

## 研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名: 精密分子設計に基づくナノ電子デバイス構築

2. 研究代表者: 田中 一義 (京都大学大学院工学研究科 教授)

### 3. 研究概要

本研究は、シリコン電子素子では達成できない、ナノ電子デバイスである単一分子トランジスタを有機・無機融合分子系に基づくボトムアップ方式によって、真の意味で作製することを目指している。そのため(1)有機・無機融合物質から構成されるボトムアップ型のナノ構造体を精密かつテーラーメイド的に設計・合成する基礎技術確立すること、(2)ナノ構造体の動作環境を整え、動作確認を行うこと、(3)この研究では電子ナノ計測が不可欠であり、さらに有機/金属界面での電子授受の制御を行うこと、を三つの柱として、研究を進めている。

### 4. 中間評価結果

#### 4 - 1. 研究の進捗状況と今後の展望

分子ワイヤー、分子ドット、電極アンカーなど、パーツの合成は進んでいる。特に、分子ワイヤーについては、96量体(37.2 nm)もの、平面性の高い被覆型長鎖オリゴチオフェンが合成されている。また、ポリシラン R-Si-Au のように Si-Au の直接の結合を実現していること、Si 電極の上に、AFM を用いた局所陽極酸化により、特定の場所に特定の有機分子を固定化したこと、メッキ法により 10nm 以下のナノギャップ電極を作製したことなど、各部分においては多くの成功を収めている。しかし、全体としてのデバイス形成はまだできていない。周波数変調の原子間力顕微鏡(FM-AFM)、非接触原子間顕微鏡(NC-AFM)およびケルビンプローブ原子間顕微鏡による、電極とワイヤーの接続の可視化、および局所的電位測定技術の整備、電極と分子ワイヤーの接合に関する量子化学計算、および TranSIESTA-C による伝導度の計算の実行、伝導におけるフォノンの効果の研究の準備など、計測技術や理論的な支援は十分に達成されている。

#### 4 - 2. 研究成果の現状と今後の見通し

オリゴチオフェン 96 量体合成、メッキナノギャップ電極、グラフ化、FM / AFM法による分子系の高感度高分解能電磁計測法、有機分子ワイヤー金電極表面への吸着状態の電子状態計算など、パーツがほぼでき上がってきたので、それらを組み合わせる段階にある。金属ナノギャップ電極の作製は、メッキ法の適用によって、ほぼ可能になっている。そこに機能を有する分子を橋渡しして電子の授受をさせるのであるが、この段階を制御よく行うことはなかなか困難な状況であると思われる。しかし、今後の研究の進展によっては克服される可能性もあるので、今後の研究に期待したい。

#### 4 - 3 . 今後の研究に向けての助言・提言

単一分子デバイスの作製に関わる基本的な問題、たとえば分子 金属接合に関わる電極問題、ナノスケール界面制御、電子移動の物理など、本質的な問題を扱う研究の成果は予期せぬ波及効果が期待される。また電極問題として研究課題チームを超えた領域共通の取り組みがみられ、今後も化学・物理の共同作業の中から新しい方向が生まれることが期待される。何が困難であるかという根本的な理解が得られつつあるので、そこを集中的に攻撃する仕組みを検討すると良いとも考えられる。

#### 4 - 4 . 戦略目標に向けての展望

目標はボトムアップ方式のナノテクの極めつけであるが、目的に達するためには、いくつかの困難に直面することがあると思われる。特に、科学の裏付けが必要なものについては、デバイス化を急がずに研究を進めていただきたい。そして二極での電極でまず実験を完成することを目指した方がよいと思われる。世界的にも未完成の戦略目標であり、わが国での研究進展をぜひ実現していただきたい。

#### 4 - 5 . 総合的評価

目的がある意味では非常に明確なだけ、成功か不成功かの2者択一のように見える。しかし、その目標達成を目指してのそれぞれの受け持ちのところでは、確実に技術の向上と結果が出ている。領域内での関連チームとの連絡をよくとり、特に電極問題については、関係者の意見を参考にしながら研究を進めるのが良いと思われる。このプロジェクト研究を進めたことによって初めて問題点が色々浮かび上がってきた大変大きな問題をいくつも抱えているが、問題点を浮き彫りにすることは、大変重要である。プロジェクト期間を超えた中長期的観点からも、本研究を推進すべきである。今後の分子デバイスの可視化と動作確認に期待したい。