

領域番号	2509	領域略称名	分子アーキテクト
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		
領域代表者名 (所属等)	夔田 博一（大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授）		
領域代表者 からの報告	<p>(1) 研究領域の目的及び意義</p> <p>本研究領域では、精密に設計された分子を、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。具体的には、分子設計・合成、表面物理、単一分子物性計測、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し、以下の4つの目標を達成して、それぞれの分野の学術水準の向上はもとより、単分子エレクトロニクス研究の新しい方向性を世界に先駆けて打ち出し、学問領域の創成を行うとともに、それを担う人材の育成を目指した。</p> <p>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。</p> <p>目標2：非対称および非線形な電気伝導特性、クーロンブロッケード特性、量子伝導と熱活性伝導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。</p> <p>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。</p> <p>目標4（領域の目標）：単分子接合の特性を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、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。</p>		
	<p>(2) 研究成果の概要</p> <p>総括班では、個々の研究者の強みを体系化し、領域の目標と戦略を明確にした。共同研究推進委員会を設置し、戦略をもとに共同研究を企画・調整・加速した。その結果、協働現象の発現（目標4）として、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確認した。また、カーボンナノチューブとポリ酸（<math>\text{H}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}</math>：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た。シナプスの信号伝達モデルを構築し、シミュレーションによりその原理を実証するに至っており、分子リザーバコンピューティングへの可能性を拓いた。明確な戦略の提示に基づく共同研究の推進は、キャリアおよびスピン注入に対する接続様式の設計指針の導出（目標1）や、分子ダイオードの設計指針の導出（目標2）、磁場印加による抵抗変化の確認（目標3）など、各目標を達成し、分子エレクトロニクス分野の進展につながる技術ノウハウと知的資産の蓄積に大きく貢献した。合成班の大学院生が微細加工技術を習得するための実習プログラムを実施するなど、共同研究を担う人材の育成にも工夫を凝らした。こうした若手研究者が、領域</p>		

	内外の研究者と領域終了後も共同研究の芽を議論する場として、領域外に「分子アーキテクニクス研究会」を発足するなど、学術創成の基盤を構築した。
--	---

科学研究費補助金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、概ね期待どおりの成果があったが、一部に遅れが認められた)
	<p>本研究領域は、分子接合の特性をうまく生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の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とを目的としている。</p> <p>研究領域内に設定した分類体系のうち、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。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た系では、素子の内在ノイズを利用した確率共鳴を初めて確認することに成功するなど、単分子に基づく様々な新機能発現を目指す研究において、各計画研究の有機的な連携が実り、個々としては大きな成果が得られている。</p> <p>また、このように新しい現象を見出し、モデル化を行い、シミュレーションを通じた原理の提示にまで至っていることは、分子アーキテクニクスという分野の確立に向けて、今後の発展への基盤が整ってきたという点で評価できる。</p> <p>一方、当初の目標であった、従来の分子エレクトロニクスの概念を超える分子の構造化による新機能創成という意味での成果は明確でなく、世界に先駆けて提案されたデバイス創造には至っていない。今後、本研究領域で共有した課題を基盤として、分子アーキテクニクスの名に相応しい学問分野の確立を期待する。</p>