


原子スケール分光による分子科学の新展開

	研究代表者	理化学研究所・開拓研究本部・主任研究員 金 有洙 (きむ ゆうす) 研究者番号:50373296
	研究課題 情報	課題番号: 22H04967 研究期間: 2022年度~2026年度 キーワード: 走査プローブ顕微鏡、単一分子、顕微分光

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

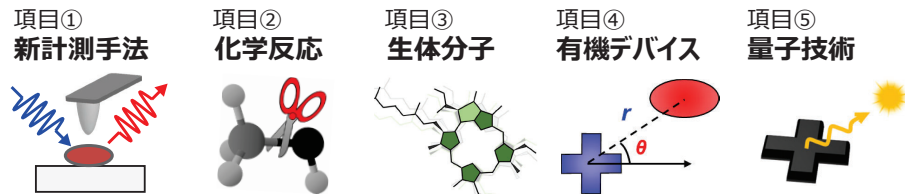
物質の構造と性質は密接な関係がある。物質を構成する最小の単位である原子や分子のサイズはナノメートルスケールである。ナノメートルとは髪の毛の太さ(0.1ミリメートル)の約10万分の1という非常に小さなサイズであり、このような微小な領域において構造を分析すること、物質の性質を測ることを両立するのは困難であった。

研究代表者らは走査トンネル顕微鏡(STM)と呼ばれる、原子スケールで尖った針を用いることでナノスケールの構造を観察できる顕微鏡と微弱な光を検出する光学技術などを組み合わせることで、独自のナノ計測手法を世界に先駆けて開発してきた(図1下段)。

本研究では、その独自のナノ計測手法を更に発展させ、単一分子のナノ構造と性質を直接に結び付けることで新しい分子科学を開拓する(図1上段)。具体的には、これまでよりも更に高精度な計測技術を確立し(項目①)、多様な基礎研究へと展開し(項目②~④)、さらには新たな機能を分子に発現させることを目指す(項目⑤)。これらの研究を通して、物質科学のフロンティアを広げ、化学反応、生物学、有機デバイス、量子技術など幅広い分野へ波及する、未踏研究領域の基礎学理を確立する。

本研究提案では

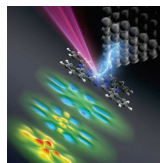
極限的なナノ計測手法を駆使して  
**構造を自在に制御×新たな性質を引き出す**



新たな分子機能を創出するための基本原理を解明し、  
多様な分野に波及する新しい分子科学を開拓

これまでの研究では

STMと光を組み合わせ  
**構造を観る×性質を測る**  
極限的なナノ計測手法の構築



世界最先端の成果

Kimura et al., *Nature* 570, 210 (2019).  
Jaculbia et al., *Nat. Nano.* 15, 105 (2020).  
Zhang et al., *JACS* 143, 9461 (2021).  
Imada et al., *Science* 373, 95 (2021).  
Imai-Imada et al., *Nature* 603, 829 (2022).

図1 本研究提案の概要

●新たな計測基盤技術の確立と新たな分子科学の開拓

これまで開発してきたSTMと光学測定を組み合わせたナノ計測手法に原子間力顕微鏡(AFM)の機能を付与し、新たな計測基盤技術を確立する。

AFMは鋭い針と測定対象の間に働く微小な力を検出することで動作する顕微鏡であり、STMよりも更に詳細にナノ領域を観ることが可能である。例えば、STMでは観ることができない分子内における原子間の結合(分子骨格)を観ることが出来ると知られている。

AFMを用いることで測定可能な対象を広げることも可能である。電流の検出に基づいた顕微鏡であるSTMは、その原理上、電気を流す性質がある物質しか測定対象に出来ない。一方で、微小な力を検出するAFMは電気を流す必要がないことから、絶縁体も測定対象になる。AFMをベースとしたナノ計測手法は新たな分子科学を開拓していく上で重要なツールになると期待している。

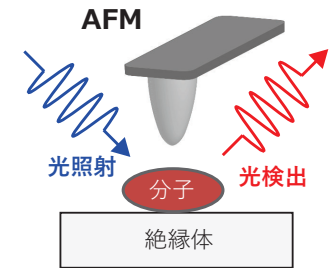


図2 AFMと光を組み合わせた新規な計測基盤技術の模式図

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●新たな化学反応制御手法の確立

分子は、原子同士が結びつく化学結合によって組み上げられている(図3)。この1つ1つの結合を狙って作成したり、切り離したりすることは化学者にとって重要な目標である。

本提案では、結合を鮮明に観ることができるAFM技術と、これまで取り組んできた光学技術を駆使して、新たな反応制御手法を確立する。

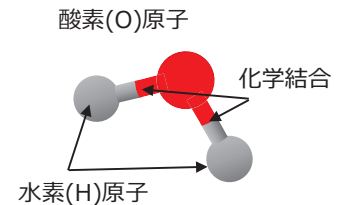


図3 水(H<sub>2</sub>O)分子を構成する原子と化学結合の模式図

●生体分子への展開

これまでの手法では測定可能な分子の種類が限られていた。この制限を取り払い、生体分子を含む多くの分子を測定対象にするための新たな試料作製手法を確立する。

生体分子は図4に示すように分子骨格が柔軟に動く。この構造の柔軟さと分子の性質を結びつけることで、生体分子科学の新たな基軸を開拓する。

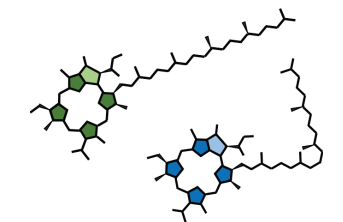


図4 柔軟な構造を有する生体分子

●有機デバイスの基礎学理構築

有機発光ダイオード(有機LED)や有機太陽電池などの有機分子を用いたデバイスは非常に注目を集めている。これらのデバイスでは、複数の分子がナノスケールで近接しており、分子の間に働く相互作用がデバイス性能を決める上で重要である。

本提案では、複数の分子間における配置(構造)に注目し、分子間の配置と性質を結びつける研究を行うことで、有機デバイスのモデル実験系において基礎学理の構築を目指す(図5)。

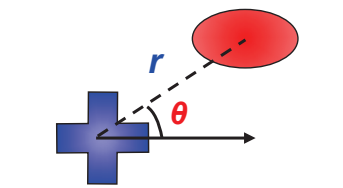


図5 分子間の配置

●分子を用いた新規な量子技術の構築

ナノスケールの世界の物理現象を記述する量子論では、光を「光子」と呼ばれる粒子として捉える。この光子を1つずつ発生させることが可能な、「単一光子源」は未来の量子通信において重要である。

本提案では、分子の構造を光を用いて瞬間的に制御することで、分子に新たな単一光子源としての機能を付与することを目指す。