

平成 22 年 5 月 24 日現在

研究種目：特定領域研究

研究期間：2005～2009

課題番号：17069005

研究課題名（和文） ナノリンク分子の電気伝導

研究課題名（英文） Electron transport through a molecule at metal electrode

研究代表者

川合 眞紀 (KAWAI MAKI)

東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授

研究者番号：70177640

研究成果の概要（和文）：

電極に接合（コンタクト）した分子、ナノリンク分子の電気伝導を明らかにするために、A01 班「ナノリンク分子の電子輸送計測」、A02 班「ナノリンク分子の局所電子状態の解明」、A03 班「ナノリンク分子系の構築」、A04 班「ナノリンク分子の合成」、A05 班「ナノリンク分子の理論」の5つの計画研究に公募研究を加えた研究領域を組織し、研究を主導した。研究会や国際会議の企画運営、物品の支援などにより領域内の連携研究を推進した。

研究成果の概要（英文）：

In order to uncover the basic mechanism underlying the carrier transport through a molecule linked to metal electrodes (called as “nano-linked molecule”), we organized five core research units and encouraged these units to proceed cooperative researches. The objectives of these units are “measurement of electron transport through the nano-linked molecule (A01)”, “revealing the local density of states of nano-linked molecule (A02)”, “exploring the chemical groups to build a good contact for nano-linked molecule (A03)”, “synthesis of new nano-linked molecule (A04)” and “establishment of the theoretical framework to describe the transport properties of nano-linked molecules (A05)”.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2005 年度	3,900,000	0	3,900,000
2006 年度	6,300,000	0	6,300,000
2007 年度	6,300,000	0	6,300,000
2008 年度	7,200,000	0	7,200,000
2009 年度	8,100,000	0	8,100,000
総計	31,800,000	0	31,800,000

研究分野：表面科学、ナノサイエンス

科研費の分科・細目：ナノ・マイクロ科学・ナノ構造科学

キーワード：表面・界面、化学吸着、金属単結晶表面、トンネル顕微鏡、光電子分光、分子エレクトロニクス、第一原理計算、固定電極

1. 研究開始当初の背景

Mark Reed と James M. Tour らによる「電極に架橋した1個のエチニレン・フェニレンオリゴマー分子にスイッチング機構をもたせた」という実験を機に「分子エレクトロニクス研究」も1個の分子を対象とする時代になった。これら先駆的結果の再現性の問題に端を発し、電極に架橋した分子の大きな電気伝導特性の微視的機構解明が急務とされている。電極に接地した分子の伝導物性では、分子と電極の接合が重要な役割を担うにもかかわらず、これまでこの接合（コンタクト）をあからさまに取り上げた議論はなおざりになっていた。

多くの分子・電極接合には硫黄原子を含む分子を金表面にアンカーする技術を用いている。これはものであるが、電気的な接続は必ずしもよくない。これに置き換わる電極基板とアンカー原子・官能基間の接合系の系統的な探索と構築が切望されている。

分子を電極に架橋して形成される「分子素子」には高い関心が寄せられているが、将来の実用デバイスとしての地位を得るには、基本的な制御技術を確立する必要がある。多様な機能を持つ分子を自在に合成する有機化学の技術、高度に発達したナノメートル領域の半導体微細加工技術などの既存分野の発展と併せて、分子と電極との接合についての系統的な研究がなされれば、「一分子エレクトロニクス研究」に新たな設計指針を導入することができ、安定した実用デバイスへの開発研究にも大きな道しるべとなることが期待される。

2. 研究の目的

電極の原子に接合した分子、すなわち「ナノリンク分子」の電気伝導物性を解明するためには、接合部の原子配列や局所的な電子状態、電子輸送過程における多体効果を取り込んで考察することが不可欠である。本研究は、今までブラックボックスのままであったナノリンク分子電極接合の電気伝導に焦点を絞り、物性物理（実験＋理論）、表面科学、合成化学の気鋭の研究グループが総力を結集して、基本的で重要な問題に直接取り組み、分子エレクトロニクス研究等周辺研究分野に基礎的な知見を与えることにある。

3. 研究の方法

「ナノリンク分子の電気伝導」を解明するために、A01班「ナノリンク分子の電子輸送計測」、A02班「ナノリンク分子の局所電子状態の解明」、A03班「ナノリンク分子系の構築」、A04班「ナノリンク分子の合成」、A05班「ナノリンク分子の理論」、5つの計画研究を設定した。また、計画研究を補完するために、各班それぞれ数件の公募研究を募り、計画班および公募班からなる組織を構築した。領域内での連携研究を進めるため、班内での研究会、領域全体での研究会、国際シンポジウム、連携研究に対する物品のサポート、海外での国際会議への参加費用のサポートを行った。また、領域ホームページにおいて、研究資料の公開や新しく合成されたナノリンク分子の情報提供を行った。

4. 研究成果

(1) 領域会議

2005年12月に宮城県仙台市にてキックオフミーティングを開催した。伝導電子をナノリンク分子の電気輸送における伝導電子と分子振動のカップリングについてミニシンポジウムを行った。2006年5月には、公募研究班を含めた第一回の領域会議を東京大学駒場キャンパスにて開催した。2007年3月に東京大学柏キャンパスにて領域会議を開催し、成果を取りまとめるとともに、研究領域の方針について確認を行った。2007年8月には、東京大学本郷キャンパス内小柴ホールにて、国際ワークショップ、The international workshop on “Electron transport through a linked molecule in nano-scale” を開催した。国内1名・海外7名の招待講演者を招聘し、ナノリンク分子の電気伝導について活発な議論を行った。また、3日間の参加者は夏休み休暇にもかかわらず300人以上にのぼり大変盛況であった。2008年7月に北海道函館市で新規公募した公募班メンバーとの領域会議を開催した。領域発足以降の3年間の成果を基に後期の研究方針と連携研究の方向を議論した。2009年3月に名古屋大学にて、領域会議を行った。2009年5月に宮城県仙台市で、領域会議を開催した。4年間の研究成果について議論を行い、最終年度に向けた成果取りまとめについて討論を行った。最終成果報告会として、2010年3月に東京大学柏キャンパスにて領域会議を行い、5年間の成果が発表された。

(2) 連携研究

連携研究の推進により、多くの成果が上がっている。連携研究による主な論文を以下にあげる。

M. Sogo, Y. Sakamoto, M. Aoki, S. Masuda, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, C60 adsorbed on platinum surface: A good mediator of metal wave function. *J. Phys. Chem. C* 114, 3504-3506 (2010).

T. Kumagai, M. Kaizu, S. Hatta, H. Okuyama, T. Aruga, I. Hamada, Y. Morikawa, Symmetric hydrogen bond in a water-hydroxyl complex on Cu(110), *Phys. Rev. B* 81, 045402 (2010).

Norio Okabayashi, Magnus Paulsson, Hiromi Ueda, Youhei Konda and Tadahiro Komeda, Inelastic tunneling spectroscopy of alkanethiol molecules: high resolution spectroscopy and theoretical simulations, *Phys. Rev. Lett.*, 104, 2010, 077801-1-4.

Hyung-Joon Shin, Jaehoon Jung, Kenta Motobayashi, Susumu Yanagisawa, Yoshitada Morikawa, Yousoo Kim, and Maki Kawai, State-selective dissociation of a single water molecule on an ultrathin MgO film. *Nature Materials* 9 (2010) 442-447.

Y. Ie, T. Hirose, A. Yao, T. Yamada, N. Takagi, M. Kawai and Y. Aso, Synthesis of tripodal anchor units bearing selenium functional groups and their adsorption behavior on gold. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 11 (2009) 4949-4951.

N. Tsukahara, K. Noto, M. Ohara, S. Shiraki, Y. Takata, J. Miyawakai, M. Taguchi, A. Chainani, S. Shin, N. Takagi and M. Kawai, Adsorption-induced switching of magnetic anisotropy in a single iron(II) phthalocyanine molecule on oxidized Cu(110) surface. *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009) 167203-1-167203-4.

Y. Tominari, M. Uno, M. Yamagishi, Y. Suzuki, A. Wakamiya, S. Yamaguchi,

and J. Takeya,

Large-domain organic crystalline films for field-effect transistors, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 1091,123-128 (2008).

T. Kawanishi, T. Fujiwara, M. Akai-Kasaya, A. Saito, M. Aono, J. Takeya, and Y. Kuwahara, High-mobility organic single crystal transistors with submicrometer channels, *Appl. Phys. Lett.* 93, 023303 (2008).

M. Ohara, Y. Kim, S. Yanagisawa, Y. Morikawa and M. Kawai, Role of molecular orbitals near the Fermi level in the excitation of vibrational modes of a single molecule at a scanning tunneling microscope junction. *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 136104.

S. Masuda*, Y. Koide, M. Aoki, and Y. Morikawa, Local electronic properties induced at the molecule-metal interface. *J. Phys. Chem. C*, 111, (2007) 11747-11750.

M. Kiguchi, S. Miura, K. Hara, M. Sawamura and K. Murakoshi, Conductance of Single 1,4-Disubstituted Benzene Molecules Anchored to Pt Electrodes. *App. Phys. Lett.*, 91, 2007, 053110.

Kazuhiro Oguchi, Masashi Nagao, Hirobumi Umeyama, Tetsuo Katayama, Yoshiyuki Yamashita, Kozo Mukai, J. Yoshinobu*, Kazuto Akagi and Shinji Tsuneyuki, "Regioselective cycloaddition reaction of alkene molecules to the asymmetric dimer on Si(100)c(4x2)", *J. Am. Chem. Soc.* 129(2007) 1242.

H.S. Kato, M. Wakatsuchi, M. Kawai*, J. Yoshinobu, "Different adsorbed states of 1,4-cyclohexadiene on Si(001) controlled by substrate temperature", *J. Phys. Chem. C* 111 (2007) 2557-2564.

K. Yamada, T. Okamoto, K. Kudoh, A. Wakamiya, S. Yamaguchi, J. Takeya*, "Single-crystal field-effect transistors of benzoannulated fused

oligothiophenes and oligoselenophenes”, Applied Physics Letters 90 (2007) 072102.

赤木和人、常行真司、吉信淳, “シリコン表面における環化付加反応”, 「表面」vol.46, No.6 (2008).

この他にも、A04 班山口らと A03 班吉信らの新規ナノリンク分子と銅電極の研究、A04 班杉浦らと A01 班酒井らによる新規ナノリンク分子のブレイクジャンクションによる電気輸送計測、A04 班伊与田ら、家らと A03 班木口らの共同研究、A03 班谷口らと A04 班伊与田らの共同研究が行われた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

本研究では、特定領域「ナノリンク分子の電気伝導」について、領域を組織する各研究班の研究を総括し、研究方針の確認と連携研究の推進を行うことに主眼を置いている。研究グループとしての学術的研究活動を行っていないため、論文、学会発表等の業績はない。ただし、連携研究を推進した結果 4 に示した成果があがった。

[その他]

ホームページ等

<http://www.surfchem.k.u-tokyo.ac.jp/tokutei/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

川合 眞紀 (KAWAI MAKI)
東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授
研究者番号：7 0 1 7 7 6 4 0

(2) 研究分担者

増田 茂 (MASUDA SHIGERU)
東京大学・大学院総合文化研究科・教授
研究者番号：5 0 1 7 3 7 4 5

吉信 淳 (YOSHINOBU JUN)
東京大学・物性研究所・教授
研究者番号：5 0 2 0 2 4 0 3

山口 茂弘 (YAMAGUCHI SHIGEHIRO)
名古屋大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号：6 0 2 6 0 6 1 8

塚田 捷 (TSUKADA MASARU)
東北大学・原子分子材料科学高等研究機構・教授
研究者番号：9 0 0 1 1 6 5 0