

平成27年度 新学術領域研究（研究領域提案型）中間評価結果（所見）

研究領域名

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

研究期間

平成25年度～平成29年度

領域代表者

畠田 博一（大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授）

研究領域の概要

これまでに、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されている。そこで本領域では、精密な分子設計と電極表面構造設計を基本とし、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と構造-機能相関の解明へと展開する。そして、光・電場・磁場によるスイッチング機能を創出するとともに、精密計測の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。「分子アーキテクトニクス」には、分子を柱や梁にみたくて建築物のように組み立て、調和のとれた (orchestration) 電子・光・情報処理機能を発現させる意味をこめた。

領域代表者からの報告

1. 研究領域の目的及び意義

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くて、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。

2. 研究の進展状況及び成果の概要

単分子エレクトロニクス研究の新しい方向性として、分子アーキテクトニクスのための分子組織体の協働機能の設計・計測を担う A04 班との度重なる会合を経て、各班がイメージすべきターゲットのひとつとし

てシナプスの信号伝達システムを設定した。その要素機能は①パルス生成、②パルス伝搬、③メモリ機能である。第一段階であるパルス生成のために、非線形な電圧電流特性をもつ素子とそれらを光や電場、磁場によりスイッチング制御するための設計指針の導出が不可欠であるとの共通認識を持ち、計画班・公募班一丸となって取り組んだ。その結果、グラフェン電極への接続を意図し、ペリレンをアンカー部に持つポリチオフェンワイヤーの設計を行い、オールカーボン素子における電界効果トランジスター特性を確認した。加工性の高いグラフェンを固定電極として、構造制御可能な分子をπ平面を用いた接続を利用して架橋し、その電気特性を議論できる素子を提供できたことは、分子アーキテクニクスにとって大きな進展である。②③の機能についても、すでにシミュレーションが進んでいる A04 班と共同で単分子膜を用いた確率共鳴素子やナノワイヤメモリスタの開発が計画どおり進展している。

審査部会における所見

A (研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められる)

1. 総合所見

本研究領域は、単分子エレクトロニクスの新たな方向性の創出を目的とし、分子及び界面の精緻な設計に基づき、調和のとれた電子・光・情報処理機能の発現させる「分子アーキテクニクス」の新しい学理の構築に向けて研究が推進されている。精密分子設計・合成 (研究項目 A01)、表面・界面構造の設計・作製 (研究項目 A02)、分子機能の設計・計測 (研究項目 A03)、分子組織体の協働機能の設計・計測 (研究項目 A04) からなる4つの研究項目を設定し、物理、化学、工学にわたる広範な研究分野の研究者がこれに参画し精力的に研究を進めている。分子合成からデバイス構築と評価、演算処理を包括する構成となっており、これは従来の枠組みでは困難なもので、新学術領域研究として推進する意義は大きい。新しい研究領域を形成する取組みとしては、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、研究領域の設定目的に照らして期待どおりの進展があったと認められる。研究成果の公表状況も良好であることに加え、英文ニュースレターの作成及び電子配信、研究領域外の研究者も参加可能なシンポジウムの開催、さらにはアウトリーチ活動などを積極的に行っている点も評価できる。今後の研究計画も妥当であり、今後の更なる発展が期待される。

一方、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も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。

2. 評価の着目点ごとの所見

(1) 研究の進展状況

分子及び界面の緻密な設計に基づき、調和のとれた電子・光・情報処理機能の発現させることにより、単分子エレクトロニクス研究の新しい方向性を示すべく、本研究領域に各分野の研究者が結集して精力的に研究を進められている。設定された4つの研究項目のいずれにおいても着実に成果が上がっていることから、順調に研究が進展していると評価できる。審査結果の所見において、本研究領域の目的達成にはデバイス応用に近い分野の研究項目 A04 と他の研究項目との連携が不可欠であるとの指摘を受けたが、それを真摯に受け止め、領域代表者の強いリーダーシップの下、領域全体会議や打合せを繰り返し行い、互いの共通理解を深めるため、分子素子の特徴を明瞭にした「機能分類表」や分子素子の機能を体系化した「体系化シート」

の作成を行うなどの取組みが行われた。これまでに研究項目 A04 と他の研究項目との共同研究に基づく成果が数多く創出されたことから、その対応は十分になされ、本研究領域の発展につながられたと高く評価できる。

(2)研究成果

グラフェン電極を用いた単分子トランジスター特性計測、単一分子ダイオードの合成、単一分子負微分抵抗の発現、シリセン、グラフェンに代表される二次元原子層電極の作成と基本物性解明などで、順調に成果が得られている。また、基板表面に吸着した分子構造変化によるスピン状態変化の観測、四端子走査型トンネル顕微鏡による分子層膜の電気伝導計測、分子由来のノイズの実測やノイズ発生方式の提案などにも成功しており、本研究領域の推進につながる成果が得られている。特に、我が国に強みのある精密な分子合成から界面制御に基づいたデバイス作製とその解析が総合的に進められていることは特筆すべき事である。各研究課題における成果の公表は順調に行われており、さらにニュースレターの作成および電子配信、研究組織外の研究者も参加可能なシンポジウムの開催なども積極的に行っている点で評価できる。アウトリーチ活動についても積極的であり、特に高校生に対しては有機デバイスを作製する実習を行うなど、興味を引く活動を工夫して実施おり、この点でも大いに評価できる。

(3)研究組織

機能分類表や共同研究リソースシートなどを作成し、シーズとニーズを全体で共有し効果的に共同研究を推進しようとする体制は評価できる。これらに基づいて、上述の研究項目 A04 と他の研究項目との共同研究のみならず、様々な研究項目間で共同研究が行われている。さらに、計画研究と公募研究との間での共同研究についても積極的な展開がなされており、新学術領域研究にふさわしい研究活動が進められている。また、研究領域内に若手研究者育成担当を設けて若手ワークショップを数多く開催するなど、若手研究者の育成に積極的に取り組んでおり、その進め方は高く評価できる。

(4)研究費の使用

共同研究を進めることを念頭に本研究費で導入された設備・備品をリストアップして有効利用を促すなど適切かつ有効に研究費が活用されている。

(5)今後の研究領域の推進方策

研究領域の運営方針を明確に掲げて、それを全体で共有する姿勢が明確に打ち出されており、推進の方策は妥当であると判断できる。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ため、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。

(6)各計画研究の継続に係る経費の適切性
特に問題はない。