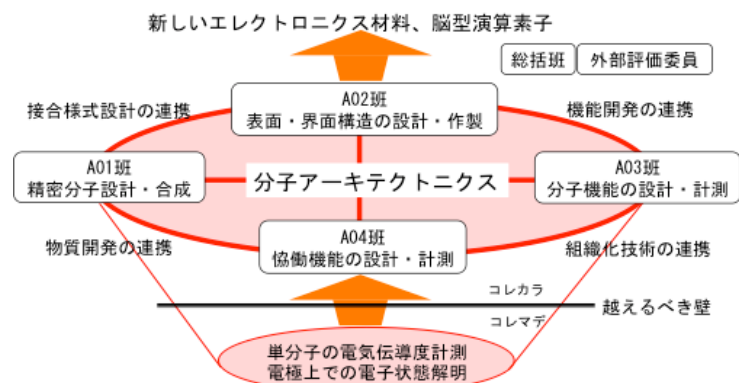


図 1. 研究項目とその連携。

2. 研究領域の設定目的の達成度（3 ページ以内）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らしての達成度合いについて、具体的に記述してください。必要に応じ、公募研究を含めた研究項目ごとの状況も記述してください。

○申請時に、領域として「何をどこまで明らかにするか」として下記の4つの目標を設定した。

目標 1 分子へのキャリアやスピンの注入において重要な役割を担う電極表面と分子の接合部分の電子状態を原子レベルで明らかにし、注入効率のよい接合様式に関する設計指針を与える。

目標 2 非対称および非線形伝導現象やクーロンブロッケード、量子伝導（波動性）と熱活性伝導（粒子性）のクロスオーバー等、分子組織体を用いて信号処理を行うための要素現象の機構と構造-機能相関を電荷キャリアとスピンの伝導に対して明らかにする。

目標 3 単分子接合の特性を光や電場、磁場によりスイッチング制御するための設計指針を導出する。

目標 4（領域の目標） 単分子接合の特性を上手く活かすための分子の適切な配置・ネットワーク構造をデザインし、協働現象で発現する機能の設計を行い、有機分子のエレクトロニクス利用における短所である熱的不安定性や構造ゆらぎを積極的に信号処理に利用し、個々の分子の損傷や誤動作を協働して克服するための新しい方法論と構造設計指針を導出する。

○この目標の達成のため、A01-A04 の4つの研究項目（研究班）を設定し、各研究計画を実施するとともに、班内および班間の共同研究を戦略的に立案・推進し、以下のような成果を得た。（名前 A/名前 B）は共同研究の成果であることを示す。

目標1の達成状況

これまでの分子エレクトロニクス研究では、電極として金を用い、分子と電極を接合するアンカーとしては、金と親和性のよいチオール基を用いた分子接合に関する研究が中心であった。本領域では、多様な分子接合を実現するためアンカー部および電極材料の拡張を図った。まず、アンカー部に関しては、三脚型アンカー（家）や環状π電子系アンカー（小川、宇野、家）を設計・合成し、安定な電気的接続が可能であることを実証した。三脚型アンカーの接合官能基の違いにより注入されるキャリア（電子、正孔）を制御できることを熱起電力測定（多田/家）により明らかにし（[図2](#)）、π電子系アンカーは金属だけでなくグラフェンやカーボンナノチューブの炭素系電極と安定した接合が形成できることを示した（家/松本和）。金属表面に吸着した環状型π電子化合物については、走査型プローブ顕微鏡を用いて、その吸着構造と電子状態およびスピン状態を分子内分解能で明らかにし（米田/小川、高木、杉本^{公募}）、目標2の非線形な電気伝導を実現するための界面設計指針の導出につながった。

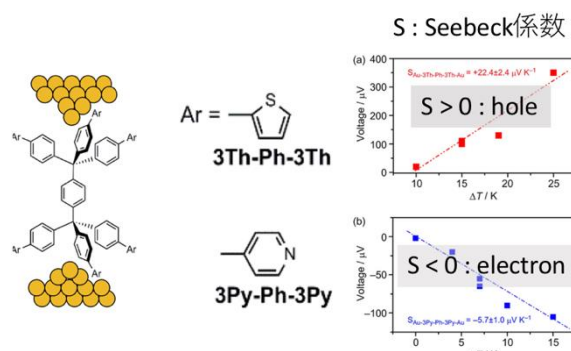


図2. 三脚アンカー分子（左）と、熱起電力測定（右）により明らかになった電荷キャリアの官能基依存性。

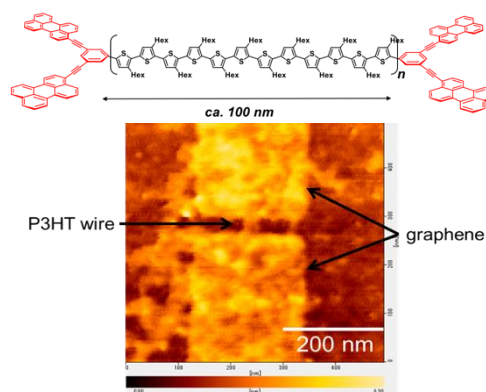


図3. グラフェンに吸着させるためのアンカーを取り付けたチオフェン重合体(P3HT)（上）. グラフェンナノギャップ電極に架橋したP3HTの原子間力顕微鏡像（下）.

一方、電極に関しては、強磁性金属(山田、多田)、グラフェン(松本和)、グラフェンナノリボン(坂口公彦)、カーボンナノチューブ(小川、赤井公彦)、水素終端シリコン(山野井公彦)、シリセン(高木、石田、長谷川修)と分子の接合について検証した。強磁性電極を用いた分子接合では、磁気抵抗効果特性の発現を確認し、目標3のスイッチング素子の実現につながる知見が得られた。また、グラフェンにナノ加工を施して電極とし、分子ワイヤーを架橋した(家/松本和/浅井美)(図3)。これは、安定した固定電極を用いた素子の設計指針となる。カーボンナノチューブと分子の接合では、目標4のノイズを用いた信号処理に向けた成果につながった(小川/赤井公彦/浅井哲)。これらの研究は、分子アーキテクチャの基盤技術として重要な指針となっており、当初の目標を達成したといえる。また、電極表面での π 電子化合物の吸着構造・電子構造を解明する過程で、自由空間で本来ねじれている有機分子が表面に吸着することによって、平面化し、化学反応が促進されたことが原子間力顕微鏡(AFM)により分子内構造を可視化することにより明らかとなった(宇野/杉本/坂口)(図4)。くわえて、AFMの探針からの力によって化学反応が引き起こされる様子も観測されるなど、単分子メカノケミストリー分野としての広がり期待させる。共同研究の結果、領域外へも波及効果の大きな結果を得られたことの意義は大きい。

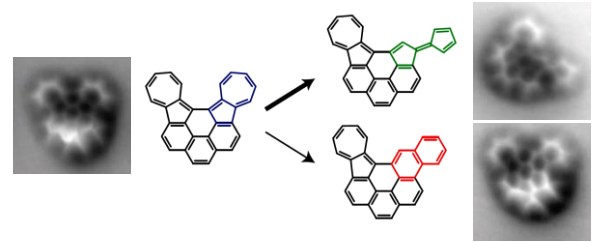


図4. 基板表面に吸着することで平面化した分子(左)と吸着後の構造変化(右)。白黒画像はAFM像。

目標2の達成状況

目標4の達成には、非線形および非対称な電気伝導を示す分子接合の実現が不可欠であるとの共通認識のもと、整流特性や負性微分抵抗を発現する分子接合を作製し、その発現機構を明確にすることを重要な課題とした。その結果、ふたつの新しい機構による整流特性を確認した(図5)(小川/多田、アルブレヒト/多田)。ひとつは、ドナー分子およびアクセプター分子の分子面を直交させて接合する設計であり、これまでより高い整流比を実現した。もうひとつは、電極間に発生する強電界により分子軌道が変形することを利用したもので、新たな整流素子の設計指針を与えた。また、ねじれや折れ曲がりのない完全剛直型のオリゴチオフェン分子を合成することで量子伝導と熱活性伝導のクロスオーバーについて明らかにした(家/多田)。単分子ダイオードや量子伝導の予測方法は、分子エレクトロニクスでは最も根幹をなす研究対象でありながら、分子構造・計測結果・理論解析を体系的に行った研究例は数少なく、実験・理論の両面から新奇メカニズムの提唱と実証を行えたことは、大きな進展があった点といえる。

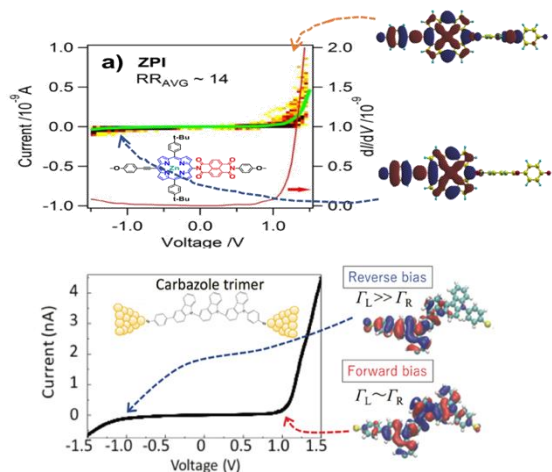


図5. ドナー・アクセプター分子を直交させ分子軌道を断裂させた単分子ダイオード(上)と、局所双極子モーメントをもつ官能基を連結し、電界による分子軌道の変形を利用した単分子ダイオード(下)。

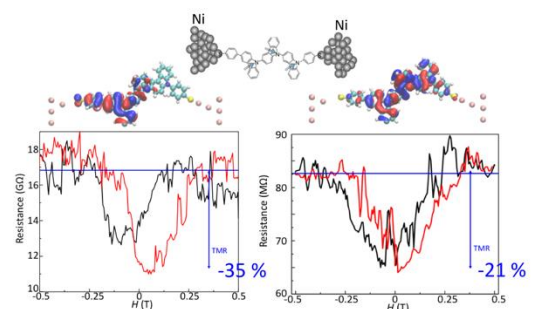


図6. Niを電極とダイオード分子の接合の磁気抵抗効果. 印加電圧方向を反転させると磁気抵抗比が変化する。

目標3の達成状況

グラフェンを電極とする分子ワイヤーの架橋構造では、光照射およびゲート電界印加による電流の変調を確認した(家/松本^和/浅井^美)。また、強磁性電極を用いた分子接合では、磁場印加による抵抗変化(磁気抵抗効果)を確認し、電極間の電場によって誘起される接合様式の変化は、抵抗比および符号に影響を与えることを見出した(図6)(多田/アルブレヒト^公)。これらの結果は、スイッチング素子の設計指針を得るといって目標3を達成したものである。

さらに、金属イオンを内包するポルフィリンアレイの電気伝導度計測を行い、分子のキャリア透過率が、官能基ごとのキャリア透過率の積で表されることを実証した(図7)(小川/多田)。この結果は、分子の官能基の組み合わせで電気伝導度特性を設計できることを示しており、分子エレクトロニクスにおいて新しい方法論を導入したものである。さらに、分子薄膜などの電気伝導度が、クーロンブロッケードによって説明されることも見出し(松本^卓/赤井^公)、これは、有機材料の電気伝導機構の理解に新しい概念を提示したものであり、これらの研究は、単分子エレクトロニクスおよび有機薄膜エレクトロニクスの進展に寄与する成果である。

目標4(領域の目標)の達成状況

協働機能として確率共鳴を対象とし、その実現に向けた素子構造を研究した。半導体ナノワイヤに分子を吸着させた系では、ナノワイヤを流れる電流に分子の価数ゆらぎに起因するノイズが発生することを見出した(葛西)。このことをヒントとし、電極間に複数本のカーボンナノチューブを架橋し、酸化還元能をもつ分子を吸着させることで、素子の内在ノイズを利用した確率共鳴をはじめて確認した(赤井^公/葛西)。また、カーボンナノチューブとポリ酸(H₃PMO₁₂O₄₀: POM)分子のネットワーク構造に電圧を印加すると自励発振的に電圧パルスが生じる現象を見出し(図8)(浅井^哲/小川/赤井^公)、脳の情報処理を模したパルスを利用した情報処理のモデルを構築し、シミュレーションによりその原理を実証した(浅井^哲/小川/赤井^公)。さらに、金属ナノ粒子と分子の結合によるネットワークでは、多入力信号が加算されるミキサー効果があることを明らかにした(松本^卓)。

以上の結果より、目標4は十分達成されたといえる。これに加え、自己組織的にネットワークを形成するポリマーの作製と演算の実現(図9)(赤井^公)や自励スパイク発生現象のリザーバ計算機への応用方法の提唱(浅井^哲)など分子アーキテクニクスの情報工学分野への発展に寄与する成果の創出につながった。

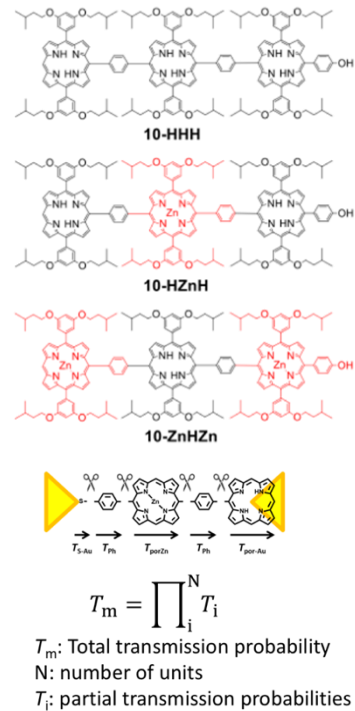


図7. ポルフィリンラダー型分子の構造。分子のキャリア透過率が、各官能基の透過率の積で予測可能であることを示した。

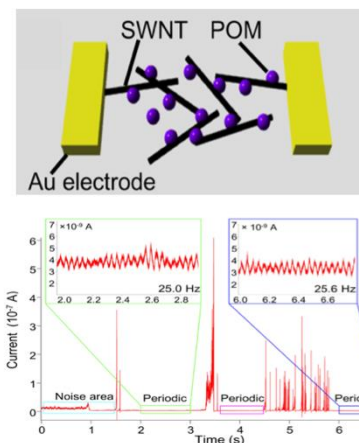


図8. 単層カーボンナノチューブ(SWNT)とポリ酸(POM)分子のネットワーク構造(上)と、電圧を印加した際に観察された自励発振的な電圧パルス(下)。



図9. 電解重合による導電性分子の自己組織的ネットワーク形成。

3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況（1 ページ以内）

研究推進時に問題が生じた場合には、その問題点とそれを解決するために講じた対応策等について具体的に記述してください。また、組織変更を行った場合は、変更による効果についても記述してください。

異分野相互理解の仕組みづくり

A01-A03班は、サンプルの合成（A01）、基礎物性計測（A02）、デバイス機能探索（A03）という連携から相互理解が比較的進んでいるのに対し、A04班は、半導体工学および情報処理工学を含む異分野・異文化に属する研究者の集まりであり、A04班と他班の相互理解は当初からの課題であった。総括班では、この相互理解こそが新学術の創成につながるとの信念に基づき、領域代表のリーダーシップの下、領域全体で会議や打ち合わせを行った。

まず、半導体工学分野からの視点で分子エレクトロニクス分野の体系を理解するため、A04班班長の葛西が機能分類表（図10）を作成し、各研究グループが取り扱っている現象を「電子素子」の立場から整理するための分類体系を設定した。この分類体系に沿って領域研究全体を捉え直すため、比較的分野に近いA03班のメンバーの意見を参考にしながら、半導体工学との接点を意識した共通の言葉で研究内容を整理しなおした研究体系化シート（図10）を初年度終わりまでに作成した。この結果、A04班と他班との共同研究は加速し、初年度終了時の4件から、中間評価時点（平成27年）で14件に増加した。

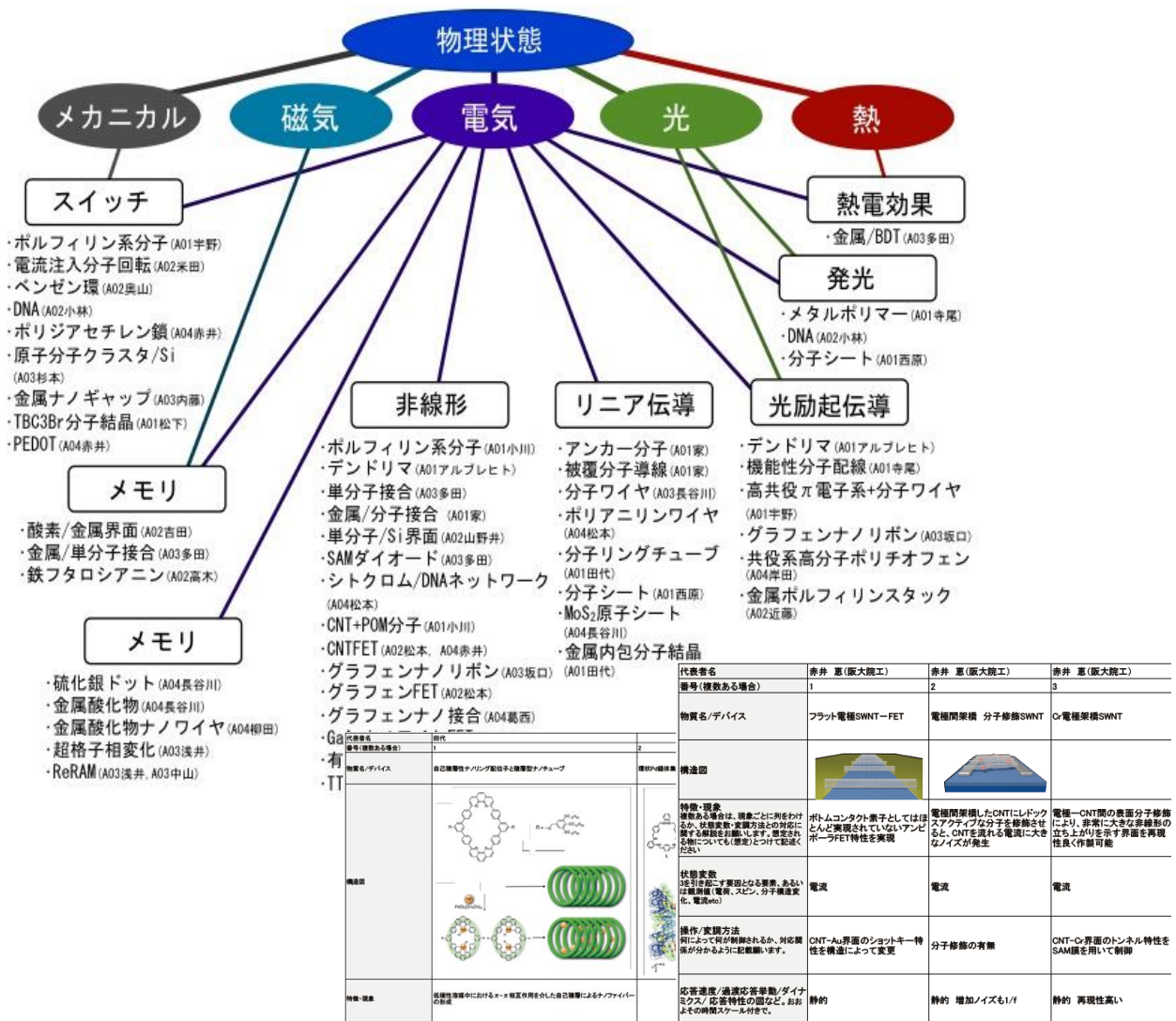


図10. 機能分類表（左上）と体系化シート（右下）。

4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況（2 ページ以内）

審査結果の所見及び中間評価において指摘を受けた事項があった場合には、当該コメント及びそれへの対応策等を記述してください。

審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況

審査所見では、以下のようなコメントを頂いた。

「分子の設計・計測と界面の制御を行う研究項目 A01、A02、A03 の連携はスムーズに行われると期待されるのに対して、デバイス応用に近い分野を担当する研究項目 A04 は、他の研究項目との連携が難しいかもしれないが、本研究領域の目的達成にはその連携こそが不可欠である。個別の研究では得られない、領域全体での融合的連携による相乗効果を期待したい。」

A04 班と他の班の相互理解については、領域設立時から、最重要課題として認識しており、まず、A04 班が他班を理解するための視点として、前項 (p. 13) に示したように、体系化シートを作成し、半導体工学と分子エレクトロニクスの接点を明確にした (初年度)。

中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況

上記の対応の結果、共同研究が活発になり、中間評価時のコメントでは、

「新しい研究領域を形成する取り組みとしては、これまでと比しても極めて広範な研究分野にまたがっているが、研究領域形成の方策を戦略的に提示して研究領域全体で努力を重ねており、着実に成果を上げていることから研究領域の設定網的に照らして期待通りの進展があったと認められる。」

との評価を頂いた。

一方で、「研究期間終了時に達成すべき目標が必ずしも明らかではない側面もあることから、総花的ではなく、領域全体の統一感を持って新たな具体性のある概念が発信できるよう留意されたい。」とのご指摘を頂いた。

領域では、体系化シートの作成後、領域代表と A04 班が中心となり、目標を明確にするため、単分子エレクトロニクス素子の特性がどのような情報処理に繋がる可能性があるか、という出口戦略を示す俯瞰図 (図 11) を 2 年目の終了時までには作成した。この俯瞰図により、領域メンバー全員が、何をどのように研究展開を行い、領域の目標にどのように貢献できるかという戦略が明確になった。

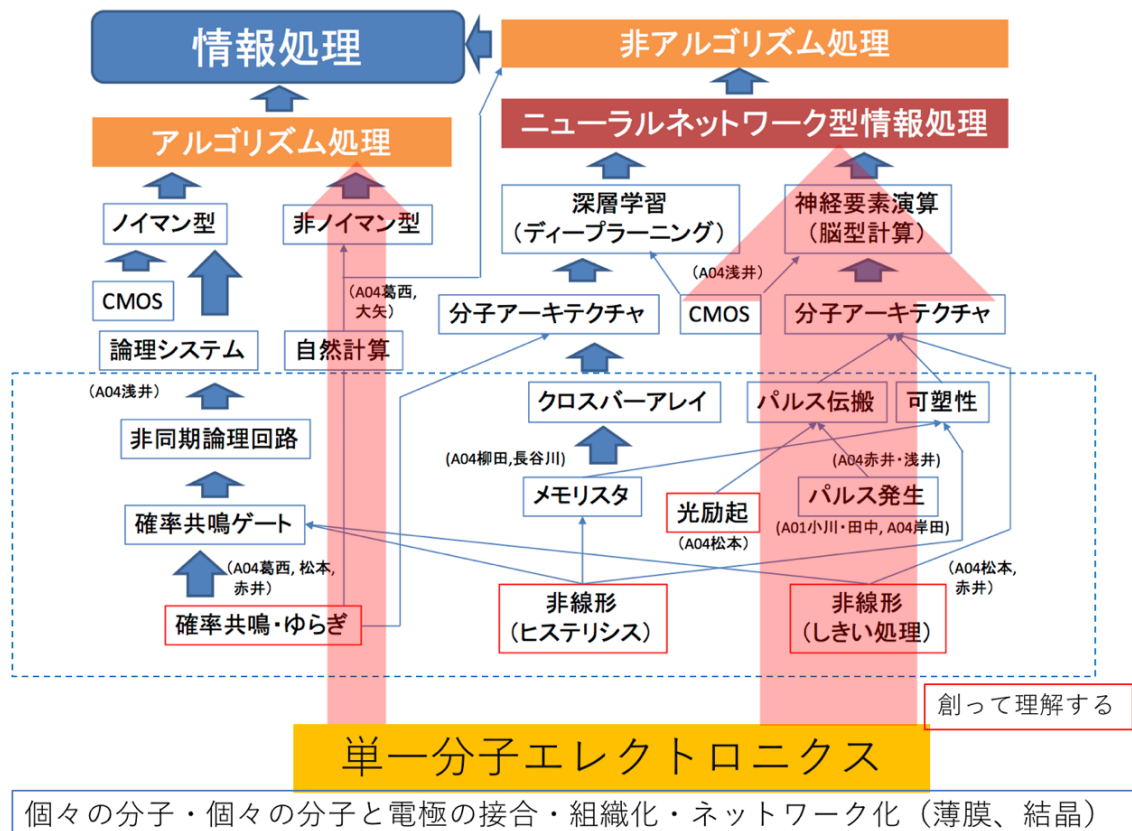


図 11. 情報理工学分野のマップと単分子エレクトロニクスの接点を示す俯瞰図。

中間評価では、さらに、以下のより具体的な指摘を頂いている。

「個々の研究についてはこれまでも順調に成果が上がっているのですが、それらを研究領域としてまとめ上げるために、最終目標を明確にし、研究領域全体として総花的にならないように留意する必要がある。総合的な技術体系を構築する研究においては、対象を拡大するばかりでなく、焦点を当てる対象を絞ってその設計・合成・素子構築を行い、機能体系を明らかにすることで分子の構造、配列、機能の一連の関係を見通すことが重要である。そのために、研究領域で協働してアイデアを産み出す努力を継続していくことが必要である。そういった観点では、今後の計画においても領域会議や国際シンポジウム、若手ワークショップも引き続き積極的に実施することが予定されており、十分に対応を図っていると判断できる。また、最新の研究成果と新たな指針を盛り込んだ教科書の出版も有効かつ重要な取組みであり、実現が望まれる。」

以下、指摘された項目への対応を記す。

最終目標の明確化：目標4の「共同現象機能の発現」への例と道筋を、[図11](#)の俯瞰図としてわかりやすく示した。

焦点を当てる対象を絞る：最終目標の達成に向けた課題を領域で共有し、俯瞰図により目標1～3の戦略を明確にした。目標3では、非線形な電気伝導度特性に対する電場や磁場の影響を調べることでスイッチング素子の実現を行うとともに、素子に内在するノイズの計測を行うことを共通課題として位置付けた。目標2では、非線形（ヒステリシス、しきい処理）な電気伝導を示す分子接合の作製と機構の解明をめざし、目標1では、そうした特性を発現する分子の設計と電極材料の拡張を中心課題にすえて、積極的な共同研究の推進を行った。

アイデアを生み出す努力の継続：半年に1回のペースで領域会議とあわせ、一般に開かれた研究会として「分子アーキテクトクス研究会」を開催した。若手ワークショップは領域期間終了までに8回の開催を重ねるに至った。これらの会議では個々のプレゼンテーションでの質問時間の確保、長時間のポスター発表を行うことに加え、単なる成果発表ではなく問題提起型の議論・討論を盛り込んで新しいアイデアを生み出す工夫を重ねた。この結果、中間評価後もすべての班間・班内で、あらたな共同研究が行われた（[表1](#)）。国際シンポジウムを、大阪、札幌、ドイツ、大阪で開催し、国外研究者ともテーマを絞った集中的な討論と情報交換を行った。

教科書の出版：2016年に知床で行った国際ワークショップの参加者から主な執筆者を募り、本学術領域研究が目指す新分野の体系的な教科書として、「Molecular Architectonics」をSpringer社から出版した（[図12](#)）。この教科書は若手ワークショップのテキストとして用いられ、今後の分子アーキテクトクス分野の発展の方向性を議論するため、有用な役割を果たした。またこの分野に関する日本語の総説、「CSJ カレントレビュー：分子アーキテクトクス-分子エレクトロニクスの新たな展開」（日本化学会編・化学同人）を編集中である。

表1. 共同研究の数.

H27中間報告時点

	A01	A02	A03	A04
A01	1	26	33	10
A02	×	7	7	2
A03	×	×	9	2
A04	×	×	×	20

領域終了時点

	A01	A02	A03	A04
A01	9	32	69	31
A02	×	17	13	4
A03	×	×	17	7
A04	×	×	×	28

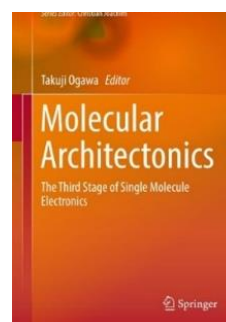


図12. 出版した教科書の表紙.

5. 主な研究成果（発明及び特許を含む）[研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理する]

（3ページ以内）

本研究課題(公募研究を含む)により得られた研究成果(発明及び特許を含む)について、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。記述に当たっては、**本研究課題により得られたものに厳に限ること**とします。

A01 計画班

分子合成技術を駆使して単分子素子の構成ユニットを開発した。A02、A03、A04 班との共同研究によるフィードバックを受けてテラーメードの材料開発を進め、特に A04 班との連携によりニューロモルフィックな分子デバイスに必要な構成要素を開発した。

小川グループは、単層カーボンナノチューブ (SWCNT) / (POM) ネットワーク材料において、自発的電流インパルスを観測し、A04 浅井哲グループ・A04 赤井グループと共同でそのメカニズムを明らかにした(*Nature Commun.* 2018, *Accepted.*) (図 8)。家グループは、A03 冨田グループと共同で三脚型分子を用いることで、単分子接合の電荷キャリアをアンカー部の官能基で制御できることを示した (*J. Phys. Chem. Lett.*, 2015) (図 2)。宇野グループは、A03 杉本グループ、A03 坂口グループと共同で、捻じれた π 電子系を有する分子が単結晶基板上で平面化すること、さらに平面化によって特異な化学反応が起こることを非接触 AFM による分子内分解能の画像解析により明らかにした (*Nature Commun.*, 2017) (図 4)。

A01 公募班

2次元シートや超分子、 dendrimer など、より高次の集合体の研究が活発に行われ、単分子機能に加え、本領域が目指す、協働機能を実現するための「建築構造」の作製に向けた研究を進展させた。

西原グループは、錯体分子の持つ対称性や機能を活用し、(a) カゴメ格子、(b) エレクトロクロミック機能 (c) 光電変換機能を持つ二次元ナノシートの合成に成功し (*Nature Commun.* 2015)、その電子物性を A03 長谷川修グループとの共同研究により明らかにした (*J. Am. Chem. Soc.*, 2014) (図 13上)。田代グループは、独自の超分子錯体ナノファイバ構造中に銀イオンを内包させることに成功し (*J. Am. Chem. Soc.* 2014)、A04 葛西グループと共同でナノギャップ電極間に超分子ナノファイバを架橋させることに成功した。松下グループは、単分子有機スピントロニクスに必要なスピン偏極ドナー分子を開発し、A02 高木グループ、A03 内藤グループと共同で単分子磁気抵抗効果の検出を試みた。アルブレヒトグループは、双極子モーメントを持つ分子を開発し、A03 冨田グループと共同で新奇単分子ダイオードの開発に貢献した (図 5)。寺尾グループは、A03 冨田グループと共同で、金属錯体をリンカーにした分子ワイヤにおいて、メタルと π 電子の結合が弱い場合にホールの易動度が大きくなることを明らかにした (*J. Phys. Chem. C*, 2016) (図 13下)。樋口グループは、メタロ超分子ポリマーにより、アルブレヒトグループの分子と類似の特性を持つ双極子モーメントをもつ分子鎖の三次元的ネットワークを作製した (*ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2017)。

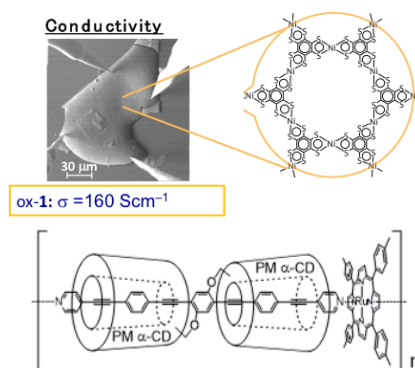


図 13. (上) 金属錯体二次元分子シートの電気伝導度測定 (A01 西原グループ & A03 長谷川修グループ). (下) 金属錯体リンカー分子ワイヤーの構造 (A01 寺尾グループ & A03 冨田グループ).

A02 計画班

走査型トンネル顕微鏡を中心とした精密測定によって、基板表面に固定されることにより誘起される特異的な分子の電子状態やそれによって産み出される磁気特性を解明した。グラフェンを電極とした分子素子を展開した。

米田グループは、極低温走査型トンネル顕微鏡 (STM) により、Au 表面に吸着したコロール分子が磁性を示すことを明らかにした (*Nature Commun.* 2015)。また、高木グループ、A02 北浦グループ、A03

吹留グループ（公募）との共同研究により、二次元物質層の界面電子状態の研究も行い、エピタキシャルグラフェンと SiC の界面において、特徴的な低エネルギーフォノンを初めて発見した (*Phys. Rev. B* 2017)。石田グループは、高木グループと共同で、シリセンの電子状態を解明した (*New. J. Phys.*, 2015)。松本和グループは、A04 赤井グループ（公募）と分子吸着単層カーボンナノチューブ素子を用いた素子を開発した (*Nanoscale*, 2017)。さらに A01 家グループと共同で、グラフェン利用した単分子エレクトロニクス素子を開発した (図3)。

A02 公募班

公募班では、基板上での分子の構造制御や分子と半導体をつなぐ方法論を提案した。

小林グループは、DNA に Ru 錯体を結合させた発光性 DNA 鎖や、DNA に吸着させたアニリンを光重合させることで、あらたな DNA とポリアニリンの複合有機分子ワイヤを作製し、A04 松本卓グループ・A04 葛西グループと共同で電極への固定に成功した (*Nonl. Opt. Quantum. Opt.* 2015) (図14)。山野井グループは、A01 田代グループ・A03 冨田グループと共同でシリコン電極基板の化学修飾を行う基礎研究として Si-Si 結合を持つヒドロシランとジヨードアレーンを用い、環化ジシランを合成し、その分子運動を明らかにした (*J. Am. Chem. Soc.*, 2017)。さらに、A03 冨田グループと共同で、微細加工したシリコン電極に分子を固定する方法を開発した (*Langmuir*, 2016)。奥山グループは、STM による分子マニピュレーションにより電極表面上の分子配置を精密に制御し、単分子接合の周辺に吸着した分子のつくる電場が電気伝導特性に影響を与えることなどを明らかにした (*Scientific Reports*, 2015)。北浦グループは、上記のように、米田グループと二次元物質層の電子状態に関する研究を行った。

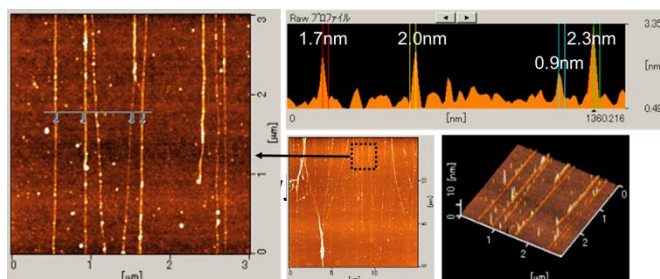


図 14. 基板に伸長固定された DNA の AFM 像 (小林グループ & A04 葛西・松本卓グループ)。

A03 計画班

単分子接合や分子・原子層膜の電荷・熱輸送特性の解明を行った。さらに、A04 班への橋渡しを意図し、ゆらぎやノイズに関する計測と理論的考察を深めている。

浅井美グループは、冨田グループと共同で、単分子接合の金属パワーファクターを示す理論的背景を明らかにした (*Nanoscale*, 7, 20497, 2015) (図15)。その他にも、単分子接合の熱輸送過程を理論的に研究し、分子の有限長のために Wiedemann-Franz 則が破綻する場合がある事を見出した (*Scientific Reports*, 2017)。長谷川修グループは上記の通り、A01 西原グループ（公募）と共同で成果をあげた。さらに、グラフェンがカルシウムのインターカレーションで超伝導化することを報告した (*ACS Nano*, 2016)。山田グループは、STM により、鉄基板上で孤立分子の位置が強固に固定されることを発見した (*Scientific Reports*, 2018)。さらに、A01 小川グループおよび A04 葛西グループと共同で、グラフェンナノリボンの電子状態を解明した (*Nanotechnology*, 2018)。冨田グループは、強磁性電極を用いた単一分子の熱起電力測定を行い、電気伝導を担う分子軌道がスピン分裂を起こしていることを示した (*Nano Lett.*, 2014)。さらに、上記の通り、A01 家グループ、アルブレヒトグループ（公募）、田代グループ、寺尾グループ、A02 山野井グループ（公募）と班間共同で、単分子接合の作製と電気伝導度測定に関して成果を上げた。

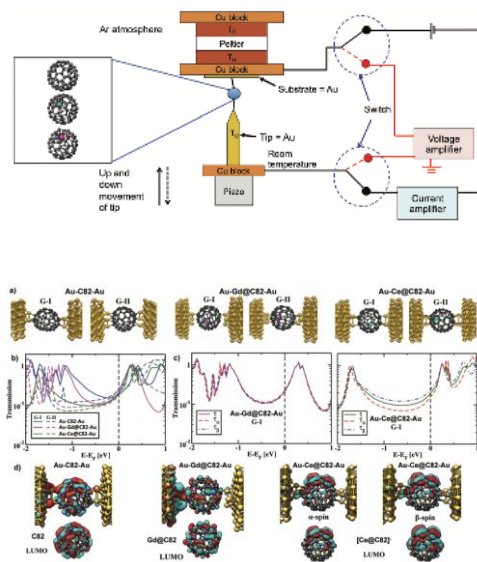


図 15. 金属内包フラーレンの熱起電力測定 (上) と理論解析 (下) (浅井美グループ & 冨田グループ)。

A03 公募班

杉本グループは、上記の通り、A01 宇野グループおよびA03 坂口グループ（公募）との共同研究で分子内分解能の AFM 観察技術を利用した化学反応の可視化について成果を挙げた(図4)。坂口グループは従来困難だったアームチェアエッジ型のグラフェンナリボンを Au(111) 上に大量にボトムアップ成長させることに成功した (*Adv. Mater.*, 2014)。さらに上記の通り、A01 宇野グループ及びA03 杉本グループ（公募）との共同研究により成果を挙げた(図4)。内藤グループは、簡便なナノギャップ作製方法を開発し(*Apply. Phys. Express.*, 2016)、作製ノウハウを公開することで、A01 松下グループの研究活動や、後述する A04 松本卓グループの研究に貢献した。吹留グループは、上記の通り、A02 米田グループ、高木グループらとグラフェン素子についての成果を挙げた。中山グループは、A01 アルブレヒトグループと共同で、カルバゾール dendrimer の励起状態を理論的に明らかにした (*Chem. Comm.*, 2017)。

A04 計画班

分子のゆらぎと非線形現象に着目した機能設計を担当し、ノイズを活用する確率共鳴に加え、いくつかの新たな論理演算システムが提案された。分子由来のノイズの実測や、確率共鳴を起こすことが知られている分子集合ネットワークの伝導機構などについて新たな知見が得られた。

葛西グループは、A01 小川グループ、田代グループと共同で、GaAs ナノワイヤ FET を用い単一分子電荷センシングに成功し、金属探針 AFM を用いてその機構を解明した (*Jpn. J. Appl. Phys.*, 2016) (図 1 6)。また A02 松本和グループとの共同研究により、確率共鳴のための非線形関数設計論、生体信号検出などへの応用を開拓した (*Appl. Phys. Express*, 2018)。松本卓グループは、A03 内藤グループと自己ドープ型のポリアニリンと金微粒子を混合した物質層において、ネットワーク内での信号混合と信号とノイズの分離入力による確率共鳴動作のデモンストレーションに成功した (*J. Appl. Phys.*, 2016, 2017)。浅井哲グループは、分子情報処理システムを構築するための新たな方向として、「パルス情報処理」を提案するとともに、上記の通り、A01 小川グループ・A04 赤井グループと自発的電流インパルスに関する成果をあげた(図8)。

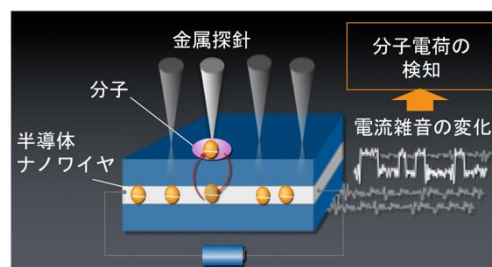


図 1 6. 分子吸着ナノワイヤにおけるノイズの発生機構の解明 (葛西グループ & A01 小川グループ、A01 田代グループ) .

A04 公募班

単分子を利用したノイズの発生方式の提案や、ナノワイヤなどの他の物質系との復号化による新機能の提案がなされ、新たなアーキテクチャ構築に向けた土台が議論されている。

赤井グループは、上記の通り、A01 小川グループ・A02 松本和グループ・A04 葛西グループ・A04 浅井哲グループと共同で成果を上げた(図8)。岸田グループと佐々木グループは、分子性結晶をもちいて、電場などの外場の印加によって分子の電子状態を制御できることを示した (*Phys.Rev.B*, 2017)。長谷川剛グループは、非アルゴリズム型の意味決定回路の動作原理の候補である「綱引き動作」を集積可能な固体素子で実行可能であることを示した (*Nanoscale*, 2016)。柳田グループは、単結晶酸化物ナノワイヤを利用した分子センサデバイスを開発した (*ACS Sensors* 2016, 2017)。

6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）（5ページ以内）

本研究課題(公募研究を含む)により得られた研究成果の公表の状況(主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況)について具体的に記述してください。記述に当たっては、**本研究課題により得られたものに厳に限る**こととします。

- 論文の場合、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding author には左に*印を付けてください。
- 別添の「(2)発表論文」の融合研究論文として整理した論文については、冒頭に◎を付けてください。
- 補助条件に定められたとおり、本研究課題に係り交付を受けて行った研究の成果であることを表示したもの(論文等の場合は謝辞に課題番号を含め記載したもの)について記載したもののについては、冒頭に▲を付けてください(前項と重複する場合は、「◎▲・・・」と記載してください。)
- 一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。

2018年5月17日時点で、591報の論文(国際雑誌査読あり)が出版済み・あるいは掲載が決定している。全論文リストは、領域webに加え、研究者が自由に利用できる文献情報共有SNSサイト(Zotero.org および、Mendelay.com)にて Molecular Architectonics グループとして公開している。



A01

計画班

- ◎▲Tanaka, H.; Akai-Kasaya, M.; Yousefi, A.T.; Hong, L.; Fu, L.; Tamukoh, H.; Tanaka, D.; Asai, T.; and Ogawa, T. A molecular neuromorphic network device consisting of single-walled carbon nanotubes complexed with polyoxometalate. *Nature Communications*, **2018**, 9, in press.
- Tamaki, T.; *Ogawa, T. Nonlinear and Nonsymmetric Single-Molecule Electronic Properties Towards Molecular Information Processing. *Top Curr Chem (Z)* **2017**, 375, 79.
- ◎▲Tamaki, T.; Ohto, T.; Yamada, R.; Tada, H.; *Ogawa, T. Analysis of Single Molecule Conductance of Heterogeneous Porphyrin Arrays by Partial Transmission Probabilities. *ChemistrySelect* **2017**, 2, 7484–7488.
- ◎▲*Shiotari, A.; *Nakae, T.; Iwata, K.; Mori, S.; Okujima, T.; Uno, H.; Sakaguchi, H.; Sugimoto, Y. Strain-Induced Skeletal Rearrangement of a Polycyclic Aromatic Hydrocarbon on a Copper Surface. *Nature Communications* **2017**, 8, 16089.
- ▲*Okujima, T.; Ando, C.; Agrawal, S.; Matsumoto, H.; Mori, S.; Ohara, K.; Hisaki, I.; Nakae, T.; Takase, M.; Uno, H.; *Kobayashi, N. Template Synthesis of Decaphyrin without Meso-Bridges: Cyclo[10]Pyrrole. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 138, 7540–7543.
- *Ie, Y.; Okamoto, Y.; Tone, S.; *Asō, Y. Synthesis, Properties, and π -Dimer Formation of Oligothiophenes Partially Bearing Orthogonally Fused Fluorene Units. *Chemistry – A European Journal* **2015**, 21, 16688–16695.

公募班

- Black, N.; Daiki, T.; *Matsushita, M. M.; *Woollins, J. D.; Awaga, K.; *Robertson, N. Giant Negative Magnetoresistance in Ni(Quinoline-8-Selenoate)₂. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 20 (1), 514–519.
- *Fujihara, T.; Yokota, K.; Terao, J.; *Tsuji, Y. Copper-Catalyzed Hydroallylation of Allenes Employing Hydrosilanes and Allyl Chlorides. *Chem. Commun.* **2017**, 53, 7898–7900.

- (3) ▲Shimada, M.; *Yamanoi, Y.; Ohto, T.; Pham, S.-T.; Yamada, R.; Tada, H.; Omoto, K.; Tashiro, S.; Shionoya, M.; Hattori, M.;(他 5 名); *Nishihara, H. Multifunctional Octamethyltetrasilal[2.2]Cyclophanes: Conformational Variations, Circularly Polarized Luminescence, and Organic Electroluminescence. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 11214–11221.
- (4) ▲*Sakamoto, R.; Takada, K.; Pal, T.; Maeda, H.; Kambe, T.; Nishihara, H. Coordination Nanosheets (CONASHs): Strategies, Structures and Functions. *Chem. Commun.* **2017**, *53*, 5781–5801.
- (5) Chakraborty, C.; Rana, U.; Pandey, R. K.; Moriyama, S.; *Higuchi, M. One-Dimensional Anhydrous Proton Conducting Channel Formation at High Temperature in a Pt(II)-Based Metallo-Supramolecular Polymer and Imidazole System. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2017**, *9*, 13406–13414.

A02

計画班

- (1) ◎▲*Terasawa, D.; Fukuda, A.; Fujimoto, A.; Ohno, Y.; Matsumoto, K. Temperature Dependence of Universal Conductance Fluctuation Due to Development of Weak Localization in Graphene. *Solid State Communications* **2017**, *267*, 14–17.
- (2) ◎▲Mitsuno, T.; Taniguchi, Y.; *Ohno, Y.; Nagase, M. Ion Sensitivity of Large-Area Epitaxial Graphene Film on SiC Substrate. *Appl. Phys. Lett.* **2017**, *111*, 213103.
- (3) ◎▲Lin, C.-L.; Arafune, R.; (11 名), *Takagi, N. Visualizing Type-II Weyl Points in Tungsten DiteLLuride by Quasiparticle Interference. *ACS Nano* **2017**, *11*, 11459–11465.
- (4) ◎▲*Mishra, P.; Qi, Z. K.; Oka, H.; Nakamura, K.; *Komeda, T. Spatially Resolved Magnetic Anisotropy of Cobalt Nanostructures on the Au(111) Surface. *Nano Lett.* **2017**, *17*, 5843–5847.
- (5) ◎▲Ishida, H.; Liebsch, A.; Wortmann, D. Topological Invariants of Band Insulators Derived from the Local-Orbital Based Embedding Potential. *Phys. Rev. B* **2017**, *96*, 125413.
- (6) ◎▲Hiraoka, R.; *Minamitani, E.; Arafune, R.; Tsukahara, N.; Watanabe, S.; Kawai, M.; *Takagi, N. Single-Molecule Quantum Dot as a Kondo Simulator. *Nature Communications* **2017**, *8*, 16012.

公募班

- (1) ▲Usuki, T.; Shimada, M.; Yamanoi, Y.; Ohto, T.; Tada, H.; Kasai, H.; Nishibori, E.; *Nishihara, H. Aggregation-Induced Emission Enhancement from Disilane-Bridged Donor–Acceptor–Donor Luminogens Based on the Triarylamine Functionality. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2018**, *10*, 12164–12172.
- (2) ◎▲Okada, M.; (11 名) *Kitaura, R. Direct and Indirect Interlayer Excitons in a van der Waals Heterostructure of hBN/WS₂/MoS₂/hBN. *ACS Nano* **2018**, *12*, 2498–2505.
- (3) ▲Tsuneyasu, S.; Takahashi, R.; Minami, H.; Nakamura, K.; *Kobayashi, N. Ultrafast Response in AC-Driven Electrochemiluminescent Cell Using Electrochemically Active DNA/Ru(Bpy)₃²⁺ Hybrid Film with Mesoscopic Structures. *Scientific Reports* **2017**, *7*, 8525.
- (4) ◎▲Kitaguchi, Y.; Habuka, S.; *Okuyama, H.; Hatta, S.; Aruga, T.; *Frederiksen, T.; Paulsson, M.; Ueba, H. Controlling Single-Molecule Junction Conductance by Molecular Interactions. *Scientific Reports* **2015**, *5*, 11796.
- (5) ◎▲Wu, F.; Liu, J.; Mishra, P.; *Komeda, T.; Mack, J.; Chang, Y.; Kobayashi, N.; *Shen, Z. Modulation of the Molecular Spintronic Properties of Adsorbed Copper Corroles. *Nat Commun* **2015**, *6*, 7547.

A03

計画

- (1) ◎▲*Yamada, T. K.; Fukuda, H.; Fujiwara, T.; Liu, P.; Nakamura, K.; Kasai, S.; Parga, A. L. V. de; Tanaka, H. Energy Gap Opening by Crossing Drop Cast Single-Layer Graphene Nanoribbons. *Nanotechnology* **2018**, *29*, 315705.
- (2) *Hirahara, T.; (17 名), Hasegawa, S.; Chulkov, E.V. Large-Gap Magnetic Topological Heterostructure Formed by Subsurface Incorporation of a Ferromagnetic Layer. *Nano Lett.* **2017**, *17*, 3493–3500.
- (3) ▲*Chen, P.; Pai, W. W.; Chan, Y.-H.; Takayama, A.; Xu, C.-Z.; Karn, A.; Hasegawa, S.; Chou, M. Y.; Mo, S.-K.; Fedorov, A.-V.; et al. Emergence of Charge Density Waves and a Pseudogap in Single-Layer TiTe₂. *Nature Communications* **2017**, *8*, 516.
- (4) ◎▲*Bürkle, M.; Xiang, L.; Li, G.; Rostamian, A.; Hines, T.; Guo, S.; Zhou, G.; *Tao, N.; *Asai, Y. The Orbital Selection Rule for Molecular Conductance as Manifested in Tetraphenyl-Based Molecular Junctions. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 2989–2993.

- (5) ©Li, Y.; Xiang, L.; Palma, J. L.; Asai, Y.; *Tao, N. Thermoelectric Effect and Its Dependence on Molecular Length and Sequence in Single DNA Molecules. *Nature Communications* **2016**, *7*, 11294.
- (6) ©▲*Ichinokura, S.; Sugawara, K.; Takayama, A.; Takahashi, T.; Hasegawa, S. Superconducting Calcium-Intercalated Bilayer Graphene. *ACS Nano* **2016**, *10*, 2761–2765.
- (7) ©▲Lee, S. K.; Buerkle, M.; Yamada, R.; *Asai, Y.; *Tada, H. Thermoelectricity at the Molecular Scale: A Large Seebeck Effect in Endohedral Metallofullerenes. *Nanoscale* **2015**, *7*, 20497–20502.
- (8) ©▲*Tanaka, H.; Arima, R.; Fukumori, M.; Tanaka, D.; Negishi, R.; Kobayashi, Y.; Kasai, S.; Yamada, T. K.; Ogawa, T. Method for Controlling Electrical Properties of Single-Layer Graphene Nanoribbons via Adsorbed Planar Molecular Nanoparticles. *Scientific Reports* **2015**, *5*, 12341.

公募班

- (1) Oohora, K.; Meichin, H.; Zhao, L.; Wolf, M. W.; Nakayama, A.; Hasegawa, J.; *Lehnert, N.; *Hayashi, T. Catalytic Cyclopropanation by Myoglobin Reconstituted with Iron Porphycene: Acceleration of Catalysis Due to Rapid Formation of the Carbene Species. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 17265–17268.
- (2) ©▲*Naitoh, Y.; Albrecht, K.; Wei, Q.; Yamamoto, K.; Shima, H.; Ishida, T. Fabrication of Sub-1 Nm Gap Electrodes Using Metal-Mask Patterning and Conductivity Measurements of Molecules in Nanoscale Spaces. *RSC Adv.* **2017**, *7*, 53503–53508.
- (3) ©▲*Minamitani, E.; Arafune, R.; Frederiksen, T.; Suzuki, T.; Shahed, S. M. F.; Kobayashi, T.; Endo, N.; Fukidome, H.; Watanabe, S.; *Komeda, T. Atomic-Scale Characterization of the Interfacial Phonon in Graphene/SiC. *Phys. Rev. B* **2017**, *96*, 155431.
- (4) ▲*Onoda, J.; Ondráček, M.; Jelínek, P.; Sugimoto, Y. Electronegativity Determination of Individual Surface Atoms by Atomic Force Microscopy. *Nature Communications* **2017**, *8*, 15155.
- (5) ▲Sakaguchi, R.; Song, S.; Kojima, T.; Nakae, T. Homochiral Polymerization-Driven Selective Growth of Graphene Nanoribbons. *Nature Chemistry* **2017**, *9*, 57–63.

A04

- (1) ▲*Tanibata, A.; Schmid, A.; Takamaeda-Yamazaki, S.; Ikebe, M.; Motomura, M.; Asai, T. Protocomputing Architecture over a Digital Medium Aiming at Real-Time Video Processing, *Complexity*, **2018**, 2018, 3618621.
- (2) ▲Usami, Y.; Otsuka, Y.; Naitoh, Y.; *Matsumoto, T. Conjugated Electrical Properties of Au Nanoparticle–polyaniline Network. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2017**, *56*, 128001.
- (3) ©▲Setiadi, A.; Fujii, H.; Kasai, S.; Yamashita, K.; Ogawa, T.; Ikuta, T.; Kanai, Y.; Matsumoto, K.; Kuwahara, Y.; *Akai-Kasaya, M. Room-Temperature Discrete-Charge-Fluctuation Dynamics of a Single Molecule Adsorbed on a Carbon Nanotube. *Nanoscale* **2017**, *9*, 10674–10683.
- (4) ▲Usami, Y.; Imamura, K.; Akai, T.; Che, D.-C.; Ohoyama, H.; Kobayashi, H.; *Matsumoto, T. Intra-Grain Conduction of Self-Doped Polyaniline. *Journal of Applied Physics* **2016**, *120*, 084308.
- (5) ▲Sato, M.; Yin, X.; Kuroda, R.; *Kasai, S. Detection of Discrete Surface Charge Dynamics in GaAs-Based Nanowire through Metal-Tip-Induced Current Fluctuation. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2015**, *55*, 02BD01.
- (6) ▲Abe, Y.; Kuroda, R.; Ying, X.; Sato, M.; Tanaka, T.; *Kasai, S. Structural Parameter Dependence of Directed Current Generation in GaAs Nanowire-Based Electron Brownian Ratchet Devices. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2015**, *54*, 06FG02.

公募班

- (1) ©▲*Yoshida, Y.; Tango, S.; Isomura, K.; Nakamura, Y.; Kishida, H.; Koretsune, T.; Sakata, M.; Nakano, Y.; Yamochi, H.; Saito, G. Charge-Transfer Complexes Based on C_{2v}-Symmetric Benzo[Ghi]Perylene: Comparison of Their Dynamic and Electronic Properties with Those of D_{6h}-Symmetric Coronene. *Mater. Chem. Front.* **2018**, *2*, 1165–1174.
- (2) Shigeoka, Y.; Tsuruoka, T.; *Hasegawa, T. The Rate Limiting Process and Its Activation Energy in the Forming Process of a Cu/Ta₂O₅/Pt Gapless-Type Atomic Switch. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2018**, *57*, 035202.
- (3) ▲Fujii, H.; Setiadi, A.; Kuwahara, Y.; *Akai-Kasaya, M. Single Walled Carbon Nanotube-Based Stochastic Resonance Device with Molecular Self-Noise Source. *Appl. Phys. Lett.* **2017**, *111*, 133501.
- (4) ▲Anzai, H.; (11 名); *Yanagida, T. True Vapor–Liquid–Solid Process Suppresses Unintentional Carrier Doping of Single Crystalline Metal Oxide Nanowires. *Nano Lett.* **2017**, *17*, 4698–4705.

【ホームページ】 <http://www.molarch.jp/>

本新学術領域発足当初の平成 25 年 9 月より立ち上げた。領域会議や国際シンポジウム専用ホームページを容易に派生させることができ、また、データの追加、修正は事務員の方でもできるようわかりやすいシステムを立ち上げ、事務局が管理し円滑に運営を進めた。ホームページでは、各研究項目の研究概要のグラフィカルアブストラクトに加え、構成メンバー全員の顔写真を掲載し、研究内容と研究者の「見える化」を図った（図 17）。成果を広く一般に公開するため、ニュースレターおよび年次報告書の PDF ファイルをダウンロード可能とした。より迅速かつ効果的な情報交換を実現するため、領域メンバー自身が、出版論文・研究会のお知らせ・人事公募などの情報を随時入力することを可能とし、更新情報は自動的にメール配信される仕組みとした。入力された出版論文情報は、班ごと、研究者ごとにそれぞれ自動で集計して表示され、情報整理の作業量を軽減するとともにアクティビティを維持する一助となった。

過去の領域会議の資料や共同研究に利用可能な装置リストなどを、領域メンバーのみが閲覧可能なページに掲載するなど、領域に関連する情報の集約と効率的な運用が可能となった。



図 17. 研究課題のグラフィカルアブストラクト（左）、メンバーリスト（中）、各研究者の個別情報（右）。

【ニュースレター】領域終了までに 12 報、**英文にて作成**した。領域の最新の研究成果に加え、博士課程の学生を含めた**若手研究者**を**分子建築士 (Molecular Architects)**として紹介し、最新の結果を執筆していただき、若手育成およびプロモーション活動の一助とした。電子版を web に公開するとともに、国内 484 名（191 研究機関）、海外 84 名（16 国 58 研究機関）の関連研究者に個別に電子配信し、効果的な国際的情報発信を行った。

【シンポジウム・会議等】領域メンバーが主催した関連研究会は、全期間を通じて大小 109 件、うち 18 件が海外で開催した国際シンポジウムである。

本領域では、一般への成果公開の場として、領域外の研究者や企業からの発表も広く募ることができるよう、「**分子アーキテクトニクス研究会**」と共催の研究会を 5 回開催した。分子アーキテクトニクス研究会は、平成 25 年から 3 年間は日本化学会の研究会としても認められ、その運営メンバーの半数は領域外の研究者で構成することとした。研究会と共催として発表の場を持つことで、領域外の研究者との積極的な交流を図ることができるとともに、**領域外研究者の評価**も受けることとなり領域内研究者に**一定の緊張感**が生まれた。領域終了後も、関連分野の研究交流の場として、本研究会は継続する。こうした研究会活動を残せたことは大きな資産である。

主として、物理系の新学術領域で構成される**物性科学領域横断研究会**に参画し、また、化学系の**4 領域合同会議を発足させる**など、**異分野の研究者間のネットワーク**を作り、相互理解と共同研究の活

表 2. 分子アーキテクトニクス研究会における発表件数。

開催時期	口頭発表	ポスター発表	招待・依頼講演者
H25/10 (領域キックオフ)	13		
H26/03	13	47	3
H26/11	10	51	3
H27/10	14	51	3
H28/10	15	51	4
H29/12	15	39	4

性化につなげた。これらの研究会への参加旅費は、総括班から支給し、学生の積極的な参加も促し、若手育成の一助とした。

【アウトリーチ活動】本領域に関係する研究者は、活動期間全体で合計162件のアウトリーチ活動（広報誌 2、一般向け講演 25、高校生向け一日授業・体験授業 70、イベント参加・出展 43）を行った。代表的なものを表3に記した。大阪大学で行った「光るサンドイッチ」の作製では、化学未来館白川英樹先生監修の有機EL素子の作製を実習し、サイズのナノ化や究極の単分子ELの可能性、界面の重要性を教示することで、分子アーキテクトゥクス的一端を広報するとともに、進路選択や学習意欲の向上に貢献した。

表3. 代表的なアウトリーチ活動。

日付	場所	イベント名	対象者
2017/6/3	大阪大学豊中キャンパス	理系進学を考えているあなたへ。のぞいてみよう！ 理系女子の「いま」—SciTech Girls in Handai—	高校生
毎年5月、11月	大阪大学	大学祭オープンラボ 実習:「有機EL テレビの素子を作ってみよう」	小学生～一般
2016/10/2	サッポロファクトリー	キッズフォレスト 2016	小・中・高向け
2014/11/1	大阪大学	Saturday Afternoon Physics 10周年特別企画	高校生
2014/8/30	東京大学	日比谷高校 SSH 高大連携プログラム「ケミカルデバイス～分子の積み木細工で光や電子を操る～」	SSH

【新聞・雑誌・テレビ掲載】領域メンバーの研究成果および活動に関し、新聞・雑誌・テレビ報道が合計52件にのぼり、一般社会からも注目を集めている。代用的なものを表4に示している。

表4. 主な報道発表。

	報道機関	タイトル
2018/4/5	Phys. Org.	Why Noise can Enhance Sensitivity to Weak Signals (A04 葛西)
2017/7/11	Sciencenews!	Signature analysis of single molecules using their noise signals (A04 赤井)
2015/4/3	化学工業日報	「金属錯体ナノシート 光電変換機能確認」(A01 西原)
2015/2/1	BS フジ ガリレオX	「スゴイ！和紙の底力 1300年の伝統技術とその可能性」(A04 大矢)
2014/7	ハミングヘッズ(雑誌)	「記憶装置の歴史」(A03 山田)
2014/4/9	日刊工業新聞	「グラフェンナノリボン 合成10倍効率化」(A03 坂口)

【受賞】本学術領域の成果および人材育成のインパクトの指標の一つとして、主な受賞を表5に記す。全体で、169件の受賞があった。うち国際的な賞は30件、若手研究者 27件、学生128件と若手のアクティビティの高さを示した。

表5. 主な受賞。

賞名	対象者
第7回井上リサーチアワード(2015)	A03 高山あかり(東京大学)
The Heinrich Rohrer Medal (Rising Medal) (2014)	A03 杉本宜昭(大阪大-現東京大)
第3回新化学技術研究奨励賞(2014)	A01 坂本良太(愛媛大)
丸山記念研究奨励賞(2014)	A01 奥島鉄雄(愛媛大)
日本化学会 学術賞(2018)	A01 寺尾潤(東京大)

【教科書】教科書 Molecular Architectonics(Springer)を出版し、日本化学会 CSJ カレントレビューを編集中心である。

7. 研究組織（公募研究を含む。）と各研究項目の連携状況（2 ページ以内）

領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、総括班研究課題の活動状況も含め、どのように研究組織間の連携や計画研究と公募研究の調和を図ってきたか、組織図や図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

【研究項目と研究組織の概要および連携方針】

本領域研究では、**異分野の研究者チームが密接に相互作用しながら研究を進めることが必須**であった。図 18 に、領域の研究目標を達成するために設定された研究項目の役割と関係を示す。A01 班は、計測の材料となる分子の開発を、A02 班は、電極と分子の結合方法や結合によって生じる電子状態を明らかにすること、A03 班は、単分子素子としての機能を明らかにすること、A04 班は、単分子素子の機能を活用する新たな適用分野を開拓することを目的とした。

【各研究項目の連携状況】

図 19 に、総括班で行った共同研究を促す取り組みのスキームを示す。

- (1) 領域全体会議の資料（非公開）に、「独力で解決できない問題点」を記述する項目を作り各研究グループの**ニーズ**を明らかにした。
- (2) 各研究室が共同研究に提供可能な、設備・材料・ノウハウをまとめた「**共同研究リソースシート**」を作成し、**シーズ**を明らかにした。
- (3) シーズとニーズをうまくマッチングさせて、研究をコーディネートするため、総括班内に**共同研究促進委員会**を設けた。
- (4) 学生を含む領域メンバー全員が利用可能な Web 会議システムを導入することで打合せにかかる移動時間と費用を削減した。
- (5) 研究打ち合わせや共同研究時および成果発表に必要な学生の旅費を総括班経費より捻出した。

この結果行われた共同研究のネットワーク図（図 20）および、共同研究の数（表 1）をみると、公募班を含め班間の共同研究ネットワークが張り巡らされたことがわかる。とくに、A01-A02 および A01-A03 の間の関係が目立ち、**分子の合成と計測・理論計算という研究のループが期待通りに機能**したことを示している。論文や学会などですでに成果を発表済みの共同研究が 112 件、発表には至っていないが進行中のものが 96 件、領域終了後も進行予定のものは 19 件で、合計 227 件に達した。

異分野間の用語の調整をおこなうための**機能分類表と体系化シート**の作成（p. 13, 図 10）、および、**大局的な目的の共有**のための、情報処理分野における分子素子の位置づけを示した**俯瞰図**（p. 14, 図 11）の作成、さらには、**若手の会**を中心とした基礎知識の共有と実習を通じた**障壁の排除**と**人的交流**により、最終的に 156 件の班間共同研究、71 件の班内共同研究が順調に進んだ（p. 15, 表 1）。共同研究にかかる旅費および設備使用料は、総括班から支援した。共同研究は、単なるサンプルの提供にとどまらず、有機合成を行った学生が計測の手ほどきを受け、実際に測定を行ったり、これまで素子作製の経験が全くない合成の研究者が素子化を視野に入れた研究テーマを展開したりするなど、**異分野にまたがる人材育成と研究領域の融合**に着実に結びついた。

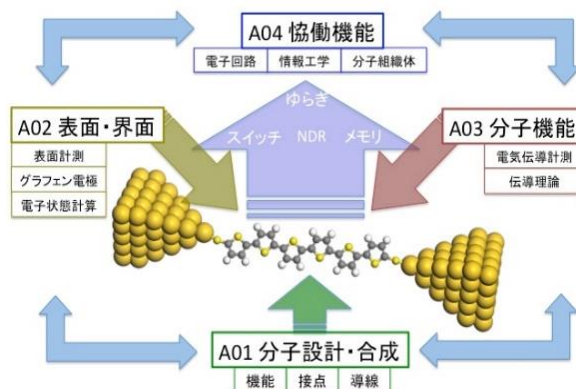


図 18. 研究項目の役割と関係。

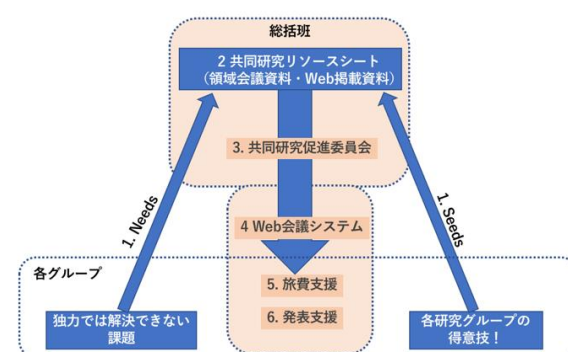


図 19. 総括班による連携促進スキーム。

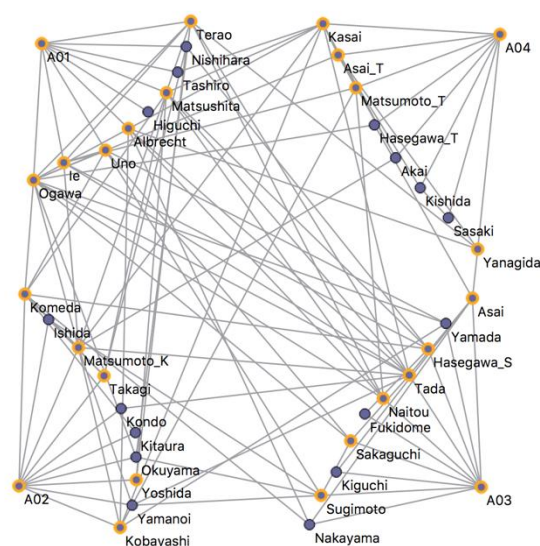


図 20. 共同研究ネットワーク。黄色枠は 5 グループ以上と連携しているグループ。

公募研究の選考には、班内および班間の共同研究による成果創出の実現性も考慮した。公募研究開始時は、領域代表が各研究機関を訪問し、領域の目標を改めて説明するとともに、公募研究者の研究ソースを把握し、具体的な共同研究の可能性を指摘するなど、共同研究の戦略的・積極的な立案を行なった。公募班の関係する共同研究のうち、学会あるいは論文で成果が発表されたものは、49件である。以下に公募班の参加によって研究が加速した例を示す。

(1) A04班公募班の赤井グループは、ナノ材料の電気伝導度特性を専門とし、新しい演算素子・メモリー素子の実現にも強い興味を持っていた。A04班葛西の発見した「半導体ナノワイヤーのノイズ発現」に強い刺激を受け、葛西と共同で、カーボンナノチューブ (CNT) 素子におけるのノイズ発現と確立共鳴素子への応用に関する研究を遂行した。A01小川グループでは、CNTとPOMを混合させた物質層がノイズを発生することを見出していたが(図8)、その手法を応用し、様々な分子をCNTに付着させることでノイズスペクトルが分子の種類に依存することを明確にした(Nanoscale, 2017)(図21)。さらに、微細加工技術を駆使して、カーボンナノチューブの並列化を測り、自発ノイズによる確率共鳴素子の実現に成功した。CNTの取り扱いにはA02松本和グループの技術ノウハウが参考となっている。さらに、A04班浅井哲と共同で、A01小川グループで観測していたノイズの発生モデルを構築するとともに、分子系のノイズをリザーバーコンピューティングに活用する構想を得る上で重要な役割を果たした。赤井グループの参画がきっかけとなり、計画班の活動が有機的に結びついて得られた成果である。

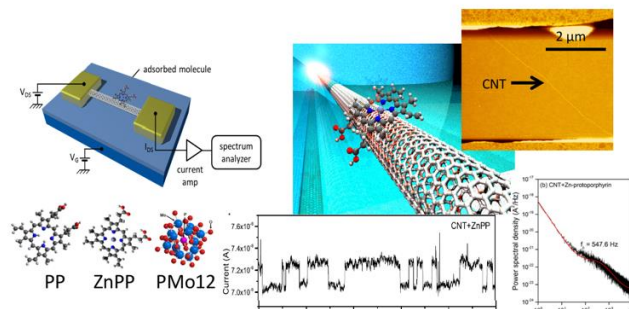


図21. 様々な分子が吸着したCNTでのノイズスペクトル測定。

(2) A01班公募班のアルブレヒトは、前半2年のみの参加で、後半は所属研究室の大型プロジェクトの関係で公募班への応募は見合わせた。引き続きいわゆる班友として、領域会合に参加いただいた。アルブレヒトグループは、分子内に双極子を持つ dendrimer の合成を専門とする。当時、A03班多田グループでは、ダイオード特性を示す分子を探索していたが、dendrimer の構成単位である双極子モーメントを持った直線型のオリゴマーが候補となりうるとの着想のもと共同研究を開始した。アルブレヒトグループは、電極に取り付けるためのアンカーをもったオリゴマーを合成し、多田グループが単分子接合の電流-電圧特性の測定を行い、整流性を確認した。さらに、多田グループで行った第一原理計算の結果から、電界による分子軌道の変形という新しい分子ダイオードの設計指針が得られた(図5)。本領域では、多彩な分子の設計・合成が行われ、その物性計測により研究が加速したが、この分子ダイオードも、アルブレヒトグループの領域目標への積極的な参加がもたらした成果である。

(3) A03班公募班の杉本は、卓越した原子間力顕微鏡 (AFM) 技術を有している。超高真空 AFM で、分子の吸着構造を調べることを最初の課題として、A01班の合成研究者との共同研究に着手していたが、宇野グループの大環状 π 電子分子を試料とした際、本来はねじれを持つ分子が、基板上で平面構造をとることと、その歪により化学構造が変化することを見出した(図4)。この結果は、分子レベルで加えられた応力によって誘起される化学反応を分子レベルで解明した単分子メカノケミストリーとしての広がりを見せている。

(4) A02班公募班の山野井グループは、シリコン表面への分子結合に関して技術ノウハウを蓄積していた。A03班多田グループでは、シリコンを電極とすることで、半導体エレクトロニクスと分子エレクトロニクスの融合がはかれると考え、シリコン上の有機自己組織化膜の作製についての研究実績を有していた。両グループが連携することで、微細加工したシリコン電極上に実際に分子膜を作製することができることが示され、新たな分子-電極結合系の実現につながった。これは両チームの連携によって達成した成果である。

「会話の数だけ研究が広がる」という意識を共有し、総括班では共同研究委員会を中心に、ソースとニーズのマッチングの機会を増やし、さらに領域の方向性を明確にすることで、共同研究の数・質の向上につながったといえる。

8. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む。）（1 ページ以内）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について記述してください（総括班における設備共用等への取組の状況を含む。）。

【共同研究リソースシートの作成】

研究費であらたに購入した設備・備品に加え、各研究室ですでに保有している物も含めた**利用可能な装置・技術、提供可能な実験試料などについて、共同研究リソースシートとして一覧表にまとめ、ホームページのメンバー専用ページで閲覧可能とすることで、設備の有効利用を促すとともに、共同研究の促進に寄与した。**

【Web 会議システム】

迅速かつ効率的な研究者間の情報交換のため、web 上でテレビ会議を行うシステムを導入した。共同研究打合せや研究会、国際会議企画運営、さらには、人事採用の際の面接など、広く活用され、**打合せにかかる負担と費用を軽減した。**

【共同研究に関わる旅費の支援と重点的配分】

総括班経費より、共同研究打合せ、および共同研究にかかる**大学院生の旅費を援助**することで、とくに公募班の**共同研究にかかる費用負担を軽減**した。さらに、とくに優れた研究成果を得た研究者には、**Pacificchem2015（平成27年12月 領域メンバーがシンポジウムを企画）への旅費を総括班経費から全額補助するなどの重点的な配分を積極的に行った。**

【購入した大型設備】

研究費で購入したおよそ 500 万円以上の装置を**表 6**に示す。共同研究など目的に使用されており、さらに、上に述べた**共同研究リソースシートに掲載**し、有効に利用された。

表 6. 研究費で購入した およそ 500 万以上の備品。

設備名	メーカー/型番など	設置場所	共同利用実績など
ナノ構造原子間力・電位計測システム	JPK nanoWizard3s / JPK	北海道大学(A04 葛西 G)	A01 小川 G のサンプル測定
微小電流-電圧評価装置	B1500A / アジレント	北海道大学 (A04 葛西 G)	A01 小川 G、A03 冨田 G のサンプル測定
分子プロセス観察用ナノサーチ顕微鏡	オリンパス・OLS4500 upgrade	北海道大学 (A04 葛西 G)	A01 小川 G のサンプル測定
極低温・スピン検出 STM STM 測定ユニット STM 冷却インサート 液体ヘリウムクライオスタット STM 用超電導磁石	ユニソク	東北大学(A02 米田 G)	A01 小川 G のサンプル測定
ベクターローテート型超電導マグネットシステム	オックスフォード	大阪大学(A03 冨田 G)	A01 小川 G と共同利用
Nd:YAG レーザーシステム	MGAIA 3W レイチャーシステムズ	大阪大学 (A03 冨田 G)	単分子計測用の電極の整形。
非平衡伝導揺らぎ計算シミュレーター	March1	産総研 (A03 浅井美 G)	単分子のゆらぎのモデリングに使用。実験グループとの共同研究で用いる。
ワークステーション	PowerEdge R910 Dell	日本大学(A02 石田 G)	A02 高木 G との共同研究で使用
周波数変調原子間力顕微鏡	島津製作所	大阪大学 (A04 松本卓 G)	単分子の観測および電気伝導度計測で A01 班と共同利用を予定

・研究費の使用状況（（１），（２），（３）を合わせて３ページ以内）

(1) 主要な物品明細(計画研究において購入した主要な物品(設備・備品等。実績報告書の「主要な物品明細書」欄に記載したもの。)について、金額の大きい順に、枠内に収まる範囲で記載してください。)

年度	品名	仕様・性能等	数量	単価(円)	金額(円)	設置(使用)研究機関
25	高分解能走査電子顕微鏡コントローラ	米国 FEI 社製 Beam Delivery	1	3,517,000	35,175,000	東京大学
	ベクターローテート型超電導マグネットシステム	オックスフォード社製・1.5K-300K	1	21,499,695	21,499,695	大阪大学
	ナノ構造原子間力・電位計測システム	JPK・Nano Wiard3s	1	12,336,458	12,336,458	北海道大学
	STM 用冷却インサート	USM-13003He-UI	1	11,946,786	11,946,786	東北大学
	LHe クライスタット	USS-10082UDW	1	6,954,101	6,954,101	東北大学
	周波数変調原子間力顕微鏡一式	島津製作所専用 SPM、アンプ、制御ユニット	1	6,480,000	6,480,000	大阪大学
	STM 用超伝導磁石	USS-10083UM	1	5,884,238	5,884,238	東北大学
	微小電流-電圧評価装置	アジレント・B1500A	1	5,700,000	5,700,000	北海道大学
	ラックサーバー	デル社・PowerEdge R910	1	5,575,500	5,575,500	日本大学
	Nd:YAG レーザーシステム	Model GAIA 3W	1	4,993,434	4,993,434	大阪大学
	STM 測定ユニット	USM-13003He-USTM	1	4,814,375	4,814,375	東北大学
	液体クロマトグラフシステム		1	4,688,145	4,688,145	愛媛大学
26	非平衡伝導揺らぎ計算シミュレータ March 1 式	PC クラスタ (1U ラックマウントサーバー x 4 ノード構成)	1	10,346,400	10,346,400	(独) 産業技術総合研究所
27	インピーダンス測定システム	Solatron 社製・MuduLabXM MTS-SYS	1	8,999,424	8,999,424	大阪大学
	分子プロセス観察用 ナノサーチ顕微鏡	オリンパス・OLS4500 upgrade	1	8,799,948	8,799,948	北海道大学
28	非平衡伝導計算シミュレータの増強増設計算ノード 8 台等		1	10,346,400	10,346,400	(独) 産業技術総合研究所

(2)計画研究における支出のうち、旅費、人件費・謝金、その他の主要なものについて、年度ごと、費目別に、金額の大きい順に使途、金額、研究上必要な理由等を具体的に記述してください。

【平成25年度】

・旅費

総括班経費 出張旅費 23名分 978,500円 大阪市中央公会堂にてキックオフミーティングのため

A02 石田グループ ユーリッヒ研究所より Juba Bouaziz 氏招へい 230,760円 共同研究のため

・人件費・謝金

A01 宇野グループ 研究員(安藤千恵)の雇用 1,915,092円 ピロール誘導体の合成のため

A02 米田グループ 学生研究補助・雇用 1,862,158円 分子表面吸着の解析のため

A02 高木グループ 研究補助員の雇用 1,651,821円 研究計画の推進のため

A04 葛西グループ 博士課程学生 RA 雇用(2名) 335,578円 デバイス試作および表面物性計測のため

・その他

A02 松本グループ 日立 S-4800 形走査電子顕微鏡 PC アップグレード 2,639,700円 研究に必要な装置の PC アップグレード

【平成26年度】

・旅費

A01 小川グループ ECS 国際学会に参加(大阪⇄オランダ交通費、日当宿泊費、参加登録費 4名分)1,701,767円 研究成果発表のため

A02 松本グループ WOCSDICE & EXMATEC に参加のための旅費(大阪⇄デルポイの交通費、日当宿泊費)1,374,050円 研究成果発表のため

総括班経費 天童学会旅費支援 22名分 1,196,830円 天童合宿会議参加支援のため

・人件費・謝金

A02 高木グループ 特任助教の雇用 6,810,195円 研究計画の推進のため

A02 米田グループ 博士研究員の雇用 6,031,504円 低温 STM の解析のため

A02 松本グループ 博士研究員の雇用 4,709,152円 研究遂行のため

A01 宇野グループ 研究員(安藤千恵)の雇用 3,701,926円 ピロール誘導体の合成のため

A03 浅井グループ 博士研究員の雇用 2,177,620円 研究遂行のため

A04 葛西グループ 博士課程学生 RA 雇用(3名) 2,516,763円 デバイス試作および表面物性計測のため

A02 宇野グループ 研究補助員(田川和成)の雇用 288,636円 文献調査、原料合成を行うため

・その他

A02 松本グループ H26 年度産研ナノテクオープンラボ利用負担金 1,280,000円 研究を行う部屋の利用料

A02 米田グループ 天童学会(参加者 94名)一式 340,200円 合宿会議会場費等

【平成27年度】

・旅費

総括班経費 IWMA2015 旅費支援 24名分 2,290,580円 分子アーキテクトニクス国際ワークショップ参加支援のため

A03 冨田グループ コロンビア大学化学科他旅費 1,026,956円 成果発表及び研究打ち合わせのため

総括班経費 Pacificchem 旅費支援 4名分 982,330円 Pacificchem 参加支援のため

・人件費・謝金

A02 高木グループ 特任助教の雇用 7,466,645円 研究計画の推進のため

A03 長谷川グループ 博士研究員の雇用 6,059,321円 4短針 STM 装置を用いた研究のため

A02 米田グループ 博士研究員の雇用 6,047,152円 低温 STM の解析のため

A03 浅井グループ 博士研究員の雇用 4,793,930円 研究遂行のため

A04 葛西グループ 博士課程学生 RA 雇用(2名) 1,355,806円 デバイス試作及び表面物性計測のため

・その他

A02 松本グループ ELS-7050 レーザーボード・イオンポンプ等交換 3,581,280 円 研究に必要な装置のメンテナンス
A02 松本グループ クリーンルーム排気ファン新設・ダクト接続工事 1,539,220 円 研究を行うクリーンルームのファンの新設工事
A02 松本グループ H27 年度産研ナノテクオープンラボ利用負担金 1,280,000 円 研究を行う部屋の利用料

【平成 28 年度】

・旅費

A02 松本グループ DRC 及び EMC の参加のための旅費（大阪⇄デラウェア大学の交通費、日当宿泊費）958,826 円 研究成果発表のため
総括班経費 春応用物理学会・日本化学会出張旅費支援 13 名分 866,418 円 学会参加支援のため
A03 多田グループ E-MRS (Warsawa) 他旅費 811,732 円 研究成果発表のため

・人件費・謝金

A02 高木グループ 特任助教の雇用 6,867,435 円 研究計画の推進のため
A03 長谷川グループ 博士研究員の雇用 6,080,489 円 4 短針 STM 装置を用いた研究のため
A02 米田グループ 博士研究員の雇用 5,727,947 円 低温 STM の解析のため
A03 浅井グループ 博士研究員の雇用 2,417,488 円 研究遂行のため
A01 宇野グループ 博士研究員 (WU Fan) の雇用 2,077,031 円 アザコロネン 2 量体の合成のため

・その他

A02 松本グループ H28 年度産研ナノテクオープンラボ利用負担金 1,280,000 円 研究を行う部屋の利用料
A01 宇野グループ 学内機器使用料(10-12 月分) 698,727 円 新規化合物の解析を行うため

【平成 29 年度】

・旅費

総括班経費 カールスルーエ国際ワークショップ旅費支援 2,381,016 円 成果発表のため
総括班経費 第 8 回若手の会旅費支援 21 名分 1,329,948 円 若手の会参加支援のため
総括班経費 6 月国際ワークショップ招へい旅費 21 名分 938,298 円 招へいと参加支援のため
総括班経費 3 月国際ワークショップ旅費支援 7 名分 891,774 円 招へいと参加支援のため

・人件費・謝金

A02 高木グループ 特任助教の雇用 7,271,493 円 研究計画の推進のため
A03 山田グループ 特任講師の雇用 6,840,226 円 研究計画の推進のため
A03 長谷川グループ 博士研究員の雇用 6,218,885 円 4 短針 STM 装置を用いた研究のため
A01 宇野グループ 博士研究員 (Wu Fan) の雇用 4,266,129 円 アザコロネン 2 量体の合成のため
A02 米田グループ 博士研究員の雇用 3,202,728 円 低温 STM の解析のため

・その他

A02 松本グループ H29 年度産研ナノテクオープンラボ利用負担金 1,280,000 円 研究を行う部屋の利用料
A02 石田グループ Physical Review Materials 投稿料 213,146 円 オープンアクセス誌掲載料

(3)最終年度(平成29年度)の研究費の繰越しを行った計画研究がある場合は、その内容を記述してください。

該当なし

9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度（1 ページ以内）

研究領域の研究成果が、当該学問分野や関連分野に与えたインパクトや波及効果などについて記述してください。

【当該学問分野への貢献度】

領域は、有機合成、表面科学、分子ナノ技術、電子工学、情報工学など広い分野の研究者が参加し、融合領域の共同研究を推進した。本領域の活動および成果は、各分野の進展と融合領域の開拓に貢献した。

- (1) まず、領域目標 4 の達成の基本概念のひとつである、確率共鳴により微小信号が超高感度検出される原理を A04 葛西が明らかにした成果 (*Phys. Rev. E* 2013, *Appl. Phys. Express.* 2018) は、専門分野のオンラインジャーナル、Phys.org(物理系)や Nanowerk.com(ナノサイエンス系)に加え、一般向けの科学オンラインジャーナル (ScienceDaily.com) でも紹介されるなど注目を集め、情報工学分野の進展に大きく貢献した。
- (2) この成果をもとに、「分子系ナノ材料を利用した分子リザーバーコンピューティング」(赤井、小川、松本^和、浅井^哲) (図 8) に向けた研究が推進され Nature Communication 誌に掲載された (2018)。この成果は、有機合成、分子ナノ技術、電子工学、情報工学の融合によってはじめてもたらされたものであり、分子を用いた新たな演算・メモリ素子につながる成果である。
- (3) これらの領域目標である「協働機能の発現」に関する成果は、学会のシンポジウムなどの中心課題として討論され、新しい分野の活性化に役立っている。まず、2015年には、香港でおこなわれた非線形科学の国際会議 NOLTA2015 (International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications) で、「Bridging research gap between molecules and information science towards stochastic computation」と題したスペシャルセッションを開催し、分子系で観察される非線形伝導現象や、ノイズの活用方法に関する議論が行われた。2017年には、金沢で行われた応用物理学会 M&BE 9 (9th International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics) で、特別セッション「Next Era Computing Contributed by M&BE」として分子系ナノ材料を用いた新しい情報処理素子実現の可能性について集中討論が行われた。
- (4) 多彩な分子の設計・合成と、それらの分子を用いた単分子接合の電子物性計測・理論計算まで完結させた研究を展開できるようになったこと、さらに、これらの結果に関して、日本化学会や応用物理学会における関連セッションや特別シンポジウムで多くの発表を行ったことは、国内に於ける分子エレクトロニクス分野の進展・普及にとって大きな貢献となった。
- (5) “Molecular Architectonics”の名称と概念は、同名を冠した国際ワークショップおよび、PacifiChem2015 での単独セッションの開催、英文教科書の出版によって国際的にも認知され始めており、2017年のヨーロッパ物質研究会 (E-MRS) においては、atomic and molecular scale systems and devices シンポジウムの Hot topics として取り上げられるなど、国内外において「分子アーキテクトニクス」という分野・名称が存在感を発揮し始めている。分子アーキテクトニクス研究会は領域終了後も継続することが決まっており、国内外の関連研究発表の場として成長することが見込まれる。

10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況（1 ページ以内）

研究領域内での若手研究者育成の取組及び参画した若手研究者（※）の研究終了後の動向等を記述してください。

※研究代表者・研究分担者・連携研究者・研究協力者として参画した若手研究者を指します。

領域内に若手育成担当を設け積極的な企画立案実施体制を構築するとともに、若手研究者（教員、研究員、学生）により「若手の会」を組織し、異種分野をつなぎ、将来の分子アーキテクトゥクス発展に寄与する人材の育成と、若手の横のつながりの強化を主眼に置いた取り組みを進めた。次世代を担う大学院生の参加意識を高めるため、天童で行われた合宿形式の領域会議への学生の参加旅費を総括班経費から支援し、ポスターセッションで学生を含む若手とシニア研究者が直接議論する場を設けた。

【若手ワークショップ】領域の全期間で、合計8回の若手ワークショップを開催した（図22）。参加旅費を総括班経費より支援し、積極的な参加を促した。第1回ワークショップ（平成26年6月13日、天童 35名）では計画・公募班研究室のほぼ全てから若手が参加し、所属研究室の研究内容・特徴的技術、共同研究の促進に資する情報をプレゼンテーションした。研究室間留学の積極的なプロモーションも行われ、共同研究促進および若手間の横のつながり形成の格好の機会となった。この若手ワークショップに参加した学生がコアメンバーとなり、第2回以降の若手ワークショップの内容を企画・運営した。外国人講師による論文執筆技術講義、電子デバイス作製・計測実習、分子アーキテクトゥクスの将来についての討論といった多彩な内容が企画され、研究者としての基本技能を向上させるとともに、新研究テーマへ取り組む際の意識障壁を取り除いた。



図22. 第8回若手ワークショップ @松山における討論の様子。

【学生主体の研究推進例】若手の会の成果として、学生主体で研究が推進された例を示す。A01 小川グループで合成を専門としていた玉木氏（博士課程学生）は、A03 冨田グループで分子接合の計測を自らの手で行うとともに、機械学習を利用した解析ソフトの開発など、独自に研究を進展させた。同氏は、本業績により博士学位を取得後、寺尾グループ（A01 公募班）の特任助教に採用された。A02 松本和グループの生田氏（博士課程学生）は、A04 葛西グループとナノ加工技術に関して主体的に情報交換し、グラフェン分子素子の作製に必要な加工技術を確立した。同氏は、本業績により博士学位を取得後、東京農工大学の助教に採用された。若手の会のコアメンバーらは現在も密に連絡を取り合っており、共同で研究費を獲得するなど、活発な活動を続けている。

【Newsletter での若手活動紹介】領域 Newsletter に若手研究者の研究活動・成果紹介記事を英語で掲載（図23）。紹介記事は若手研究者自身が執筆した。領域ホームページおよび電子メールを利用し、国内（191研究機関、484名）、国外（16カ国、58研究機関、84名）に配布した。

【留学生の受け入れ状況】本領域に関わる研究に、博士課程および博士研究員留学生 16名が参加した。領域会議や若手の会にも参加し、日本人学生との交流を深め、本分野を国際的に発展させる素地を形成した。

【受賞】若手および学生の受賞が国際会議26件、国内会議115件と、若手が活発な活動を行った。

【プロモーション】准教授より教授への昇進 3名、うち1名は、有機合成（准教授）から人工知能システム工学（教授）と異分野に活動

分野を広げた。助教より准教授への昇進 2名（若手）。ポスドクより任期なしの正職員 3名（若手外国人含む）、本領域参画グループで博士学位取得後正職員への就職7名、任期あり研究職への就職12名、と本領域の成果と研究者が高く評価されていることの現れといえる。



図23. Newsletterにおける若手紹介。

11. 総括班評価者による評価（2ページ以内）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

東京理科大学 研究推進機構総合研究 院長・教授 福山秀敏 先生

本「新学術領域研究」はそれまで研究活動の上での系統的交流がほとんどなかったと思われる有機合成・計測・電子工学・物性物理等多様な研究者グループ間の連携協働によるシナジー効果によって『単一分子の組織化と新機能発現のための新しい方法論として「分子アーキテクトゥクス（分子建築学）」の創成』を目的として発足した。このいささか「荒唐無稽」とも思われる挑戦は、領域全体での多くの検討作業を基に研究戦略の策定・共同研究の具体的推進により、分子を構成要素とするネットワーク上での非線形性とノイズに伴う電気伝導現象に見られる「確率共鳴」の物性的理解の手がかりをつかむことに結実した。この「確率共鳴」現象は神経における信号伝達の重要要素と考えられていることから「新学術創成」に向けての大きな成果であると判断する。

以下、4年半にわたりほぼすべての領域会合に出席し、領域の運営と研究の進捗を見てきたことを踏まえて、途中経過を含めより具体的に言及する。

本領域には分子合成からデバイス構築と評価、演算処理等、異質の研究要素が包含されており、そのため当初は、領域の方向性が定まらず、単なる個人研究の集合である感は否めなかった。しかし、領域代表およびA04班を中心にした、個々の研究のポテンシャルの洗い出し作業を通して、領域全体で共有すべき課題の明確化が図られ、順次一体感が生まれ、重要な成果創出に到達した。この過程は、代表者をはじめ参加研究者間の「バトル」と「共感・共鳴」の繰り返しと想像しており、きわめて印象的である。

この作業を通してまず、領域の目標である「分子接合の協働現象による機能発現」に向けて、シナプスの情報伝達システムを人工的に作製するために、合成化学と情報工学、デバイス作製・計測の研究者が持つ技術ノウハウと知見を集約し、(1)カーボンナノチューブに分子を吸着した系におけるノイズ発生の確認、(2)その並列化による確率共鳴素子の実現、さらには、(3)ネットワーク構造からの自発的パルス発生の確認、が実現された。これらは、本領域の編成なくしては得られなかった成果である。本領域では、現象の確認だけでなく、ノイズの発生機構を明らかにするとともに、情報工学の立場から、リザーバーコンピューティングへの活用も提唱されるなど、今後の展開が期待される。

本領域の明確な目標の提示と活発な共同研究の推進は、各要素技術の向上・強化にもつながっている。分子の剛直性およびアンカー部位構造のキャリア輸送に対する影響、力学的刺激による化学反応の誘起等は、分子エレクトロニクスおよび周辺分野にとって重要な成果である。

これらの共同研究を遂行する際の若手人材の育成にも工夫がみられた。たとえば、合成化学者が微細加工技術や計測技術を学ぶ機会や、計測を担当する大学院生が合成化学を学ぶ機会が用意された。その結果、大学院生や若手研究者から共同研究の提案がされるなど、分野間連携の重要性を理解した若手が成長したことは将来にとって重要な成果であるといえる。

以上、本領域はこれまでに例のないほど広い分野の研究者での共同研究により、さらに大きい研究分野への波及効果を持つ新学術開拓に貢献したと評価される。

奈良先端科学技術大学院大学 特任教授・名誉教授 村井眞二 先生

有機ELや有機太陽電池に関する研究の広がりにより、有機合成とデバイス工学の研究者が共に論文を発表することは増加しているが、どちらかが協力者的な場合が多く、欧米のよ

うに、いずれもが PI として、それぞれの専門学会で発表できるような共同研究例はまだ少ない。本領域では、単に試料のやりとりや測定依頼、計算依頼ではなく、相互の分野に「越境」して研究戦略の立案、結果の考察とフィードバックを行う共同研究の遂行により目標を達成している。特に、情報工学の分野の研究者との連携では、当初、相互に戸惑いを感じていたが、戦略会議を繰り返し、問題点とその解決方法を領域全体で共有する姿勢がみられた。こうした取り組みの結果、カーボンナノチューブとポリ酸 (POM) 分子のネットワーク構造に、電圧を印加すると自励発振的に電圧パルスが生じる現象を見出し、パルスを利用した情報処理のモデルを構築して、その原理を実証したことは、新学術領域ならではの成果である。こうした取り組みは、分野全体の研究を活性化し、整流性や負性微分抵抗の発現のための分子設計指針の導出、多様な分子と電極の接続様式の理解といった基礎的にも重要な研究成果をもたらしている。

人材育成に関しては、合成分野の若手研究者が、クリーンルームで微細加工技術を修得し、電子工学の大学院生が合成化学の研究室に2ヶ月ほど滞在するといった取り組みも行っている。若手の受賞が27件もあることは、若手が中心的な役割を果たしこの分野を牽引するまでに成長していることがうかがわれる。

領域外に「分子アーキテクニクス研究会」を発足させ、領域終了後も、「越境」研究の重要性を認識する研究者が集う場を提供したことは、重要な取り組みである。

以上より、本領域は、合成化学、表面科学、ナノ工学、情報工学の実験および理論研究者が集い、領域代表および班長のリーダーシップのもと、目標を共有して新しい学術の芽とそれを担う人材を育てた点で、新学術領域の設置目的を十分に達成したと評価される。

四国大学学長 松重和美 先生

本新学術領域は、単一分子エレクトロニクスの新たな展開として、ノイズやゆらぎの要素を取り入れて新たな情報処理に結びつけようとする挑戦的な領域であった。合成化学や表面科学の研究者に加え、電子工学や情報工学の研究者が参画した異分野融合のチームが編成され、分野間の意思疎通の難しさが懸念されたが、領域代表および班長のリーダーシップのもと、領域発足前および発足後もなんども意見交換を繰り返し、「シナプスの信号処理」をモデルとしたネットワーク設計を目標として提示し、共同研究を積極的に推進した点は高く評価される。その結果、カーボンナノチューブに吸着した分子種によりノイズスペクトルが変化することや、シナプスのようなパルス発生がおこること、さらには、自己成長するポリマー回路の実現など、興味深い成果が創出されている。私からは、領域会合等の折に触れて、基礎学理の探求はもちろんのこと、それに加えて、企業の研究者も興味を持つような分子ならではの成果の創出を期待したい旨伝えていた。本領域の成果は、分子を用いた「記憶」機能の発現に結びつくと期待され、安定性などを検討することで、企業の研究者も参画する分野に成長すると思われる。

こうした研究の背景には、非線形・非対称な電気伝導の精密な測定と制御、電極と分子の安定した接合の形成技術の確立など、要素技術の底上げが図られたことがあり、本領域およびこの分野にとって重要な資産となっている。このことは、実際に研究を実施した大学院生や若手研究者の意識の変化につながり、当初はとまどいのあった若手も5年間の期間で、それぞれが分野の垣根を下げ、共同研究の芽を自ら立案するまでに成長している。

以上より、「新学術領域」という新たな分野の創成とそれを担う人材の育成という両面において大きな成果をもたらした5年間であったと評価する。