

領域略称名：分子アーキテクト  
領域番号：2509

平成27年度科学研究費補助金「新学術領域研究  
(研究領域提案型)」に係る中間評価報告書

「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27年6月

領域代表者 (大阪大学・基礎工学研究科・教授・冨田 博一)

# 目 次

## 研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要	6
2. 研究の進展状況	8
3. 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	12
4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	14
5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	19
6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	26
7. 若手研究者の育成に関する取組状況	28
8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	29
9. 総括班評価者による評価	30
10. 今後の研究領域の推進方策	32

## 研究組織

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	笏田 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・理学研究科・教授	3
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・理工学研究科・教授	5
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	2
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	3
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	6
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・ナノ材料研究部門・総括研究主幹	4
A03 計	25110010 機能性4探針STM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	4
A03 計	25110011 スピン偏極STM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	4
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	3
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・情報科学研究科・准教授	2
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	26110505 金属錯体 $\pi$ 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 真	東京大学・理学系研究科・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
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	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
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
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	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

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	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
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	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	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
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
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	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	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
公募研究 計18件					

# 研究領域全体に係る事項

## 1. 研究領域の目的及び概要（2 ページ程度）

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進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。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。

### ○研究の学術的背景

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 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る。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る（A03 多田・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る（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る。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る。分子の持つ $\pi$ 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る。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ト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する（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ー）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**からはじまる。「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（研究項目 A04）。

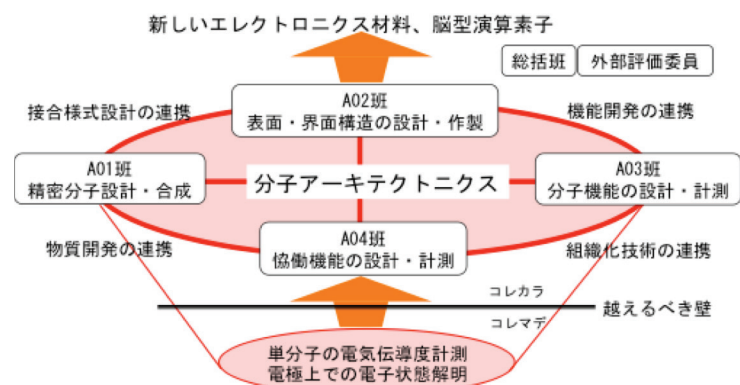


図1. 研究項目とその連携。



## 2. 研究の進展状況〔設定目的に照らし、研究項目又は計画研究ごとに整理する〕（3 ページ程度）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、現在までにどこまで研究が進展しているのか記述してください。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、どのように発展したかについて研究項目又は計画研究ごとに記述してください。

### ○何をどこまで明らかにしようとするのか

(1) 分子に対するキャリアおよびスピンの注入に関し、重要な役割を担う固体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。具体的には、金属や半導体清浄表面に加え、その上にグラフェンやカーボンナノチューブ、シリセンなどの14族ネットワークを構築し、有機分子を結合して、分子組織体を用いた信号処理の実現をめざす。これら複合界面系の電子状態を原子レベルで明らかにし、分子の接続位置および接合様式（共有結合、配位結合など）に関する指針を与える。

(2) 分子組織体を用いて信号処理を行うための要素現象として、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が考えられる。これらの機構と構造-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。また、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を導出する。電極-分子-電極システムにおいて、接続様式における注入過程に加え、分子の構造による輸送特性と外場によるその制御を試みる。

(3) これらの要素現象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う。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。

これらを実現するため、各研究項目においては、下記の研究を推進する。

#### 研究項目 A01「分子アーキテクトニクスのための精密分子設計・合成」

本研究の主役となる分子の設計、合成を担当する。整流性や負性微分抵抗、被覆導線などの基本機能を有する分子を設計・合成し、他班との共同研究によって機能を計測し、その結果をもとにさらなる構造最適化を行う。

#### 研究項目 A02「分子アーキテクトニクスのための表面・界面構造の設計・作製」

本研究項目では、金属、半導体、絶縁体の表面ならびにその上に固定した分子の電子状態を調べ、他の研究項目との連携により、分子アーキテクチャーの構築に必要な表面・界面の設計指針を導出する。

#### 研究項目 A03「分子アーキテクトニクスのための分子機能の設計・計測」

表面上に、単一分子および分子組織体を配置して、電極-分子-電極構造を基本とする分子架橋構造を作製し、キャリアおよびスピンの注入と輸送特性の計測を行って、システムの設計に反映させる。

#### 研究項目 A04「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」

分子架橋構造の電気信号に含まれる、ノイズやゆらぎを積極的に利用し、それらに誘起される多数の分子の協働現象による信号処理を設計する。

採択から現在に至るまで、各計画班さらには公募班が一丸となり、上記目標達成に向けて研究を推進した。特に、審査時にご指摘いただいた A04 班と他班との連携が不可欠とのコメントを、重要な課題と認識し、各研究項目が A04 班の目指す協奏化へつながるよう積極的に働きかけた。

連携促進のための具体的取組みとして、領域代表のリーダーシップのもと A04 班内と班間の討論を重ね、協奏化システムのターゲットを検討し、その要素機能を物性レベルまでブレークダウンした。ひとつの例として設定したシナプスの信号伝達システムにおいては、要素機能はパルス発生、伝達、メモリであり、これらは非線形、自発ダイナミクス、履歴特性から生まれている。各研究課題の中で、これら特性実現の糸口を探ることとした。以下では、本領域の発足無くしては得られなかった研究成果と進捗状況を以下に記す。

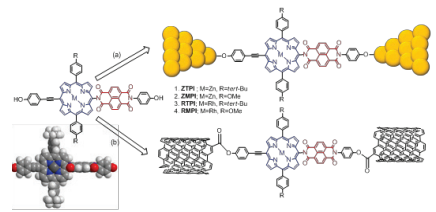
**研究項目 A01 「分子アーキテクニクスのための精密分子設計・合成」**

・小川グループでは、**図2**に示したようにポルフィリンとイミドが直交して共鳴が少ない分子ダイオードを合成し、金電極および単層カーボンナノチューブ (SWNT) に接続して、整流特性を確認した。いずれの電極でも、ポルフィリンの中心金属を変えることで整流比を制御できることを見出した (**A03 多田グループとの共同研究**)。カーボンナノチューブやグラフェンを電極として利用することは、3端子素子および集積化に有効であると期待され、SWNTを単一分子への多端子結合電極として用いることを示した意義は大きい。

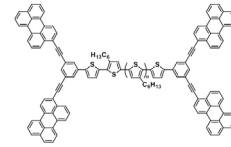
・家グループでは、そのグラフェン電極への接続を意図し、**図3**のようにペリレンをアンカー部に持つポリチオフェンワイヤーの設計を行い、**A02 松本和グループと共同**で、**図4**に示す電界効果トランジスタ特性を確認した。急峻に立ちあがる電流-電圧特性が確認され、その起源に関し、**A03 浅井美グループと共同**で解析が進んでいる。加工性の高いグラフェンを固定電極として、構造制御可能な分子をπ平面を用いた接続を利用して架橋し、その電気特性を議論できる素子を提供できたことは、分子アーキテクニクスにとって波及効果は大きい。

・宇野グループでは、高共役π電子系化合物のペリ環状反応前駆体を合成し、熱や光外部刺激に対する応答を検証した。ビシクロ[2.2.2]オクタジエンで縮環したジポルフィリン、ポルフィリン三量体や、デカピロール類、サアザコロネン類を合成し、**家グループと共同**でワイヤーとの接続を行っている。また、多種類の化合物が得られるフェナセン類に4-アミノフェニル基を導入して**小川グループと共同**で単一分子の電気特性と構造との相関を明らかにした。

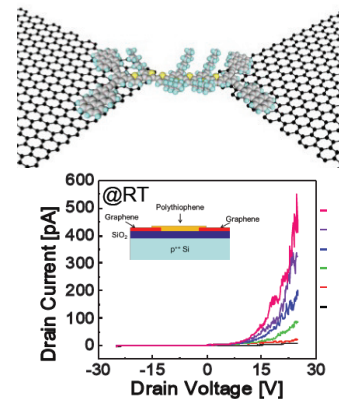
・公募班には、分子アーキテクニクスの構成要素となる分子の提供と、計測グループとの共同研究による加速度的な進展が期待できる方々に参画いただいた。実際、カゴメ格子型単分子層シート (→ネットワーク) (西原)、絶縁被覆導電性単分子ワイヤー (→配線、スイッチング) (寺尾)、ナノリング状分子 (→配線、イオン輸送) (田代)、カルバゾール dendrimer (→量子ドット) (アルブレヒト)、ラジカル分子 (→スピン輸送) (松下) などの分子が計画通りに設計・合成され、班内および班間の共同研究により、電気特性計測および電子構造解析が進んでいる。



**図2.** 分子ダイオードの CNT 電極への接続 (A01 小川)。



**図3.** グラフェン電極用アンカー付オリゴチオフェン分子 (A01 家)。

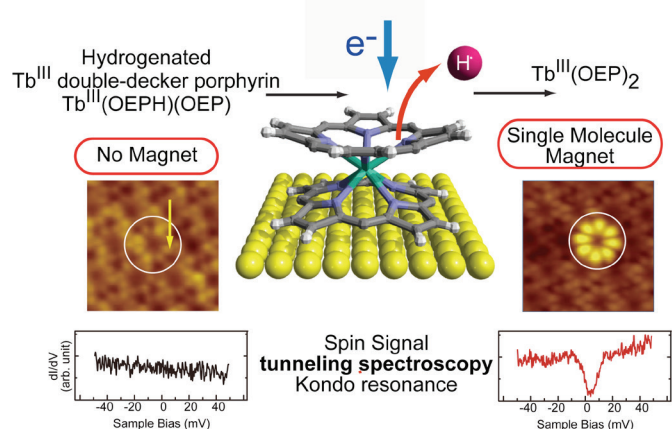


**図4.** グラフェン電極を利用した分子接合の模式図 (上) と FET 特性 (下) (A02 松本)。

**研究項目 A02 「分子アーキテクニクスのための表面・界面構造の設計・作製」**

・米田グループでは、**A01 小川グループと共同**で、水素化テルビウム・2層ポルフィリン錯体について、分子にトンネル電流を注入することで分子の原子レベルで脱水素化を生じさせるとともに、分子のスピンによって形成される近藤共鳴を検知することで、脱水素化で単一分子磁石の挙動が復活することを確認した (**図5**)。トンネル電流注入で分子の脱水素化を単一分子単位で実現することが可能であること、さらにその化学変化で、単一分子磁石の挙動を誘起できることを示した意義は大きい。

・石田グループでは、**A02 高木グループと共同**で、Embedded Green 関数法を使い Ag 電極上のシ



**図5.** 二層ポルフィリン錯体における水素脱着による分子磁性の発現 (A01 小川-A02 米田)。

リセンの電子状態計算を行った。この方法では、表面系の第一原理計算で広く用いられているスラブ模型を使わないため、Ag 電極とシリセン層の電子状態を分けることができ、シリセンの電子状態が界面相互作用で大きく変調される様子を示しており、基板あるいは電極材料として利用する際の有用な指針を導出した。

・**高木グループ**では、STM 探針を精密に操作して超伝導 STM 探針/ $C_{60}$  分子/超伝導基板からなる単分子接合を構築し、多重アンドレーフ反射 (MAR) の測定を行った (図 6)。MAR により流れる電流は、電圧に対して強い非線形性を示すため、チャンネル数と透過係数を決定することができる。 $C_{60}$  分子では、3 つの LUMO が伝導チャンネルとして働くこと、各 LUMO チャンネルの透過係数は分子の配向に強く依存することを明らかにした。この結果は、単分子デバイスの基礎的知見として重要な成果である。

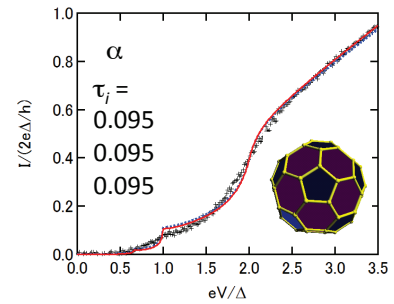


図 6. アンドレーフ反射による伝導チャンネル解析 (A02 高木)。

・**松本和グループ**では、絶縁基板上的のグラフェンシート of 作製技術

を確立した。作製したグラフェンを微細加工により数十 nm のギャップを有する電極に加工し、A01 家グループと共同で分子ワイヤーを架橋し、先に述べたように図 4 のような電界効果トランジスタ特性の計測に成功した。微細加工を用いて、並列化やネットワーク化なども可能であり、分子アーキテクトニクスにおいて果たす役割は大きい。

・公募班では、計画班でカバーできない表面-分子接合構造の構築を専門とする研究者に参画をいただいた。シリコン-分子接合 (山野井)、自己組織化分子積層膜 (近藤)、金属-磁性分子接合 (吉田)、DNA-高分子組織体 (小林)、メカニカルスイッチング構造 (奥山) を対象とする各研究は、計画通り進んでいる。

### 研究項目 A03 「分子アーキテクトニクスのための分子機能の設計・計測」

・**浅井美グループ**では、分子素子中の電流揺らぎに対する電極フォノンと練成した分子振動 (フォノン) の影響を理論的に調べた。特に低温における電流に対するショットノイズが電子・フォノン散乱の影響でどのように振る舞うかに関してフォノンの非平衡性を含めて精密に調べ、フォノンによるショットノイズに対する補正が電子の伝導ダイナミクスに強く依存する事と、その詳細を明らかにした。また、電気特性の非線形性の例としてハフニウム酸化物中のメモリスタ機能を取り上げ、フィラメントの密度では無く相対位置がメモリ相互作用に重要である事を見出した。分子素子の示す整流性について以前行った研究を拡充し機構の理解を深めた。これらの結果は、A03 および A04 の研究課題を俯瞰する重要な指針となっている。

・**多田グループ**では、極低温でのブレイクジャンクション法を確立し、振動構造の解析を行って分子の架橋構造に関する議論を可能にした。A01 小川グループおよび家グループ、公募班アルブレヒトグループ、山野井グループと共同で分子の電気伝導度計測を行うとともに、熱起電力測定によりキャリア種別を判定し、A03 浅井美グループと電子構造に関する議論を深めた。また、A04 葛西グループと共同で、単一分子自己組織化膜の非線形伝導と確率共鳴現象の発現を確認し(図 7)、素子の設計指針を導出した。

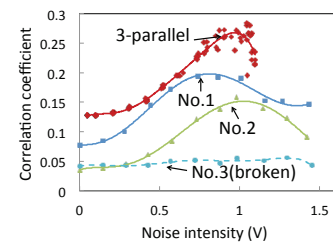
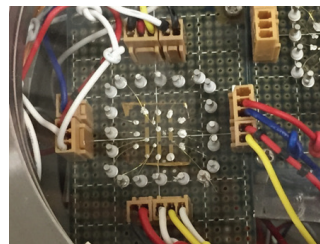


図 7. 単分子膜によるトンネル素子アレイ (左) と、確率共鳴を示すノイズ強度に対する入出力相関 (A03 多田-A04 葛西)。

・**長谷川修グループ**では、独立駆動 4 探針 STM に SEM を取り付け分解能の向上を図った。試料として、A01 西原グループのカゴメ格子型単分子層シートを対象とし、電気伝導度を計測することに成功した (図 8)。さらに、A01 家グループのポリチオフェン分子を対象とし、電子線照射による電気伝導度の向上を確認している。この技術は、図 4 のグラフェン-分子システムや図 2 のカーボンナノチューブ-分子システムの電気特性計測に重要な役割を果たす。



・山田グループでは、STM による原子操作で、フタロシアニンの中心金属を人工的に挿入し、電子構造が変化することを見出している。この結果は、A01 小川グループの研究や、A02 米田グループの研究と密接に関連する。

・公募班は、研究項目 A02 から、A03、A04 へ連携することを意識した布陣となっている。グラフェン分子細線の作製（坂口）、AFM を用いたシリコン分子接合とナノスイッチの作製（杉本）、単一分子接合の構造ゆらぎの理論的考察（中山）、分子系抵抗変化型メモリー素子の作製（内藤）の各研究は、計画通り進展している。

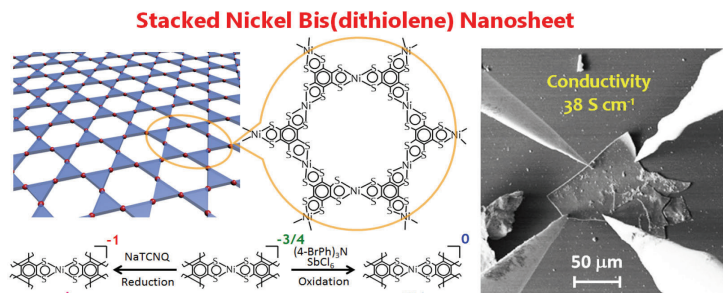


図8. カゴメ格子単分子シート（左）と、4 探針 STM による電気伝導度計測（右）（A03 長谷川修-A01 西原）。

### 研究項目 A04 「分子アーキテクチャのための分子組織体の協働機能の設計・計測」

・葛西グループでは、GaAs ナノワイヤに金属 AFM 探針を接触させるとナノワイヤ電流にランダムテレグラフシグナル雑音が誘起されることを実験と理論の両方により確認した（図9）。この手法は、ナノワイヤ上の単一分子の電荷状態の検出に適用できる。また、A01 小川グループと共同で、グラフェンナノリボンを用いた3分岐接合デバイスを構築し、3分岐接合に特徴的な非線形特性が発現することを確認した。

・浅井哲グループでは、A01 班を中心に、領域を持つ「素材」を生かした単一分子素子を用いた回路設計を中心に研究を推進した。雑音環境下で生物的情報処理・ドミノ演算を行なう単一電子回路を設計し、シミュレーションによりその動作を示すことや、A01 小川グループと共同で増幅作用を持つ分子素子についての模索、A04 公募赤井グループと共同で高伝導ポリマーを利用した脳型軸索（アナログメモリ）素子と、その学習制御回路の設計に取り組んだ。これらは、領域全体の体系化マップの作成につながり、今後の領域の研究指針となる。

・松本卓グループでは、DNA ネットワーク中にシトクロム c 3などを埋め込んだ系の電気伝導度特性を計測することで核酸塩基の違いにより生じる構造的な違い、すなわちネットワークの絡み合いの程度が異なることを見出した。また、こうしたネットワークへの外部ノイズの印加あるいは内部熱ゆらぎを利用した確率共鳴現象を確認した。これは、分子アーキテクチャでめざすネットワーク型システムの構築指針のひとつとなる。

・公募班では、分子を用いた新しい形の演算素子への研究を牽引する研究者に参画いただいた。サイリスタ機能（岸田）、原子スイッチ（長谷川剛）、原子-分子ヘテロナノワイヤ（柳田）、確率共鳴素子（赤井）の各研究は、順調に進展し、その概念は領域内のメンバーの研究方向を考える上でよい刺激となっている。特に、赤井は、カーボンナノチューブに電荷トラップを付加することで内部ノイズ源として動作することを実証した。この手法は、A01 班や A02、A03 班にフィードバックすることにより、分子素子におけるノイズ発生方法とその特性制御につながる。

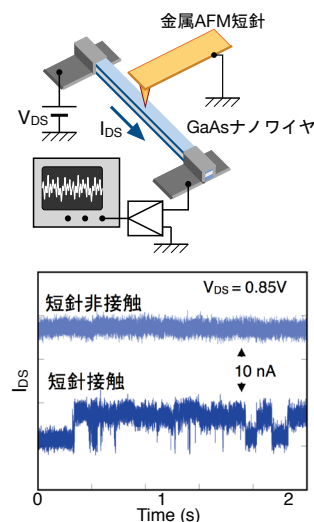


図9. AFM 探針の接触による電荷トラップとノイズ波形の観測。上図：実験配置、下図：電流ノイズ計測結果（A04 葛西）。



### 3. 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（2 ページ程度）

審査結果の所見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。

「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。」とのコメントを頂いている。

A04 班は、集積回路工学など電子システムを中心とする研究者から構成されており、分子素子あるいは分子回路の特徴を分析し、分子アーキテクニクスに適した応用分野を明らかにして、そこに合わせた回路をデザインする役目を担っている。A01、A02、A03 班との相互理解が重要であることは立案時からの共通の認識であり、その克服は新学術の創成につながるとの信念のもと、立案時から現在に至るまで、領域全体会議での議論に加え、他班との会議や打ち合わせを繰り返し行った。その結果、まずは、目標となる機能として設定したシナプスの信号処理を題材として、その中に内在する電気特性の実現について検討するとともに、それにとどまることなく、広く波及する成果の導出のため、分子素子デバイス特性表の作成を行うとともに、A04 班と他班との共同研究を立案・調整し、強固で継続的な連携体制を確立し、具体的な成果を得つつある。

#### 【分子素子デバイス特性表の作成】

相互理解のためには、分子や分子素子の持つ特徴を、回路設計の言葉に翻訳する重要性を認識し、回路設計の立場から分子素子においてどのような機能が利用できるのかを明らかにする機能分類表の作成を試みることとなった（図 10）。まず、A04 班班長の葛西が素案を作製し、比較的分野が近い A04 班のメンバーや、A03 班のメンバーの意見を参考にしながら、化学の言葉により近い項目を設定した「体系化シート」により情報収集を行った。すべてのグループから集められた情報を元にデバイス設計の立場から見た機能分類を行うことで、分子素子のもつ機能体系が明らかされた。また、体系化表を契機として、それまで素子特性としては強く意識していなかった履歴現象などに改めて注目した研究例の報告が幾つかなされた。

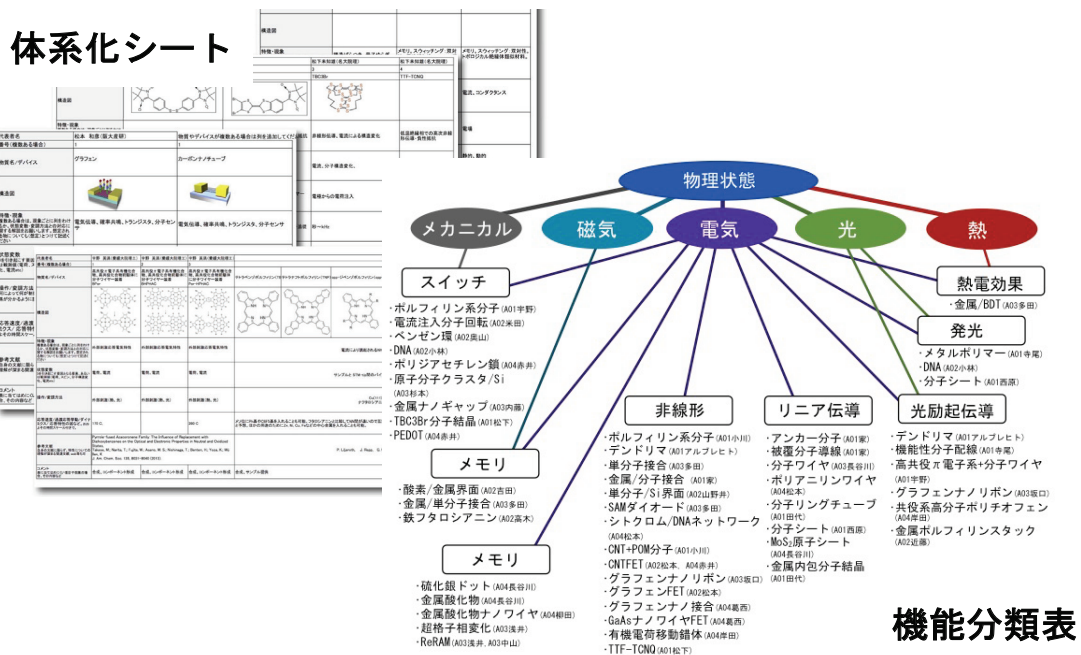


図 10. 領域で作成した体系化シートと機能分類表。

### 【班間共同研究の実施】

上記のような準備を経て、A04 班と他の班の間では、学会発表 2 件、特許 1 件に加え、現在 11 件の共同研究が推進されている（表 1）。この中には、お互いの研究領域の歩み寄りに依る相乗効果が生み出されている例が見受けられる。

A03 多田グループは、安定に利用できる単分子膜によるトンネル素子を作製し、A04 葛西グループの協力の下、分子素子応用の有力候補に設定している確率共鳴に応用できることを明らかにした。さらに、単分子膜素子の詳細な挙動を葛西グループが評価し、特定の条件でシナプスの信号伝達システムのパルス発生器能に利用できる可能性があるスパイク様ノイズを発生することを新たに見出した。

A01 小川グループはカーボンナノチューブと分子の複合体に電圧を印加した際に電圧スパイクが発生することを見出した。A04 浅井哲グループは個々の単分子接合の特性と集団的スパイク発生の関係を表す等価回路モデルを構築し、単分子接合が示す負性微分抵抗が重要であることを明らかにした（特許出願：田中 啓文，小川 琢治，浅井 哲也，“分子電気素子，”特願 2013-179578 2013 年 8 月 30 日）。その後、パルス発生などに利用できる他の素子特性や回路についての議論を重ねながら、分子設計と計測が行われている。

その他、A04 班からは、分子による電荷トラップを利用したノイズ発生など分子合成や単分子物性計測の視点からは気づきにくい多くの興味深い事例が報告され、今後、分子設計および精密計測へのフィードバックと体系化へとつないでゆく体制が整いつつある。

表 1. A04 班とその他の班との共同研究

A04メンバー	共同研究先	状況	研究題目
A04 葛西	A01 小川	進行中	グラフェンナノリボン(GNR)接合デバイスの試作評価
A04 葛西	A01 田代	進行中	超分子ナノファイバーで架橋された電極の作成とその特性評価
A04 葛西	A02 松本和	進行中	分子センシングに向けたCNTFETでの確率共鳴の発現
A04 葛西	A03 多田	進行中	単分子膜素子の評価解析
A04 松本卓	A01 家	進行中	グラファイト電極上における単分子の電流電圧特性の測定
A04 松本卓	A01 家	学会発表 (2015)	有機太陽電池薄膜における電荷分布の微細構造、荒木健人、家裕隆、安蘇芳雄、松本卓也（日本化学会 95春）
A04 松本卓	A01 家	学会発表 (2014)	周波数変調静電気力画像による有機薄膜上の局所分極観察、荒木健人 彩、家 裕隆、安蘇芳雄、松本卓也、第5回分子アーキテクトニクス研究会
A04 浅井哲	A01 小川	学会発表 (2014)	「Neuron-like signal generation and its chaotic analysis of single-walled carbon nanotube and nanoparticle complex, H. Tanaka H. Tamukoh T. Asai T. Ogawa,」、ICSPM22
A04 浅井哲	A01 小川	特許出願 (2013)	分子スパイク素子の理論解析・シミュレーション
A04 浅井哲	A01 小川	進行中	積分発火素子実現へ向けた分子素子設計
A04 赤井	A02 松本和	進行中	単層CNTトランジスタのノイズ特性の評価と確率共鳴素子の作製
A04 柳田	A01 寺尾	進行中	単結晶ナノワイヤ素子と機能性有機分子との融合
A04 柳田	A01 アルブレヒト	進行中	単分子カルバゾールオリゴマーの単分子測定
A04長谷川剛	A01小川	進行中	有機分子被覆ナノドットを利用したネットワーク構造の作製とその特性評価

#### 4. 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 ページ程度）

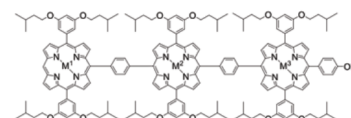
本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果（発明及び特許を含む）について、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。

**A01 班概要：**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する。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が進んでいる。特に、グラフェンを電極として活用することを意図し、適切なアンカー部位とワイヤー構造の設計が行われ、トランジスタ特性の計測に成功し、固定電極を用いた集積化への糸口をつかんだ。公募班では、2次元シートや超分子、 dendroliマーなど、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が着実に進展している。

##### A01 計画班

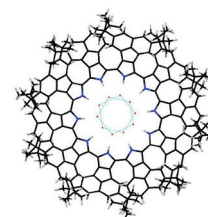
##### 小川グループ（大阪大学） [分子材料][ワイヤ][ネットワーク]

(a) 単一分子ダイオードの合成 (Chem. A Euro. J. 2014) と分子構造による特性制御 (A03 冨田グループとの共同研究)、(b) POM の単一分子負性微分抵抗の発現、(c) カーボンナノチューブ/POMによる自己パルス発振現象の発見、(d) メモリ、負性微分抵抗素子として働くと期待できるポルフィリンアレイの新規合成 (J. Org. Chem. 2014)、(e) 単一分子磁石の合成 (Chem. A Euro. J. 2014) と、磁性のスイッチングや表面での自己組織化の確認 (A02 米田グループとの共同研究) を行った。



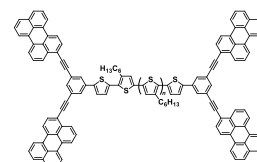
##### 宇野グループ（愛媛大学） [分子材料]

これまでに主に作成してきたポルフィリンの重合体に加え、ホスト-ゲスト機能を有する大環状シクロファン類、螺旋構造をもつヘリセン、電極と結合させるためのアンカーユニットとしてピリジン基を有するピロールなど、15種類の分子を開発した (Adv. Mater. 2014 他)。



##### 家グループ（大阪大学） [分子材料][アンカーユニット]

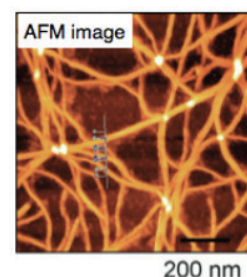
金属およびグラフェン電極と接続するアンカーユニットを有する分子ワイヤを合成し、計測グループと共同で電気伝導度計測を行った。A02 松本和グループと共同でグラフェン電極を用いた単分子のトランジスタ特性計測に成功した。A03 冨田グループと共同で、独自の完全剛直かつ被覆されたオリゴチオフェン分子の合成と電気伝導度計測を行うとともに、熱起電力計測で、アンカー部のキャリア注入特性を解明した (投稿中)。バンドギャップの小さなコポリマーの合成を行った (J. Mater. Chem. 2013)。



##### A01 公募班

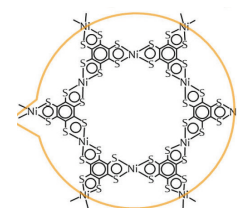
##### 田代グループ（東京大学） [分子材料][超分子][ワイヤ]

金属イオンを内包したナノリング状分子が自己集合し、金属イオン内包型ナノファイバーを形成することを見出した (Chem. Asia. J. 2014)。リング状分子の構成ユニットをより立体的にすると、様々な金属イオンや有機化合物を内包するチューブ構造を形成することを見出した (J. Am. Chem. Soc. 2014)。



##### 西原グループ（東京大学） [分子材料][二次元膜][ネットワーク]

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とその特性の解明に成功した (Nature commun. 2015)。(a)では、A03 長谷川修グループとの共同研究によりその電子物性を明らかにした (J. Am. Chem. Soc. 2014)。





## アルブレヒトグループ（東工大） [分子材料][3D][ネットワーク]

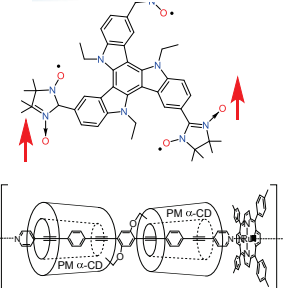
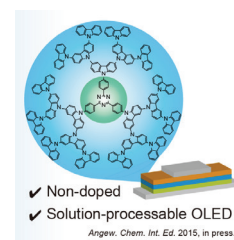
分極した分子を配列させることで、中心方向にむかって双極子モーメントを有する dendrimer を開発した (Chem. Commun. 2014)。分極方向の制御および中心にアクセプターを配置した dendrimer を設計し、単一成分で初めて TADF 発光を示す材料を開発した (Angew. Chem. 2015)。

## 松下グループ（名古屋大学） [分子材料][スピン]

独自の有機ラジカルユニットにより (a) 有機導電体が、絶縁体化する 53K 以下の温度での FET 測定により負性抵抗を初めて確認した。(b) 伝導性軌道の周囲に多数のラジカルユニットを配置することで、室温で磁気抵抗効果の発現に成功した (Adv. Func. Mater. 2014)。

## 寺尾グループ（京都大学） [分子材料][ワイヤ]

CO の吸着で分解し、光をあてると重合する機能性ワイヤの開発や、絶縁被覆された導電性単分子ワイヤのユニット間に種々の機能分子を配置する合成方法を確立し、高いキャリア移動度を確認した (Chem. Commun. 2014 他)。

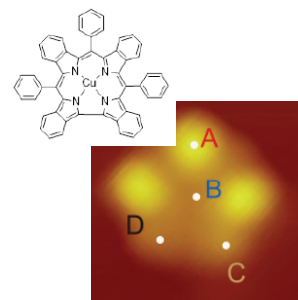


**A02 班概要：**基板表面に固定された分子の電子およびスピン状態の解明を行う。走査型トンネル顕微鏡を中心とした精密測定が行われ、表面に吸着した分子の構造変化に伴うスピン状態の変化を明らかにし (Nature Commun. 2015)、これまでの表面科学的アプローチではあまり行われることのなかった STM 探針を分子に直接接触させた状態での伝導測定の例も報告され、新たな分野への展開が進んでいる。シリセン、グラフェンに代表される二次元原子層電極の活用が検討され、基本物性が解明されるとともに、初めてグラフェンが本格的に電極として活用され、A01 班の項で述べたとおり、単分子トランジスタ特性の計測に成功した。公募班では、分子と電極をつなぐ方法論や、より高次の構造を構築するための方法論が提案されている。

## A02 計画班

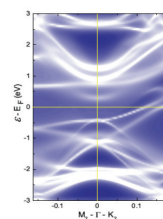
## 米田グループ（東北大学） [物性計測][STM][スピン]

極低温 STM により、A01 小川グループと共同でダブルデッカー型ポルフィリンのスピンが、STM による分子からの水素の脱離によって制御可能であることを示し、スピン分布を分子内分解能で明らかにした。また、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)。



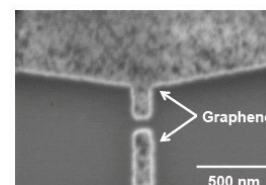
## 石田グループ（日本大学） [計算][バンド][伝導]

A02 高木グループと共同で、シリセンの電子構造を計算し、Dirac 状態の有無とエネルギー分散関係を明らかにした。シリセンの電子状態が界面相互作用で大きく変調される様子が初めて明らかにされた (New J. Phys. 2015)。



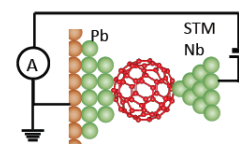
## 松本和グループ（大阪大学） [グラフェン][デバイス特性]

絶縁基板の上にグラフェンを作製する技術を確立し (Appl. Phys. Express 2013)、数十 nm の間隔をもつグラフェンナノギャップ電極の開発に成功した。A01 家グループと共同で、長さ 100 nm 程度のペリレン末端修飾オリゴチオフェン分子を架橋させ、単分子デバイスの計測に成功し、ゲート依存性から p 型伝導特性を明らかにした。



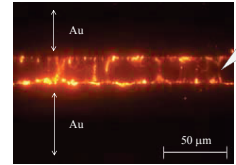
## 高木グループ（東京大学） [物性計測][STM][スピン]

銀表面上にシリセン膜を作成し、その電子構造を明らかにした (Prog. Surf. Sci. 2015)。極低温強磁場 STM を用い、FePc 単分子の磁気異方性を 3 次元で決定することに成功した。また、超伝導 STM 探針/ $C_{60}$  分子/超伝導電極からなる単分子デバイスを構築し、伝導チャンネルと透過率を決定した (Phys. Rev. B 2014)。



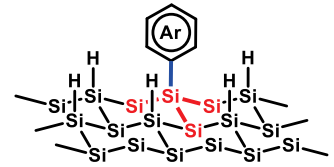
### 小林グループ（千葉大学） [ワイヤ] [ネットワーク]

1MV/m 程度の高電界を印加することで、電極間に DNA 鎖を伸長固定する独自の手法を利用し、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の作製と電極への固定に成功した (Chem. Mater. 2014 他)。



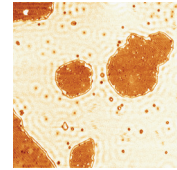
### 山野井グループ（東京大学） [分子-電極接合]

水素末端シリコンとハロゲン化芳香族化合物を反応させ、分子をシリコン表面に共有結合で接合する技術を開発した。この反応により、Si(100)へのジヨードビフェニル誘導体の固定化を行った。



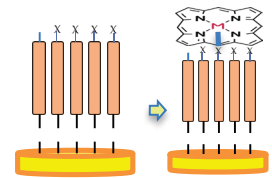
### 吉田グループ（東京大学） [物性計測] [STM] [スピン]

極低温で吸着した酸素の配列構造を STM により観測し、反強磁性秩序を持つと期待される構造をとっていることを確認した。トンネルスペクトル測定から、表面準位の非占有準位側へのレベルシフトが確認された。また、Ag(111)表面上のピセン単分子層の分子配列を STM で明らかにした (J. Chem. Phys. 2014)。



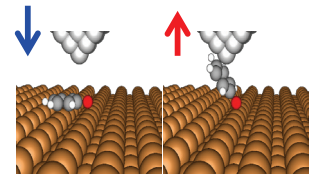
### 近藤グループ（お茶の水女子大） [単分子膜] [2D、3D ネットワーク]

電極と利用される金表面の平坦化プロセスを検証した (Electrochem. 2014)。基板上にポルフィリンを吸着する単分子層を形成した後、ポルフィリンを吸着させる逐次自己集積化によって構築した。構築されたポルフィリン層は、酸素還元反応に対し触媒活性を示し、期待通りの配置を示していることを明らかにした (Electrochem. 2014)。



### 奥山グループ（京都大学） [物性計測] [STM]

STM 探針を接触させることで、電圧誘起スイッチングを起こす官能基を検討した。クロロフェノキシ基は、フェニル基よりも高い位置でのスイッチングが可能であることを明らかにした。また、分子が孤立しているときと、周辺を他の囲まれた時で電気伝導度が変化することを明らかにした。また、Cu(110)上での一酸化窒素の分子配向の温度依存性なども明らかにした (J. Chem. Phys. 2014)。

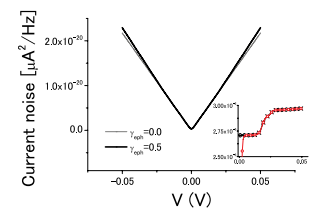


**A03 班概要:** 単分子接合や分子・原子層膜の電荷輸送特性の解明を担当している。電気伝導度に加え、熱起電力などの新たな測定手法を駆使し、分子合成、計測と理論が密接に連携し、4 探針 STM により、A01 班で作成された分子層膜の電気伝導計測に成功 (J. Am. Chem. Soc. 2014) するなど、単分子接合の特性と電子状態の理解が着実に進んでいる。さらに、A04 班への橋渡しを意図し、ゆらぎやノイズに関する計測と理論的考察を深めている。公募班では、新たな電極材料として期待されるグラフェンのボトムアップ合成や、分子を利用した ReRAM などの新規機能開拓へ向けた研究が展開されている。

### A03 計画

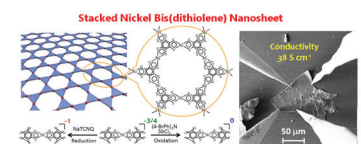
#### 浅井美グループ（産総研） [理論] [伝導] [ゆらぎ]

分子素子中の電流揺らぎに対する電極フォノンと練成した分子振動影響を調べた。特に低温においてフォノンの非平衡性を含めて精密に調べた結果、フォノンによるショットノイズに対する補正が電子の伝導ダイナミクスに強く依存することと、その詳細を明らかにした (Phys. Rev. B 2015 他)。



#### 長谷川修グループ（東京大学） [物性計測] [4 端子 STM]

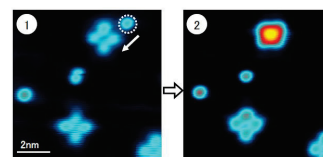
A01 班の西原グループが世界ではじめて作製に成功したカゴメ格子型単分子層シートの電子物性を測定し、酸化還元反応による電気伝導度変化を明らかにした (J. Am. Chem. Soc. 2014)。Ag(111) 薄膜および Ag(111)



単結晶上にシリセンを成長し、光電子分光により、両者に違いがあり、単結晶上でのみ多層シリセンが成長することを明らかにした (Appl. Phys. Lett. 2013)。

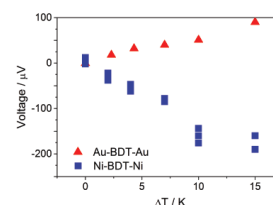
### 山田グループ (千葉大学) [物性計測][STM][スピン]

極低温 STM を用い、フタロシアニンの局所状態密度を詳細に調べ (Nanotechnology 2013)、Fe や Co 原子を操作し、フタロシアニン分子の上、横、中央に配置して、人工的な構造を作成することで、金属原子が分子の電子構造に与える影響を明らかにした。Mn 表面上で、水素フタロシアニンの水素原子をパルス印加で除去すると、代わりに Mn 原子が入り込み、Mn-フタロシアニンが人工的に作製できることを確認した。



### 多田グループ (大阪大学) [物性計測][デバイス計測][単分子膜]

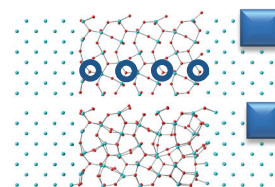
単一分子の熱起電力測定を行い、電極と分子の接続状態によってキャリア種別が異なることを示した (Nano Lett. 2014)。これを発展させ、A01 家グループと共同で三脚アンカー分子によって電荷担体を正孔/電子の制御ができることを示した。A04 葛西グループとの共同で単分子膜素子で確率共鳴を発現させた。極低温 MCBJ 装置を開発し、非弾性トンネルスペクトルにより分子構造を同定し、オリゴチオフェンのスライディングと思われる現象を観測した。



## A03 公募班

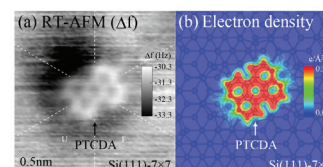
### 中山グループ (北海道大学) [計算][伝導][メモrista]

分子アーキテクトニクスで目指す機能の一つと考えられるメモristaについて、先行して開発が進んでいる金属酸化物電極に対し、動作原理と構造熱ゆらぎを考慮した第一原理シミュレーションを行い、ON/OFF 状態における原子の移動状態を明らかにした。HXeCCH, HXeBr, HXeI の振動構造におけるマトリックス効果を検証した (Phys. Chem. Chem. Phys. 2015)。



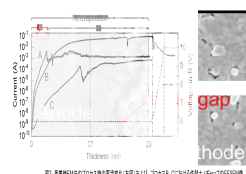
### 杉本グループ (東京大学) [物性計測][AFM]

原子間力顕微鏡に依るアトムマニピュレーションを利用し、Si (111)-7x7 表面に鉛など様々な原子による 3 次元クラスタ構造を構築した。クラスタ構造は電流誘起のスイッチとして動作することを見だした。分子を Si (111)-7x7 上に吸着させ、分子の精密力学的特性の測定に成功した (Nature Commun. 2015)。



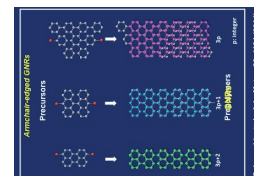
### 内藤グループ (産総研) [素子作製]

金属電極を蒸着しながら行う独自のエレクトロマイグレーション技術の条件最適化により、ギャップ長のばらつきをサブ nm にまで抑えたナノギャップの生産方法を確立した。



### 坂口グループ (京都大学) [グラフェン]

独自に開発した 2 ゾーン型ラジカル重合気相界面合成法により、従来困難だったアームチェアエッジ型のグラフェンナノリボンを 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)。さらに作製したグラフェン薄膜を転写することでガラスやシリコン上に薄膜を形成することに成功した。

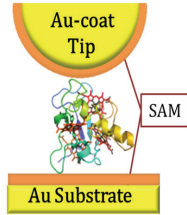
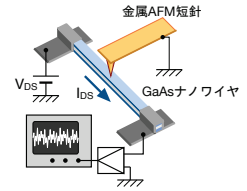


**A04 班概要**：分子のゆらぎと非線形現象に着目した機能設計を担当している。ノイズの活用として注目してきた確率共鳴に加え、いくつかの**新たな論理演算システム**が提案された。分子由来の**ノイズの実測**や、確率共鳴を起こすことが知られている分子集合ネットワークの伝導機構などについて新たな知見が得られた。公募班では、単分子を利用した**ノイズの発生方式の提案**や、ナノワイヤなどの他の物質系との復号化による新機能の提案がなされ、新たなアーキテクチャ構築に向けた土台が議論されている。



**葛西グループ（北海道大学）[回路][システム][デバイス計測]**

A01 小川グループと共同でグラフェンナノリボンにより独自の3分岐ナノ接合論理ゲートを構築した。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. 2015)。

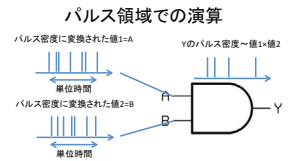


**松本卓グループ（大阪大学）[ネットワーク素子][物性計測]**

分子素子ネットワークの構成要素として複数の酸化還元準位を有する巨大分子に注目し、シトクロム c3 で強い非線形電流-電圧特性を観測、巨大ポリオキシメタレートについて、プロトン伝導と電子伝導を見出した。酸化還元活性巨大分子が結合した DNA ネットワークの低バイアスにおける伝導について、クーロンブロッケードネットワークモデルによる解析を行い、電荷輸送機構を明らかにした (Jpn. J. Appl. Phys. 2014)。

**浅井哲グループ（北海道大学） [システム]**

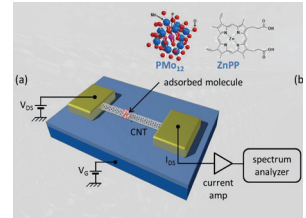
分子情報処理システムを構築するための新たな方向として、「パルス情報処理」を提案した。非線形システムと確率共鳴を基本とする低消費電力のロジック回路を設計し (Nonlinear Theory and Its Applications 2014)、分子素子を組み合わせた小規模・大規模回路の実装のため、確率共鳴ゲートを二端子分子素子で実現する回路方式を確立した。



A04 公募班

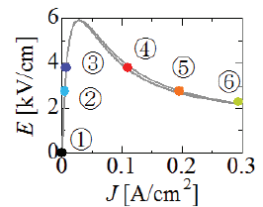
**赤井グループ（大阪大学） [ノイズ発生][確率共鳴][ネットワーク]**

超平坦電極を用いて、カーボンナノチューブ (CNT) トランジスタを作製し (Appl. Phys. Lett. 2014)、確率共鳴素子の開発に重要な、(a) CNT トランジスタの高 ON/OFF 比を実現するための素子構造の最適化、(b) CNT への分子吸着によるノイズ発生を行った。(b)では、吸着させた分子の種類によって発生するノイズの大きさが変化することが明らかとなった。



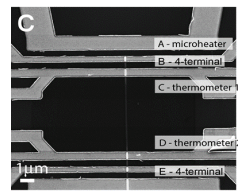
**岸田グループ（名古屋大学）[分子材料][集団機能]**

ラマン分光を用いて、負性抵抗を示す BEDT-TTF 化合物の分子内の電荷分布を明らかにし、負性抵抗領域と通常の抵抗領域でダイマー間の電荷分布状態に変化がないことが明らかになった。また、外部電場に対して応答を示す可能性のある系として、コロネンおよびコラニユレンの電荷移動錯体が有望であることを見出した (Chem. Lett. 2015)。



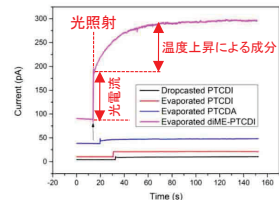
**柳田グループ（九州大学）[配線技術][ナノワイヤ][メモリスタ]**

VLS 法を用いた単結晶酸化物ナノワイヤを作製し、不純物ドーパントの空間分布を精密に制御して世界でも最も電気伝導度の高い ITO ワイヤを作製するとともに (Nanoscale 2014)、基板への精密配置技術を開発した (Sci. Rep. 2014)。また、ナノワイヤの熱起電力と熱伝導率を測定する独自のシステムを構築した (J. Am. Chem. Soc. 2014)。さらに、メモリスタをナノワイヤで実現し、その動作機構を明らかにした。



**長谷川剛グループ（早稲田大学） [原子スイッチ][ネットワーク]**

独自に開発してきた固体電解質中における金属析出による原子スイッチを利用したシナプス動作回路の光応答化を目指し、有機薄膜の光電流応答特性を明らかにした。高分子の原子スイッチにおいて抵抗変化型メモリー機能の温度依存性および圧力依存性を明らかにした (J. Mater. Chem. 2015)。

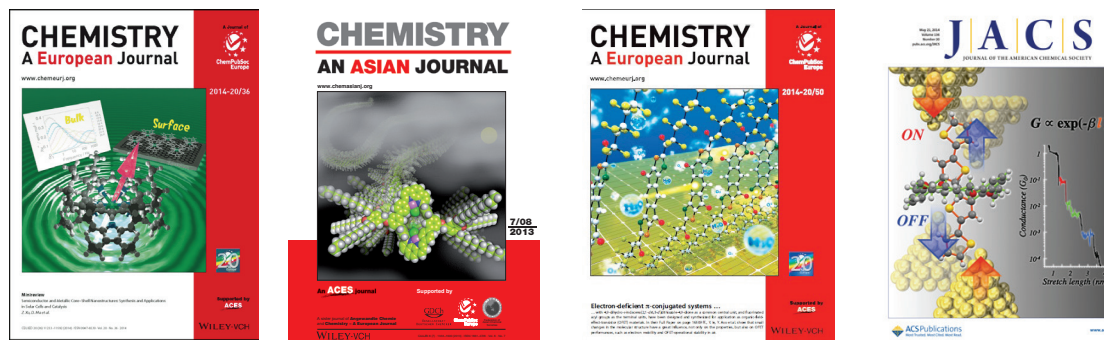


## 5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）（5 ページ程度）

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。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\*印を付してください。また、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。また、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◎を付してください。

### 【主な論文・書籍】

代表的な文献のリストを示す（すべて査読あり）。合計で、240報の論文が査読付国際雑誌に出版された。いくつかの成果は、雑誌の表紙に採用され、ジャーナルの Web ニュースにて取り上げられるなど、それぞれの分野で注目を集める成果を得ている。



### A01 班（90報）

- ◎Width-Controlled Sub-nanometer Graphene Nanoribbon Films Synthesized by Radical-Polymerized Chemical Vapor Deposition, \*H. Sakaguchi, Y. Kawagoe, Y. Hirano, T. Iruka, M. Yano, and \*T. Nakae, *Adv. Mater.*, 26, 4134 (2014).
- Synthesis of NIR-emitting O-chelated BODIPYs fused with benzene and acenaphthylene, \*T. Okujima, Y. Shida, K. Ohara, Y. Tomimori, M. Nishioka, S. Mori, T. Nakae, and \*H. Uno, *J. Porph. Phthal.*, 18, 752 (2014).
- Electron-donor function of methanofullerenes in donor-acceptor bulk heterojunction systems, \*Y. Ie, M. Karakawa, S. Jinnai, H. Yoshida, A. Saeki, S. Seki, S. Yamamoto, H. Ohkita, \*Y. Aso, *Chem. Commun.* 50, 4123 (2014).
- ◎Acenaphthylene-Fused Cyclo[8]pyrroles with Intense Near-IR-Region Absorption Bands, \*T. Okujima, C. Ando, J. Mack, S. Mori, I. Hisaki, T. Nakae, H. Yamada, K. Ohara, N. Kobayashi, H. Uno, *Chem. Eur. J.* 19, 13970 (2013).
- Three-dimensional electron-accepting compounds containing perylene bis(dicarboximide)s as n-type organic photovoltaic materials, \*Y. Ie, T. Sakurai, S. Jinnai, M. Karakawa, K. Okuda, S. Mori, \*Y. Aso, *Chem. Commun.* 49, 8386 (2013).
- ◎Electron Transport Dynamics in Redox-Molecule-Terminated Branched Oligomer Wires on Au(111), \*R. Sakamoto, S. Katagiri, H. Maeda, Y. Nishimori, S. Miyashita, \*H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137, 734-741.
- Electrochromic Bis(terpyridine)metal Complex Nanosheets, K. Takada, \*R. Sakamoto, S.-T. Yi, S. Katagiri, T. Kambe, \*H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.* 137, 4681 (2015).
- A photofunctional bottom-up bis(dipyrrinato)zinc(II) complex nanosheet, \*R. Sakamoto, K. Hoshiko, Q. Liu, T. Yagi, T. Nagayama, S. Kusaka, M. Tsuchiya, Y. Kitagawa, \*W.-Y. Wong, \*H. Nishihara, *Nat. Commun.*, 6, 6713 (2015).
- Carbazole Dendrimers as Solution-Processable Thermally Activated Delayed-Fluorescence Materials, Ken Albrecht, Kenichi Matsuoka, Katsuhiko Fujita, \*Kimihiisa Yamamoto, *Ang. Chem. Int. Ed.*, in press.
- Multipoint Recognition of Ditopic Aromatic Guest Molecules via Ag- $\pi$  Interactions within a Dimetal Macrocyclic, K. Omoto, S. Tashiro, M. Kuritani, \*M. Shionoya, *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 17946 (2014).
- ◎Redox Control and High Conductivity of Nickel Bis(dithiolene) Complex  $\pi$ -Nanosheet: A Potential Organic Two-Dimensional Topological Insulator, T. Kambe, R. Sakamoto, T. Kusamoto, T. Pal, N. Fukui, K. Hoshiko, T. Shimojima, Z. Wang, T. Hirahara, K. Ishizaka, S. Hasegawa, F. Liu, \*H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 14357 (2014).
- Stepwise radial complexation from the outer layer to the inner layer of a dendritic ligand: a phenylazomethine dendrimer with an inverted coordination sequence, K. Albrecht, N. Sakane, \*K. Yamamoto, *Chem. Comm.*, 50, 12177 (2014).
- Storage of an electric field for photocurrent generation in ferroelectric-functionalized organic devices, L. Hu, S. Dalglish, M. M. Matsushita, H. Yoshikawa, K. Awaga, \*Nature Commun., 5, 4279 (2014).
- ◎Synthesis of One-Dimensional Metal-Containing Insulated Molecular Wire with Versatile Properties Directed toward Molecular Electronics Materials, H. Masai, \*J. Terao, Shu Seki, S. Nakashima, M. Kiguchi, K. Okoshi, T. Fujihara, Y. Tsuji, *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 1742 (2014).



15. ©Enhancement of Phosphorescence and Unimolecular Behavior in the Solid State by Perfect Insulation of Platinum-Acetylide Polymers, Hiroshi Masai, \*J. Terao, Satoshi Makuta, \*Y. Tachibana, T. Fujihara, Y. Tsuji, J. Am. Chem. Soc., 136, 14714 (2014).

#### A02班 (52報)

1. Modulation of the Molecular Spintronic Properties of Adsorbed Copper Corroles, F. Wu, J. Liu, P. Mishra, \*T. Komeda, J. Mack, Y. Chang, N. Kobayashi, Z. Shen, Nat. Comm., in press.
2. Electronic structure of the  $4 \times 4$  silicene monolayer on semi-infinite Ag(111), \*H. Ishida, Y. Hamamoto, Y. Morikawa, E. Minamitani, R. Arafune, N. Takagi, New J. Phys., 17, 15013 (2015).
3. Variation of Kondo temperature induced by molecule-substrate decoupling in film formation of bis(phthalocyaninato)terbium(III) molecules on Au(111), \*T. Komeda, H. Isshiki, J. Liu, K. Katoh, M. Yamashita, ACS Nano, 8, 4866 (2014).
4. Rashba spin splitting of Shockley surface states on semi-infinite crystals, \*H. Ishida, Phys. Rev. B, 90, 235422 (2014).
5. Angular correlation in He and He-like atomic ions: A manifestation of the genuine and conjugate Fermi holes, T. Sako, J. Paldus, G.H.F. Diercksen, Phys. Rev. A, 89, 062501 (2014).
6. Transport characteristics of a single C60-molecule junction revealed by multiple Andreev reflections, R. Hiraoka, R. Arafune, N. Tsukahara, M. Kawai, \*N. Takagi, Phys. Rev. B 90, 241405(R) (2014).
7. First Observation of a Kondo Resonance for a Stable Neutral Pure Organic Radical, 1,3,5-Triphenyl-6-oxoverdazyl, Adsorbed on the Au(111) Surface, J. Liu, H. Isshiki, K. Katoh, T. Morita, B. K. Breedlove, M. Yamashita, \*T. Komeda, J. Am. Chem. Soc., 135, 651 (2013).
8. Silicon-Nitride-Passivated Bottom-Up Single-Electron Transistors, G. Hackenberger, Y. Azuma, S. Kano, D. Tanaka, M. Sakamoto, T. Teranishi, Y. Ohno, K. Maehashi, K. Matsumoto, and Y. Majima, Jpn. J. Appl. Phys., 52, 110101 (2013).
9. Mode-selective electron-phonon coupling in laser photoemission on Cu(110), E. Minamitani, \*R. Arafune, M. Q. Yamamoto, N. Takagi, M. Kawai, Y. Kim, Phys. Rev. B 88, 224301 (2013).
10. ©Electrochemical Modulation of the High-Contrast Luminescence of a Eu(III)-Complex Modified TiO<sub>2</sub> Electrode, K. Kanazawa, K. Nakamura, \*N. Kobayashi, J. Mater. Chem., 2015, in press.
11. ©Synthesis, Characterization, and Physical Properties of Oligo(1-(N,N-dimethylamino)pyrrole)s and Their Doped Forms, Precursors of Candidates for Molecular Flat-band Ferromagnets, \*Y. Yamanoi, K. Takahashi, T. Hamada, N., Ohshima, M. Kurashina, Y. Hattori, T. Kusamoto, R. Sakamoto, M. Miyachi, and \*H. Nishihara, J. Mat. Chem. C, 2015, in press.
12. ©Optical Properties of Disilane-Bridged Donor Acceptor Architectures: Strong Effect of Substituents on Fluorescence and Nonlinear Optical Properties, M. Shimada, \*Y. Yamanoi, T. Matsushita, T. Kondo, E. Nishibori, A. Hatakeyama, K. Sugimoto, \*H. Nishihara, J. Am. Chem. Soc., 137, 1024 (2015).
13. In situ Real-Time Study on Potential Induced Structure Change at Au(111) and Au(100) Single Crystal Electrode/Sulfuric Acid Solution Interfaces by Surface X-ray Scattering, T. Kondo, J. Zegenhagen, S. Takakusagi, \*K. Uosaki, Surf. Sci., 631, 96 (2015).
14. ©Effect of amide bond in gate dielectric polymers on memory performance of organic field-effect transistors, H. Sakai, H.-J. Cheong, T. Kodzasa, H. Tokuhisa, K. Tokoro, M. Yoshida, T. Ikoga, K. Nakamura, \*N. Kobayashi and S. Uemura, Jpn. J. Appl. Phys., 53, 05HB13 (2014).
15. ©Structure of DNA-OTMA Biopolymer Complex and The Application to Non-Volatile BioTFT Memory, L. Liang, K. Nakamura, S. Uemura, T. Kamata and \*N. Kobayashi, Sci. Adv. Mater., 6, 1516 (2014).
16. ©Bio-inspired photoresponse of porphyrin-attached gold nanoparticles on a field-effect transistor, M. Miyachi, \*Y. Yamanoi, K. Nakazato, \*H. Nishihara, Biochim. Biophys. Acta Bioenerg., 1837, 1567 (2014).
17. Scanning tunneling microscopy/spectroscopy of picene thin films formed on Ag(111), Y. Yoshida, H. -H. Yang, H. -S. Huang, S. -Y. Guan, S. Yanagisawa, T. Yokosuka, M. -T. Lin, W. -B. Su, C. -S. Chang, G. Hoffman, Y. Hasegawa\*, J. Chem. Phys., 141, 114701 (2014).
18. ©Thin Film Structures of Metal-Organic Framework [Cu<sub>3</sub>(BTC)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>]<sub>n</sub> on TiO<sub>2</sub>(110), M. Hashimoto, S. Okajima, T. Kondo, K. Hara, \*W.-J. Chun, Electrochemistry, 82, 335 (2014).
19. ©Configuration change of NO on Cu(110) as a function of temperature, A. Shiotari, T. Mitsui, \*H. Okuyama, S. Hatta, T. Aruga, T. Koitaya, and J. Yoshinobu, J. Chem. Phys. 140, 214706 (2014).

#### A03班 (60報)

1. ©Single Molecule Conductance of a Chemically Modified  $\pi$ -Extended Tetrathiafulvalene and its Charge-Transfer Complex with F4TCNQ, R. García, M. Á. Herranz, E. Leary, M. T. González, G. Rubio Bollinger, M. Bürkle, L. A. Zotti, Y. Asai, F. Pauly, J. C. Cuevas, N. Agrait and N. Martín, Beil. J. Org. Chem., in press.
2. First-principles calculation of the thermoelectric figure of merit for [2,2]paracyclophane-based single-molecule junctions, M. Bürkle, T. Hellmuth, F. Pauly and Y. Asai, Phys. Rev. B 91, 165419 (2015).
3. ©Single Molecular Resistive Switch Obtained via Sliding Multiple Anchoring Points and Varying Effective Wire Length, M. Kiguchi, T. Ohto, K. Sugiyasu, S. Nakajima, M. Takeuchi, and H. Nakamura, J. Am. Chem. Soc., 136, 7327 (2014).
4. Vibronic spectroscopy using current noise, Y. Asai, Physical Review B (Rapid Communication), 91, 161402 (2015).

5. ©Heat dissipation and its relation to thermopower in single-molecule junctions, L.A. Zotti, M. Bürkle, F. Pauly, W. Lee, K. Kim, W. Jeong, Y. Asai, P. Reddy, J.C. Cuevas, *New Journal of Physics*, 16, 015004 (2014).
6. Room temperature spin-polarizations of Mn-based antiferromagnetic nanoelectrodes, \*T. K. Yamada and A. L. Vazquez de Parga, *Appl. Phys. Lett.*, 105, 183109 (2014).
7. ©Solution-processable n-Type Semiconducting Materials Containing a Carbonyl-bridged Thiazole-fused  $\pi$  System, \*Y. Ie, C. Sato, M. Nitani, H. Tada, and \*Y. Aso, *Chem. Lett.*, 43, 1640 (2014).
8. ©Thermopower of Benzenedithiol and C60 Molecular Junctions with Ni and Au Electrodes, S. K. Lee, T. Ohto, R. Yamada, and \*H. Tada, *Nano Lett.*, 14, 5276 (2014).
9. ©Thermoelectric efficiency of organometallic complex wires via quantum resonance effect and long-range electric transport property, \*H. Nakamura, T. Ohto, T. Ishida, Y. Asai, *J. Am. Chem. Soc.*, 135, 16545 (2013).
10. Recovery of nanomolecular electronic states from tunneling spectroscopy: LDOS of low-dimensional phthalocyanine molecular structures on Cu(111), Y. Yamagishi, S. Nakashima, K. Oiso and \*T. K. Yamada, *Nanotechnology*, 24, 395704 (2013).
11. Interplay between switching driven by the tunneling current and atomic force of a four-atom Si quantum dot, \*S. Yamazaki, K. Maeda, Y. Sugimoto, M. Abe., V. Zobac, P. Pou, L. Rodrigo, P. Mutombo, R. Perez, P. Jelinek, S. Morita, *Nano Lett.* 2015, in press.
12. Pt atoms adsorbed on TiO<sub>2</sub>(110)-(1x1) studied with noncontact atomic force microscopy and first-principles simulations, D. Fernandez-Torre, A. Yurtsever, J. Onoda, M. Abe, S. Morita, Y. Sugimoto, and \*R. Perez, *Phys. Rev. B*, 91, 075401 (2015).
13. Room-temperature-concerted switch made of a binary atom cluster, \*E. Inami, I. Hamada, K. Ueda, M. Abe, S. Morita, and Y. Sugimoto, *Nat. Commun.*, 6, 6231 (2015).
14. Taketsugu, K. Sakaguchi, N. Kitamura, and \*K. Tanino, *Chemical Science*, 6, 1083-1093, 2014, Quantum Chemical Investigations on the Nonradiative Deactivation Pathways of Cytosine Derivatives, \*A. Nakayama, S. Yamazaki, and T. Taketsugu, *J. Phys. Chem. A*, 118, 9429 (2014).
15. Boron Nitride Nanosheet on Gold as an Electrocatalyst for Oxygen Reduction Reaction: Theoretical Suggestion and Experimental Proof, \*K. Uosaki, G. Elumalai, H. Noguchi, T. Masuda, A. Lyalin, A. Nakayama, and T. Taketsugu, *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 6542 (2014).
16. Identifying the absolute orientation of a low-symmetry surface in real space, S. Kuhn, M. Kittelmann, Y. Sugimoto, M. Abe, A. Kuhnle, and \*P. Rahe, *Phys. Rev. B*, 90, 195405 (2014).
17. Mechanical gate control for atom-by-atom cluster assembly with scanning probe microscopy, \*Y. Sugimoto, A. Yurtsever, N. Hirayama, M. Abe, and S. Morita, *Nat. Commun.*, 5, 4360 (2014).
18. Width-Controlled Sub-nanometer Graphene Nanoribbon Films Synthesized by Radical-Polymerized Chemical Vapor Deposition, \*H. Sakaguchi, Y. Kawagoe, Y. Hirano, T. Iruka, M. Yano, T. Nakae, *Adv. Mater.*, 26, 4134 (2014).

#### A04班 (38報)

1. ©Amoeba-inspired nanoarchitectonic computing implemented using electrical Brownian ratchets, \*M. Aono, S. Kasai, S.-J. Kim, M. Wakabayashi, H. Miwa, and M. Naruse, *Nanotechnology* 26, 234001 (2015).
2. ©Amoeba-inspired spatiotemporal dynamics for solving the satisfiability problem, \*M. Aono, S.-J. Kim, S. Kasai, H. Miwa, M. Naruse, in: Special Issue of *Advances in Science, Technology and Environmentology B*, 11, 37 (2015).
3. ©Concept, analysis, and demonstration of a novel delay network exhibiting stochastic resonance induced by external noise, \*Y. Tadokoro, S. Kasai, A. Ichiki, *Digital Signal Processing* 37, 1 (2015).
4. Conductance with stochastic resonance in Mn<sub>12</sub> redox network without tuning, Y. Hirano, Y. Segawa, T. Kuroda-Sowa, T. Kawai, \*T. Matsumoto, *Appl. Phys. Lett.*, 104, 233104 (2014).
5. Nanoscale Charge Transport in Protein/DNA Networks, Harumasa Yamaguchi, Dock-Chil Che, Y. Hirano, M. Suzuki, Y. Higuchi, \*T. Matsumoto, *Jpn. J. Appl. Phys.*, (2014) in press.
6. Graphene-based three-branch nano-junction (TBJ) logic inverter, X. Yin, and \*S. Kasai, *Phys. Stat. Sol. C*, 10, 1485 (2013).
7. ©Amoeba-inspired computing architecture implemented using charge dynamics in parallel capacitance network, \*S. Kasai, M. Aono, M. Naruse, *Appl. Phys. Lett.*, 163703 (2013).
8. Design and characterization of nonlinear functions for the transmission of a small signal with non-Gaussian noise, \*S. Kasai, Y. Tadokoro, A. Ichiki, *Phys. Rev. E*, 88, 62127 (2013).
9. Charge-Transfer Complex Formed with Bowl-Shaped Corannulene as Electron Donor and Planar 7,7,8,8-Tetracyanoquinodimethane as Electron Acceptor, \*Y. Yoshida, K. Isomura, Y. Nakamura, H. Kishida, G. Saito, *Chem. Lett.*, 44, 709 (2015).
10. ©Effects of temperature and ambient pressure on the resistive switching behaviour of polymerbased atomic switches, S. R. Mohapatra, \*T. Tsuruoka, K. Krishnan, T. Hasegawa and M. Aono, *J. Mater. Chem. C*, 3, 5715 (2015).
11. Advantages of flattened electrode in bottom contact single-walled carbon nanotube field-effect transistor, A. Setiadi, M. Akai-Kasaya, A. Saito, and Y. Kuwahara, *Appl. Phys. Lett.*, 105, 93506 (2014).
12. Cellulose Nanofiber Paper as an Ultra Flexible Nonvolatile Memory, K. Nagashima, H. Koga, U. Celano, F. Zhuge, M. Kanai, S. Rahong, G. Meng, Y. He, J. D. Boeck, M. Jurczak, W. Vandervorst, T. Kitaoka, M. Nogi and \*T. Yanagida, *Sci. Rep.*, 4, 5532 (2014).
13. Ultrafast and Wide Range Analysis of DNA Molecules Using Rigid Network Structure of Solid Nanowires, S. Rahong, T. Yasui, \*T. Yanagida, G. Meng, F. Zhuge, Y. He, N. Kaji, M. Kanai, K. Nagashima, T. Kawai, and Y. Baba,

- Sci. Rep., 4, 5252 (2014).
14. Flux Induced Crystal Phase Transition in Vapor-Liquid-Solid Growth of Indium-Tin Oxide Nanowires, G. Meng, \*T. Yanagida, K. Nagashima, H. Yoshida, M. Kanai, A. Klamchuen, F. Zhuge, Y. He, S. Rahong, X. Fang, S. Takeda and T. Kawai, *Nanoscale*, 6, 7033 (2014).
  15. Modulation of Thermoelectric Power Factor via Radial Dopant Inhomogeneity in B-doped Si Nanowires, Z. Fuwei, \*T. Yanagida, N. Fukata, K. Uchida, M. Kanai, K. Nagashima, G. Meng, Y. He, S. Rahong, X. Li and T. Kawai, *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 14100 (2014).

### 【国際学会における講演】

国際学会における招待講演・基調講演は、あわせて109件である。代表的なものを下に記す。

#### A01 班 (37件)

- Takuji Ogawa "Single Molecular Electronic Devices and Their Integration" National Conference, Lembaga Ilmu Pengetahuan Indonesia (LIPI) Oct.2, 2014 (Jakarta).
- Y. Ie, "Development of Fluorine-Containing  $\pi$ -Conjugated Systems towards n-Type Organic Semiconducting Materials", 4<sup>th</sup> International Fluorine Workshop, April 13-14, 2013 (Tokyo).
- H. Nishihara, "Synthesis of metal complex  $\pi$ -nanosheets and their redox and electronic properties", ACS National Fall Meeting San Francisco Aug. 14, 2014 (San Francisco, United States).
- Jun Terao, "Synthesis of Functionalized Insulated Molecular Wires", The 1st Korea-Japan Bilateral Workshop on Functional Materials Science - Thermoelectrics, Spintronics Low-dimensional Materials, and Soft Matter, Aug.1, 2014 (RIES, Hokkaido University).
- Tomoko Inose (大阪大学・小川グループ、博士課程院生) "Proton-Induced Magnetic Switching and Observation of Surface Structure of Porphyrin-Based Terbium(III) Double-Decker Single-Molecule Magnets" The 8th Russian-Japanese Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, Sep. 27, 2014 (Kazan, Russia).

#### A02 班 (19件)

- Tadahiro Komeda, "Spin Control of Magnetic Molecules with Scanning Tunneling Microscopy", tDIET 14: Dynamics, Interactions and Electronic Transitions at Surfaces, Oct.13-17, 2014 (Asilomar Conference Grounds, Pacific Grove, CA).
- Noriaki Takagi, "Silicene grown on Ag substrates", The 17th International Symposium on the Physics of Semiconductors and Applications, Dec. 7-11, 2014 (Jeju, Korea).
- Y. Ohno "Graphene Field-Effect Transistor for Biological Sensing Applications", 2013 International Conference on Small Science, Dec. 15-18, 2013 (Las Vegas).
- N. Kobayashi, W. Watanabe and K. Nakamura, "Improvement of photophysical properties of emissive molecules in DNA matrix", SPIE Security & Defence 2014, Sep. 22-25, 2014 (Amsterdam).

#### A03 班 (23件)

- Y. Asai, Non-equilibrium transport theory applied to nano electronics problems, The 2014 ECS and SMEQ Joint International Meeting, Oct 5-9, 2014 (Cancun, Mexico).
- Shuji Hasegawa, "Charge and Spin Transport Topological at Surfaces with Strong Electron-Phonon and Spin-Orbit Couplings", International Workshop and Final Conference on "Energy Dissipation at Surfaces", Jun. 6, 2013 (Bad Honnef, Germany).
- Hirokazu Tada, "Magnetoresistance in Organic Materials, From Single Crystals to Single Molecules", Brazilian Physical Society Meeting 2015, XXXVIII ENFMC, May 26, 2015 (Foz do Iguacu, PR, Brazil).
- T. Nakae, T. Iruka, S. Fujita, M. Yano, T. Kojima, H. Sakaguchi, "Bottom-Up Synthesis of sub-1 nm Graphene Nanoribbons by Surface Polymerization", International Symposium on Integrated Molecular/Materials Science and Engineering (IMSE2014), Nov.1-3, 2014 (Nanjing).

#### A04 班 (30件)

- Seiya Kasai, "Bio-inspired Nonlinear Nano-devices for Coexisting with Fluctuation", The 16th Takayanagi Kenjiro Memorial Symposium, Nov. 11-12, 2014, Shizuoka, Japan (plenary)
- Takuya Matsumoto, "Stochastic Resonance in Molecular Network Systems", The 2014 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA 2014), Sep.15, 2014 (Luzern, Switzerland)
- Takuya Matsumoto, "Stochastic Resonance in a Molecular Redox Circuit", International Conference on Small Science (ICSS 2013), Dec. 2013 (Las Vegas Nevada, USA).
- Hideo Kishida, "Electronic excitation spectroscopy of  $\pi$ -electron systems, using Raman processes", ICOMF15 - LB15 15th International Conference on Organized Molecular Films, July 9-11, 2014 (Jeju, Korea).

【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ている。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 1 1）。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。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ー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 1 1. 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】

これまでに 6 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 カ国 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】

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 3 回開催した（次頁表 2）。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されている。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ている。領域終了後も、本分野の研究討論、若手育成の場として研究会が継続すべく、興味深い成果を発信する責務を負っている。

また、物理系の領域とは、物性科学領域横断研究会に参画し、成果公開と研究交流を積極的に行っている。情報通信分野とは、12月に香港での国際会議にシンポジウムを共催する。このように、さまざまな領域に交流をひろげることで、異分野の研究者間の接点をつくり相互理解と共同研究の活性化につなげた。非公開の領域全体会議（計 5 回開催）に、総括班経費から旅費をサポートすることで、学生を積極的に参加させ、若手育成の一助とした。



表 2. 分子アーキテクトニクス研究会開催状況。

	発表者数	参加者数	備考
第三回研究会 2013/10/1 大阪市中央公会堂	10名	57名 うち領域外 27名	領域キックオフミーティングの翌日に開催
第四回研究会 2014/3/11-12 東京大学山上会館	16名 ポスター 47件	61名 うち領域外 30名	領域会議と連続開催
第五回研究会 2014/11/25-26 大阪大学	13名 ポスター 51件	96名 うち領域外 32名	物性科学領域横断研究会と連続日程で開催

(第一回と第二回は、領域開始前に開催済み)

今後の予定として、平成27年8月に本領域主催の公開国際シンポジウムを企画しており、同じく12月のPacifichemにおいてセッションを主催している。

この他に、領域メンバーが主催した関連研究会は、平成25年、26年度に大小28件、うち16件が国際シンポジウムである。さらに、平成27年度に4件の国際シンポジウムが計画されているなど、活発な活動を行っている。

### 【アウトリーチ活動】

本領域に係る研究者は、平成25・26年度で合計46件のアウトリーチ活動（広報誌 1、一般向け講演 5、高校生向け一日授業・体験授業 27、一般向けイベント参加 9、社会人講義 4）を行っている。代表的なものを表3に記した。とくに、高校生（SSH校 3校を含む）を対象とした出張授業や体験入学により、当該分野の**魅力を伝える**とともに、高校生の**進路選択や学習意欲の向上**に貢献している。

畠田は、有機エレクトロニクスを紹介するセミナー、実習を平成25年、26年と担当し、平成26年は、白川英樹 筑波大学名誉教授とともに、**高校生 134名**が実際に**有機デバイスを作製**する実習を行い有機エレクトロニクスの将来展望を紹介した（平成26年11月1日 大阪大学）。実施後の感想では、有機物が電気を流し、光ることに強い興味を持ったようすがうかがわれた。その他にも、「物理オリンピックに向けた実験実習」（A03 長谷川修司）、社会人講義による単分子エレクトロニクスの紹介（A03 山田亮）など、多岐にわたって活動している。

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
2015/2/15	戸山高等学校(東京)	平成26年度理数フロンティア校及び理数教育チャレンジ団体研究成果発表会「界面を用いる化学—錯体ナノシートからバイオ光センサまで」	高校生
2014/12/24	静岡県総合教育センター(静岡)	静岡県教育委員会主催 オリンピックチャレンジ「大気圧測定実験、およびLEDによるプランク定数測定実験」	高校生
2014/12/21	お茶の水女子大学	科学への誘いセミナー「ナノの世界」	高校生
2014/11/22	瑞穂野地区市民センター(栃木)	「得意技で田舎から世界にはばたけ」	一般
2014/11/18	大阪大学	「単一分子エレクトロニクスの現状と展望 I・II」	社会人
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
2014/8/23	岡山大学	「科学先取りグローバルキャンパス岡山」キックオフシンポジウム「ナノワールドの探索」	高校生
2014/8/8	国立女性教育会館(埼玉)	平成26年度女子中高生夏の学校2014「LEDの点灯と回折格子による波長とエネルギーの測定実験」	中高生

## 【新聞掲載】

領域メンバーの研究成果および活動に関し、新聞報道発表が下、表4の通り行われ、一般社会からも注目を集めている。

表4. 主な報道発表。

	報道機関	タイトル
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)
2015/2/17	日刊工業新聞	「3鉛原子密着⇄分離 微小電流で位置にずれ」(A03 杉本)
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)
2014/9/16	PHYS. ORG	The future face of molecular electronics <a href="http://goo.gl/ciGdQX">http://goo.gl/ciGdQX</a> (A03 長谷川修) 他、2つのwebメディアに掲載
2014/7	ハミングヘッズ(雑誌)	「記憶装置の歴史」(A03 山田)
2014/12/12	科学新聞	「レーザー光照射で電子の動きを凍結・秩序化」(A04 岸田)
2014/11/26	日経産業新聞	「解剖 先端拠点：物材機構 国際ナノアーキテクトニクス 研究拠点 がん治療や脳研究貢献」(A04 長谷川剛)
2014/4/25	科学新聞	「超極細ナノ炭素細線 京大 画期的高効率合成法開発」(A03 坂口)
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)
2014/4/9	京都新聞	「炭素極細線 安価に量産」(A03 坂口)

## 【受賞】

全体で、63件の受賞があった。うち国際的な賞は20件、若手研究者9件、学生40件とアクティビティの高さを示している。表5に、主な受賞を記す。

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)
有機π電子学会賞(2014)	A01 安蘇芳雄(大阪大)

\*この他にも、平成27年度にすでに受賞が決定しているものとして、高分子学会ヤングサイエンティスト公演賞(A01 アルブレヒト建(東工大))、錯体化学会賞(A01 西原(東京大学))がある。

## 若手の国際学会での受賞

Poster Award The International Conference on Molecular Based-Magnets @Russia (2014/7/5).	猪瀬朋子 (D2) [A01 小川グループ]
YOUNG TALENTS AWARD International Conference Photosynthesis Research for Sustainability @Russia (2014/6/9).	池平 秀 (M1) [A01 西原グループ]
The Best Poster Award 7th International Symposium on Surface Science (2014) @Japan (2014/8/7).	塩足亮隼 (D3) [A02 奥山グループ]
ATI poster award NC-AFM2014@Japan (2014/8/7).	岩田孝太 (D1) [A03 杉本グループ]
Best Poster Award Nano and Giga Challenges in Electronics, Photonics and Renewable Energy@USA (2014/3/10).	Lee Seekei (PD) [A03 冨田グループ]
MNC2014 Award for Outstanding Paper Microprocesses and Nanotechnology Conference@Japan (2014/11/5).	今井裕理 (M2) [A04 葛西グループ]

## 6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況（2 ページ程度）

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、研究組織間の連携状況について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るため、総括班内に、班長会議（運営委員会）に加え共同研究推進委員、評価委員を置き、各研究項目の進捗状況の把握と共同研究の立案・調整を行う体制をとっている。

図 1 2 に各研究項目の役割と連携構造を示す。

A01 班が機能性を有する分子を作製し、A02 班が、それを表面に置いた時の電子構造を明らかにし、どのような電極-分子接合構造が構築可能であるかを考察する。A03 班は、電極-分子接合におけるキャリアおよびスピンの輸送特性を明らかにする。この連携の中で、非線形な電流-電圧特性と電極-分子接合のもつゆらぎやノイズの情報を抽出し、A04 班と連携して、分子素子を並列化およびネットワーク化し、ゆらぎやノイズを利用した情報処理の指針を導出する。

それぞれの班における各研究課題は、上記の方向に沿ったものであるが、特に集中して取り組んでいる点をまとめると以下ようになる。

- A01 班・小川：非線形な電流-電圧応答を示す分子の設計・合成と炭素系電極への接続  
 宇野：高共役  $\pi$  電子化合物のペリ環状反応前駆体の合成とワイヤーとの接続  
 家：金属および炭素系電極との接続アンカーおよび分子ワイヤーの設計・合成  
 田代：ネットワークの構築を目指した金属イオン内包型ナノファイバーの合成  
 西原：電極またはキャリア・スピン輸送媒体としての 2 次元ナノシートの合成  
 アルブレヒト：量子ドット機能を有する dendrimer 分子の合成  
 松下：スピン輸送媒体としての有機ラジカル分子の合成  
 寺尾：絶縁被覆された分子ワイヤーの設計・合成
- A02 班・米田：分子磁石と電極表面のスピン状態の解明  
 石田：電極表面に吸着した分子の電子構造の解明  
 松本和：炭素系材料を用いた電極構造の作製  
 高木：金属および半導体表面と分子吸着構造の電子構造の解明  
 小林：金属電極と DNA の架橋構造の作製  
 山野井：シリコン電極の作製と分子の架橋構造の作製  
 吉田：金属表面上での磁性分子の操作と局所電子構造の解明  
 近藤：3 次元分子組織体の構築  
 奥山：金属表面上での分子操作
- A03 班・浅井美：分子および分子組織体の非線形電気伝導現象および構造ゆらぎの理論的解明  
 長谷川修：4 探針 STM を用いた分子接合系の電気伝導度特性計測  
 山田：STM を用いた原子操作による分子の電子注入およびスピン注入特性の制御  
 多田：単一分子の電気伝導度特性の計測  
 中山：分子接合系における構造ゆらぎの理論的考察  
 杉本：表面上の接続分子の接続様式と電気伝導度特性の解明  
 内藤：ナノギャップ電極の作製および分子 ReRAM の開発  
 坂口：グラフェン細線の合成と電子構造の考察
- A04 班  
 葛西：分子ネットワークにおける情報処理の要素技術開発  
 松本卓：分子ネットワークの作製とゆらぎを利用した素子の開発  
 浅井哲：分子ネットワークを用いた情報処理の指針導出

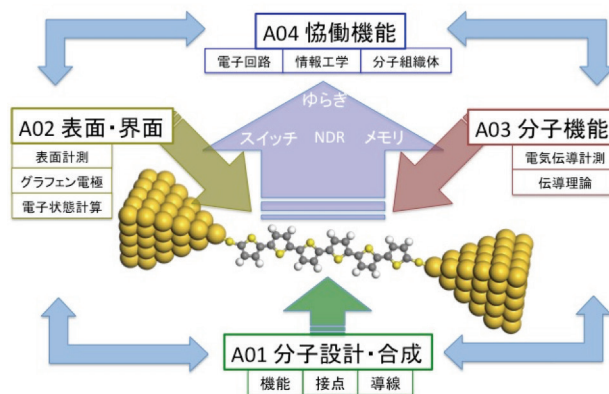


図 1 2. 組織構成図。

赤井：内部ノイズ発生源の開発と確率共鳴素子への応用  
 岸田：分子組織体の外場応答の解明  
 柳田：無機-有機ヘテロワイヤの作製と電気特性計測  
 長谷川剛：原子スイッチを利用したシナプス動作回路の光応答化機能の開発

【各研究項目の連携状況】

総括班では、共同研究を促す次のような取り組みを行った。

- (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(図13)」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するとともに、共同研究にかかる経費を総括班経費より支出することで積極的な共同研究の推進を促した。

区分	名称	詳細・仕様・特徴など
区分 (不明な場合は空欄)	名称	詳細・仕様・特徴など
測定装置	超高温変温装置	温度 30mK 及び 9T 程度の磁場、試料回転可能
測定装置	プローブ	室温から約 7 K の低温まで温度を変化
装置	電子顕微鏡装置	加速電圧 50kV で撮影可能
装置	真空アライナー	フォトリソグラフィ
装置	蒸着装置	Au, Ti, Ni, Co, Pd, Al, C 蒸着可能
区分 (不明な場合は空欄)	名称	詳細・仕様・特徴など
試料	試料	こちらの基本骨格は、50 mg 単位で提供可能。合成ノウハウも提供可能。
区分 (不明な場合は空欄)	名称	詳細・仕様・特徴など
測定	超高温変温装置	電機特性評価、4 探針、ベース圧力 ~1E-8Pa、ガス循環、100~22K まで温度可変可能、そのほかプローブ装置 6 台(6 探針×2、64×2 探針など)
試料	ナノギャップ電極作製 (蒸着)	電極個数は要相談、ギャップ幅 5nm 以上作製可能。蒸着は抵抗過熱もしくは EB 蒸着
試料	ナノギャップ電極作製 (蒸着中 EM 法)	電極個数は要相談、ギャップ幅は約 1nm、蒸着は抵抗過熱もしくは EB 蒸着
試料	ナノギャップ電極作製 (単結晶)	ギャップ周りの電極金属の結晶性を単結晶に改善したナノギャップ電極。現在は Pt 電極のみ可能
測定	XPS 測定	
試料	導電性高分子電極	PEDOT/PSS による導電性電極作製技術
測定	プローブシステム	
装置	マテリアルプリンター	A4 サイズまで対応可能、液滴量は 10pl もしくは 1pl
装置	SPM	NCAPM, STM, SSFM などの測定可能
装置	両面シタクトアライナー	1.5mm まで可能、表面と裏面両方のあわせが可能
装置	反応性エッチング装置	φ20mm のピアホール作製実績あり

図 13. 共同研究リソースシートの例。

この結果、領域内で行われている共同研究の数を表6に、グループ間のつながりを図14に示す。論文や学会などですでに成果を発表済みの共同研究が51件、発表には至っていないが進行中のものが41件、合成に着手されたり装置の準備がはじまったものは25件の合計117件である。A01-A02 および A01-A03 間をはじめ、**班間の共同研究が多く**、分子の合成と計測および理論計算という**研究のループが期待通りに機能**していることを示している。

また、共同研究の内容は、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[学会発表 5件]、これまで素子の経験が全くない**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**に着実に結びついている。**A04 班と他の班との連携は**、「3. 審査員の所見において指摘を受けた事項への対応状況」で詳細を述べたとおり、分子素子のもつ特性を俯瞰し、異分野間の言葉の調整を行うための「**体系化シート**」と「**機能分類表**」の作成、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、人的交流**により、14件の班間共同研究が順調に進んでいる。

表 6. 共同研究の数。

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

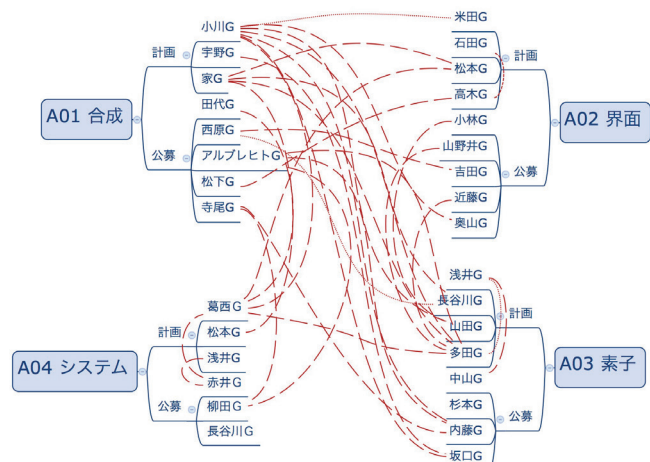


図 14. 共同研究によるグループのつながり。



## 7. 若手研究者の育成に係る取組状況（1 ページ程度）

領域内の若手研究者の育成に係る取組状況について記述してください。

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**」を組織した。これらの体制により、異種分野をつなぎ、将来の分子アーキテクトニクス発展に寄与する人材の育成と、若手の横のつながり強化を主眼に置いた取り組みを進めている。**次の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への参加旅費も総括班経費より支援している。

### 【若手ワークショップ】

「若手の会」を母体に**通常の成果発表・討論では得難いスキル**を獲得することを目標に、これまでに3回実施している。

**第1回ワークショップ**（平成26年6月13日、天童 35名）：**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。

**第2回ワークショップ**（平成26年12月19-20日、高等研15名）：**合成から情報科学にわたる幅広い分野**の学生が参加。とくに専門外の学生から希望が多かった「**単分子接合の電荷輸送**」および「**情報処理**」に関する基礎レクチャーに加え、共同作業によるシステム設計と実装コンペ（図15）、**論文執筆技術レクチャー**を実施。活発な質疑応答が行われ、本領域の特徴である**分子化学と情報科学の接点形成**に資するワークショップとなった。

**第3回ワークショップ**（平成27年6月1-2日、北海道大 9名）：**電子デバイス作製・計測実習**に、化学合成や計測分野の若手が参加。実際のデバイス作製を視野に入れた**新研究テーマへ取り組む際の意識障壁**を取り除いた。

### 【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16）。紹介記事は**若手研究者自身が執筆**している。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、広く積極的にプロモートしている。

### 【若手研究者発表表彰】

モチベーション向上のため領域会議（平成26年6月、天童）にてポスター発表賞を設け、7名の学生を表彰した。

### 【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**を形成している。

### 【受賞】

若手および学生の受賞が国際会議20件、国内会議20件と、若手が活発な活動を行っている。

### 【プロモーション】

准教授より教授への昇進 3名、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 1名（若手外国人）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15. 第2回ワークショップ「実装コンペ」の様子。



図16. Newsletter における若手紹介。

## 8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）（1 ページ程度）

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総括班研究課題の活動状況と併せて記述してください。

### 【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、一覧表にまとめ（図13）、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。クラウド型のためサーバー等の設備購入が不要かつ維持費も低コストながら、多人数双方向での音声付き動画通信が可能で、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、Pacifichem2015（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**を積極的に行っている。

### 【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 7 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、有効に利用されている。

表 7. 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
原子間力顕微鏡	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 夢田 G のサンプル測定
極低温スピン検出 STM	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 夢田 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 夢田 G)	単分子計測用の電極の整形。
計算シミュレーター	Mach1	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
バス式クライオスタット	CryoVac 製	千葉大学 (A03 山田 G)	共同研究観察用の STM に使用
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
Tis レーザーオシレーター	Mira900 / コヒーレント	物性研 (A02 高木 G)	共同研究試料を取り扱う光電子分光装置用

## 9. 総括班評価者による評価（2ページ程度）

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。

### 四国大学 学長 松重 和美 先生

科学研究補助金の中でも、“新学術領域”は新たな学問分野を開拓し、その進展を目指すもので、その推進の方法についても斬新性が望まれていると理解している。本「分子アーキテクニクス」は、これまでの単一分子エレクトロニクス研究に、ノイズやゆらぎの要素を加えて新しい情報処理に結びつけようとする挑戦的な取り組みであり、その推進方法も構成グループ内及び相互で特徴的な試みがなされている。例えば、本新学術領域の成否は、A04 班と他班との連携が重要になることを指摘していたが、これ迄の研究活動を見ていると、この課題を班員全員のものとして受け止め、セミナーや議論を重ねてひとつの方向性（シナプスの信号伝達）を提示し、それに向かって共同研究を積極的に推進している事が伺われ、この点は高く評価される。

より具体的な研究対象として、分子の電気伝導度計測は、これまではブレイクジャンクション法に代表される可動電極を用いた方法が主流であるが、「デバイス」を志向した際、固定電極を用いることが不可欠であることから、本研究グループでは、絶縁体上のグラフェン電極の作製とグラフェンに親和性の高いアンカー部を有する分子ワイヤーの合成を連携し、解決の糸口を見出しており、日本チームとして誇れる成果であるといえる。

一方、本新学術領域研究は、合成化学、電子工学、表面科学など異分野の研究者が参画する領域であり、これから本領域を牽引すると期待される若手研究者の育成も考慮して、異分野交流のための若手セミナーの開催、学生を他の研究室に派遣した共同研究などを実施している。特に、学生や博士研究員の活躍を「分子建築士」として英語版のニューズレターで世界に紹介する試みは興味深い。今後、国内外の若手研究者の実効的なネットワークが形成されることを期待したい。

また、領域主催の研究会では、一般的には予算の配分を受けたメンバーのみが参加する閉じた会が多くなる傾向があるが、本領域では、領域の外側に「分子アーキテクニクス研究会」を発足させ、領域外の研究者とも連携をとる試みも行なっている。この点は、常に外部の研究者の視線・評価を受けられる機会となり領域内研究者に一定の緊張感を持たせる効果もあると期待される。

以上、本領域研究の実施状況は、豊富な研究成果とともに新たな特徴ある取組みもなされており、ほぼ順調に推移していると判断している。

### 東京理科大学 研究推進機構総合研究院 院長・教授 福山 秀敏 先生

「単一分子の電気伝導度特性」はナノサイエンスの典型例として学術的にたいへん興味深いテーマであると同時に将来の分子性電子材料の可能性を探る際の基盤となる重要な課題である。しかし、これまでは分子と金属電極の接合部の構造脆弱性のため十分な電圧範囲における再現性のよい電流-電圧特性を示す実験結果が乏しく、従って学術的な議論に耐えうる研究は少なかった。本新学術領域「分子アーキテクニクス」では、有機分子と親和性のよいグラフェンを介して金属電極と接合するという着想のもとに加工技術を駆使した電極作成と適切に設計された分子ワイヤーの架橋構造を実現し、その結果、広い電圧範囲で再現性のよい電界効果トランジスター特性の確認に世界で初めて成功した。このことは、長年の夢（研究者によっては不可能と思われていた）「分子接合構造」実現への大きな一歩を踏み出したことを意味する。今後金属電極・グラフェン・分子からなる接合系全体での電界分布および電子状態について確固とした理解のもとに、輸送機構に関して理論面からの解析も進むことが期待される。

同時に、このグラフェン-分子架橋系の作製は、非線形な電流-電圧特性とノイズの付与によるシナ



プスの信号伝達システムを模倣することをひとつの目標とする本領域にとって、制御可能な素材を提供した点でも重要な成果であると評価される。

「分子組織体の協働機能の設計・計測」をめざす A04 班と「分子・界面構造・分子機能」を課題とする他班との連携をいかに進めるかが当初からの本領域の重要な課題であった。A04 班が無機半導体で先行している例を示し、分子系にいかん反映させるかという、異分野の異なる「ことば」を双方が咀嚼し新しい学問領域の創成につなげようとする強い思いを持った議論が、学生も交えて繰り返され、その中から、確率共鳴現象の発現や内部ノイズ発生の実証、積分型発火素子の作製など、領域にとって重要な共同研究の成果が創出されてきた。上記の安定な分子接合構造の実現を契機に、この連携共同研究活動に新しい展開が生まれことが期待される。

「分子接合系」という今までにない舞台で展開される現象の背後にある基礎学理を分野間連携によって追求することを軸に置いた積極的な領域運営が望まれる。

### **奈良先端科学技術大学院 特任教授 村井 眞二 先生**

本新学術領域では、電極に架橋された分子の非線形な電気伝導度特性とノイズの印加による確率共鳴現象を利用したパルス発生の実現をひとつの目標としている。すでいくつかの系で整流性や負性微分抵抗を示すことや、内部ノイズの発生源の可能性となる構造が確認されており、着実に進展している様子が見えてくる。この2年間は、可能性の高い分子と電極の組み合わせで、まずは計測を試みるという方策が中心であったと見受けられるが、真の意味でボトムアップによる構築物の創成のためには、こうした整流性やノイズの発現機構を明確にし、それを分子および電極-分子構造の設計指針に反映させることが重要である。特に、電気伝導度特性は、電極と分子の接続状況の影響を強く受けるが、経験に基づいている部分を設計原理にまで高める連携研究の推進を期待したい。

最終的な目標は、分子の協調的な振る舞いによる信号処理の実現にある。内部ノイズ源やネットワーク化などの要素技術も報告されており、合成班をはじめ各メンバーの役割を明確にし、適切なマイルストーンを設定して目標に到達することを期待する。

本領域は、合成化学から電子工学、表面科学などさまざまな分野の研究者が参画している。合成化学者が微細加工技術を習得したり、表面科学者が物質合成を経験するなど、単なる試料のやり取りを越えて、より積極的な異分野交流が進められており、それに基づく共同研究の成果がではじめていることは高く評価される。この領域では、共同研究の過程で、多くの基礎的事項や技術ノウハウが蓄積され、他の研究分野にも波及し、科学技術の底上げにつながると期待される。

## 10. 今後の研究領域の推進方策（2ページ程度）

今後どのように領域研究を推進していく予定であるか、研究領域の推進方策について記述してください。また、領域研究を推進する上での問題点がある場合は、その問題点と今後の対応策についても記述してください。また、目標達成に向け、不足していると考えているスキルを有する研究者の公募研究での重点的な補充や国内外の研究者との連携による組織の強化についても記述してください。

### 【領域運営の方針】

各研究計画は順調に進展しており大きな問題点はない。領域立案時から発足後、さらには公募班の参加を受けて、領域としては一貫して、他の分野への「越境」をうながす仕組みを構築してきた。各研究者が、そのことの重要性を認識し、各研究計画の推進に加え、共同研究を積極的に行うことで、本領域の発足無くしては得られない成果がではじめている。今後も、領域内外の共同研究の推進による新しい研究の芽を発掘し育てるため、また、領域としては、限られた時間で世界に先駆けて成果を創出すべく、これまでに構築した下記の仕組みを有効活用し、これまで以上に連携を密にする。

- (a) 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集約している。
- (b) 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、シーズを集約している。
- (c) 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ている。
- (d) 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するとともに、共同研究にかかる経費を総括班経費より支出することで積極的な共同研究の推進を促した。今後も若手を中心に共同研究にかかる支援を行う。

### 【領域研究の方針】

各研究項目は、順調に進展している。平成28年度から新しい公募班に参画いただくことになるので、各項目における方針を整理する。

A01 班：各計画を推進するとともに、2端子接続に加え、多端子の接続およびネットワーク化を有効にすすめるための分子設計を行う。

A02 班：各計画を推進するとともに、水や酸素といった実デバイスの特性に影響を与える因子について知見を得て、他班の研究にフィードバックする。

A03 班：各計画を推進するとともに、A02 班と協力し固定化電極の並列化技術の確立や A04 班、A01 班と協力して、内部ノイズ源の起源とその応用について研究を展開する。

A04 班：各計画を推進するとともに、体系化シート、機能分類シートを随時更新し、回路系からの要請事項を物質の機能へ当てはめることで融合研究の芽を広げる。

### 【総括班の計画】

総括班（X00）は、領域全体会議や総括班会議において領域全体としての研究方針を策定するとともに、その共通課題に向けて各計画班や公募班の研究を企画調整する。外部評価委員は本領域が開催するシンポジウムに参加、評価・助言を行う。

総括班内に、班長会議（運営委員会）、共同研究推進委員会、広報・国際会議企画委員会を引き続き設置する。会議を効率良く行うため、Web 会議システムを引き続き利用する。国際シンポジウム、ニューズレターを通じ、当該領域の海外の研究者に活動をひろく発信するとともに、随時、本研究に関する助言をいただく。若手育成の面では、海外の研究者とのつながりを作るため、若手企画の国際研究会の開催をサポートする。

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3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されている。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**が生まれている。領域終了後も、本分野の研究討論、若手育成の場として研究会が継続すべく、興味深い成果を発信することを領域の責務と考える。

総括班としては、下記の活動を計画している。

#### 平成 27 年度

**主催会議／研究会**：領域全体会議（4月 千葉にて開催済、10月 京都にて開催予定）

第1回国際会議（8月 知床にて開催予定）

国際シンポジウム2回（12月 **Pacificchem2015** ハワイ、および **NOLTA2015** 香港）にて開催予定）。

国際ミニワークショップ（3月 大阪で開催予定）。

**共催会議／研究会**：10月 分子アーキテクトニクス研究会、京都にて開催予定。

11月 物性科学領域横断研究会 東京にて開催予定

**若手ワークショップ**：6月 札幌で開催済、10月および2月に若手主導で開催予定

**その他**：班長会議、総括班会議を web 会議システムも利用して開催

年次報告書を作成。国際会議の内容を元に、英文書籍を発刊予定（Springer 社）。

#### 平成 28 年度

**主催会議／学会**：領域全体会議（6月大阪、10月場所未定 にて開催予定）。

国際ミニワークショップ（3月 東京で開催予定）。

**共催会議／学会**：10月 分子アーキテクトニクス研究会 場所未定

11月 物性科学領域横断研究会 場所未定

**若手ワークショップ**：3回 うち1回を国際研究集会とする。

**その他**：班長会議、総括班会議を web 会議システムも利用して開催。年次報告書を作成。

#### 平成 29 年度

**主催会議／学会**：領域全体会議（6月、10月場所未定 にて開催予定）。

第2回国際会議 2月（場所未定） 総括となる国際会議を開催。

**共催会議／学会**：10月 分子アーキテクトニクス研究会 場所未定

11月 物性科学領域横断研究会 場所未定

**若手ワークショップ**：3回 うち1回を国際研究集会とする。

**その他**：成果報告書を作成。成果を整理して英文書籍を出版。

#### 【若手育成、人材育成の方針】

学生の中から実行委員を選出し、**国外の若手ともネットワークを形成**することを行うことを視野に入れて、若手の会の企画を自ら立案することにより**企画・運営・国際力**を養う。領域内の若手育成担当は、メンバーが異分野から構成されていることに配慮し、適切な助言を与える。

#### 【広報の方針】

ニューズレター、ホームページを通じ成果の発信を行うことに加え、共同研究の輪を広げ、この分野のさらなる発展のため、差し障りのない範囲でシーズおよびニーズを公開するとともに、トピックスごとのワークショップを開催し集中討論を行う。

また、本領域の総括として、**教科書の出版**を行う。単に結果や技術の紹介でなく、背景にある物理、化学を深く掘り下げた内容とすることを旨とする。そのための準備を開始する。