

分子・ハーモニック構造の構築と電磁場制御デバイスの開発

融合研究機関：(財)物質・材料研究機構

(財)通信総合研究所

研究総括責任者：木村 克美（(財)物質・材料研究機構ナノマテリアル研究所ナノデバイスグループ特別研究員）

I 研究の全体計画

1. 研究の趣旨

近年の世界経済の成長が、半導体素子の微細化に基づくデバイスの大容量、高速化とそれによって実現される多様なアプリケーションやビジネスモデルの出現という流れに基づく情報通信の急速な発展に支えられていたことは周知の事実である。しかしながら、この流れには、大きな壁、限界が立ちだかっている事も事実である。半導体の超微細化の限界、すなわち発熱やキャリアの相関によって、これまでのような素子概念では動作しないことが明らかになっているのである。この限界を打ち破るために、分子系の材料を組み上げていって素子を作成しようとするナノテクノロジー研究が世界的に注目されている。

ナノテクノロジーは、材料を削っていくという従来の半導体デバイス加工技術ではなく、積み木のように原子や分子を組み立てていく方法によって様々な構造物を作り出そうという技術である。半導体の集積化が「トップダウン方式」であったのに対し、原子や分子を積み木のように積み上げていくことによって作ろうという「ボトムアップ方式」に作成技術の体系を変えようとするものである。材料やデバイスの作成技術が変わることによって、結果として得られる特性も従来の概念から大きく変化する可能性を秘めている。これが、ナノテクノロジーが21世紀の「キーテクノロジー」、次世代の「産業革命」といわれている理由である。電子デバイスに関するナノテクノロジーでは、より明確なモチベーションがある。それは、従来のシリコン技術の限界が見えてきていることであり、この限界を突破する方法として考えられたのがナノテクノロジーである。中でも、分子系の「ボトムアップ方式」による電子デバイス作成技術、分子ナノエレクトロニクスはこの代表的研究領域として世界的に注目されている。分子ナノエレクトロニクスは、分子ワイヤーや電子を蓄え、電子の流れを制限する分子を組み上げてデバイスを作るもので、ナノサイズの生物系のタンパク等の生体分子が、アミノ酸からDNAをレプリカとして積み上げていくことに似ている。特徴的なことは、従来あった分子、半導体、金属、生体分子などの

間の素材の差が縮まり、複合的な技術になると推定されていることである。まず、はじめに積み木のように原子や分子を組み立てていく方法の開発が重要で、各方面で様々なアイデアが提出されている。

有機分子は、単独で機能を有するだけでなく、個々の分子を組織化することで単独の分子では出せなかった新しい機能をも生み出すという性質があることが知られている。例えば、DNAやタンパク質に代表される生体システムも個々の部品分子の集合体であり、その多様な組み合わせ方法によって高度な機能を実現している。これらの分子の組織化は、水素結合に代表される選択的な非共有性分子間相互作用によるものであり、このような選択的分子間相互作用を人工的に取り込み、個々の分子を“思い通りに”組み上げて多機能分子組織体を実現させようとする研究（超分子化学）は従来から行われている。この超分子化学の最近の進歩により、複雑な分子集合体も制御できるようになってきたが、これらの研究は主に溶液中で行われており、多機能性分子集合体を構築しても、それをどうやって基板上に配置してデバイス化するかという問題点がある。

本研究課題は、有機合成法によって様々な特徴を持った有機分子を作り、真空中の基板上で組み立てるという研究である。従来のエレクトロニクスとのインターフェースを考えると、半導体や金属基板のナノサイズの電極上に組み立て、電子や電磁場の入出力を行う必要がある。このような研究を行うためには、超高真空技術、半導体プロセス技術、分子合成技術、ナノ構造評価技術、高分子設計技術などの分野の融合的研究を行う必要があり、制度や研究組織を超えた取り組みを推進しなければならない。また、分子ナノエレクトロニクスは従来のデバイス技術を凌駕する可能性を持っており、そのキーテクノロジーを研究し、知的所有権を確保することが急務である。

設定した研究目標を実行するために、必要な研究課題を抽出して前半の3年間の研究と後半の研究を設定した。前半の研究は、素子作成のための要素技術とナノ領域で起こる現象の測定・解析を中心に据え、後半は、それらの技術を集積してデバイス開発を目指す。また、次のように研究課題を要素技術という観点から3つに分けて研究を行う。

(1) モレキュラー・アンサンブルによる分子ハーモニック構造の構築に関する研究

分子を様々な機能ユニットとして作製し、それを真空中に導入して基板上で組み立てる技術の開発、およびその光学特性測定からデバイス化の可能性を探る。

(2) 分子ナノエレクトロニクスの研究

1と3を統合して、光制御可能な単電子トンネル素子などの光・電子機能を持つデバイス構造を組み上げ、新規のデバイス化の可能性を探ることである。

(3) ナノメーター平均場の中の電子と電磁場の相互作用に関する研究

金属表面に微小な電極を作成する技術の開発を行うとともに金属界面に置いた特殊な構造の分子に微小な探針で電子注入し、発生する電磁場との相互作用を測定してデバイス化の可能性を探る。

前半は、(3)については様々な構造の分子について、STM探針による電子注入による単分子発光の測定とその解析を行った。(1)については、電極間に設置して機能を発現させる分子・ハーモニック構造を、分子の自己組織化によって組み上げるための分子を作製した。(2)においては、膜構造などで単電子トンネル素子の動作確認を行うとともに、基板上に自己組織化によって分子を組み上げる実験を行った。また、共通の研究上必要な要素技術として、作製された分子機能ユニット(高分子など)を真空中に導入する方法の開発、絶縁体表面におけるナノ構造の作成とその評価技術が必要であり、それぞれ(1)と(2)で行った。これらの研究は、従来の技術では対応できないため、装置の設計から研究を行う必要があった。

後半の研究課題では、このような研究成果を統合していく。(3)において、表面吸着の弱い、選択的自己組織化を起こす分子を作り、(2)において作成したナノメーターサイズの電極構造を持つ基板を利用し、(1)においてそれらを統合し上記のイメージのような素子を開発する。

2. 開放的融合研究の概要

【1】研究の概要

1. モレキュラー・アンサンブルによる分子ハーモニック構造の構築に関する研究

分子一個に出来る限りの機能を組み込んだ分子機能ユニットを有機合成法によって作製し、基板上で自己組織的にデバイス構造などの高次構造を作製することを目的とする。具体的には、ポルフィリン分子などの平面構造の分子に足のような側鎖を付けた分子やコアシェル構造を持つ dendrimer 分子などの機能ユニットを作製する。この機能ユニットの高次構造を作製し、光・電子特性の計測を行いデバイスの可能性を探る。さらに、デバイスを構築するために、作製された分子機能ユニットを真空中に導入する方法の開発を行う。最終的には、物質・材料研究機構側で供給する走査プローブ顕微鏡技術や数ナノメートルレベルの電極構造作製技術との融合により、新たな分子ナノエレクトロニクスを開拓することをねらいとする。

具体的には、以下のテーマについて研究を行う。

- ① 分子構造に関する研究
- ② 分子ハーモニック構造の光学的特性

③ 分子堆積のための新手法の開発

2. 分子ナノエレクトロニクスの研究

本プロジェクトの最終的目標は、単一分子デバイスを構築することである。ここで単一分子デバイスとして定義するのは、金属基板上に電極構造を作り込み、機能性の分子ユニットと外界を電子的に連結できる素子構造、すなわちハイブリッドな素子構造である。この目的の実現のためには、原子レベルでの制御された基板調製、機能分子の精密配列、極微細な電極の作製およびその分子との結合、など多くの要素技術の開発が不可欠となっている。さらに機能性発現の機構を理解するためには基板から分子に及ぼす作用、分子間の作用などを明らかにする必要がある。以上のような観点から本サブテーマの研究課題として、次の3点を挙げる。

① 有機分子を用いた単一電子トンネル素子の試作

② 金属基板上での分子自己組織化制御

③ 極微電極の作成と分子ナノ電子素子の開発

まずは有機分子の高機能性を利用して、有機分子が単一電子トンネリング素子の中間電極として機能することを示す。特に極簡便な積層型SET素子を構築し、光スイッチング機能の発現を目指す。さらに次に発展系として基板上に分子・電極を配置したハイブリッド構造体を構築し、ナノスケールでの機能性素子創製を目指す。

3. ナノメーター平均場の中の電子と電磁場の相互作用に関する研究

単一量子構造を作製することは、現在の物理・科学およびナノエレクトロニクスの重要な課題である。分子系の量子力学的特性は単一分子の特性を明らかにすることにより、有機分子のエレクトロニクスという基礎的な過程を明らかにするのみならず、分子ナノテクノロジーの原理を示すという点においても重要である。しかし多くの点で未解明であり、電荷および励起子の伝搬、光学的相互作用および分子の電子的性質を明らかにする必要がある。分子エレクトロニクスの分野では、個々の分子にどのように電気的に接続するか、入出力の回路をどのように組み立てるかの大きな問題がある。現時点では、未だ原理的な点を明らかにするかに止まっており、電荷の伝搬、光と電子の相互作用をまず明らかにしなければならない。

走査トンネル顕微鏡(STM)は、その探針を用いて個々の分子にアクセスすることが可能であり、さらには個々の分子の位置を操作することが可能である。STMを光学装置と組み合わせることにより、単一分子での電子の伝搬および電子・フォトンの変換を明らかにすることができる。

本サブテーマにおいては、単一分子をベースにしたデバイスの動作原理を明らかにすることを目指す。これにより、現在の半導体をベースとしたデバイスでは限界に達している高度な情報処理を可能にすると期待される。

本サブテーマには2つのステージに分けて遂行される。

① 単一分子をベースにした現象解明および単一分子の操作技術の開発

② 単一分子デバイスの創製とその動作原理の解明

第1のステージでは、STM探針と基盤のナノ共鳴器の中に置かれた有機分子からのトンネル電子誘起フォトン検出の知見を基に、機能性有機分子が局所的な電磁場モードとどのように結合するか物理的な基礎を明らかにする。特に量子力学的な現象が単一分子において単一電子トンネリング、単一電子伝搬、電子輸送および電子フォトン変換過程を通じてどのように現れるかに注目する。

第2ステージでは、第1ステージで得られた知見と高度な機能性有機分子合成技術およびナノ電極作製技術とあいまって、単一的分子発光素子、単一分子情報記憶素子および単一分子スイッチング素子等の有機分子デバイスのプロトタイプを創製を目指す。

【2】 融合への取り組みの概要

(1) 研究総括責任者の指導性

研究総括責任者は、物質・材料研究機構と通信総合研究所の開放的融合研究を統一的、一体的に運営するために、研究計画グループ会議を必要に応じて開催し、3つの研究グループ間の融合研究を行っている。また、融合研究推進事務局を設置して、2つの両研究機関の制度上の違いを補い効果的運営に努め、融合研究推進委員会において進捗状況を報告している。さらに、その指摘を受けアドバイザー、チーム制を導入し、研究推進体制の強化を図っている。運営にあたってはフレキシビリティを重視するために、特に固定化した運営要領は規定せず、研究グループ会議と融合研究推進委員会は必要に応じて開催できる状況にしてい

る。また、ホームページを開設し、本プロジェクトの成果の発信に努めるとともに、各研究者の研究計画や進捗状況を研究者間で公表して研究に対する連携を高めている。研究総括責任者は、融合研究グループを統括し、本研究全体の企画、調整、推進を行っている。融合研究推進委員会および評価委員会において進捗状況を報告し、研究評価を受けている。評価結果に基づき、研究方向、研究課題、研究予算、人員構成等に修正を加えるとともに、シンポジウム、研究会、講演会等を開催している。さらに、国内外に最新の情報を発信するとともに、外部研究グループとの情報交換を通じて研究の活性化に努めている。

平成13年度には、中間評価を実施し、研究成果が高く評価された。また、この評価委員会の指摘に基づき、ホームページの開設や共同研究締結による知的所有権の獲得や運用についての取り決めを行った。さらに、総括責任者の運営について、不安定な要素があるとの指摘に基づき、研究推進委員会において総括責任者の交代を行ったが、研究プロジェクトの運営に関しては両研究機関の理事が主となっている研究推進委員会がこれを代行し、新たな総括責任者への移行が速やかに行われた。

平成14年度は、要素技術を統合する研究を行う予定であるため一層の融合体制の充実が必要である。このため、前年度に増して研究計画グループ会議を必要に応じて開催するとともに、研究者が互いの研究の場に参加し、それぞれが持っている分野別の知識や技術の融合を推進する。また、平成14年度には、研究成果の発信と先端の研究動向を調べるために国際シンポジウムを神戸で開催した。さらに、本研究のサブテーマの一つである「ナノメーター平均

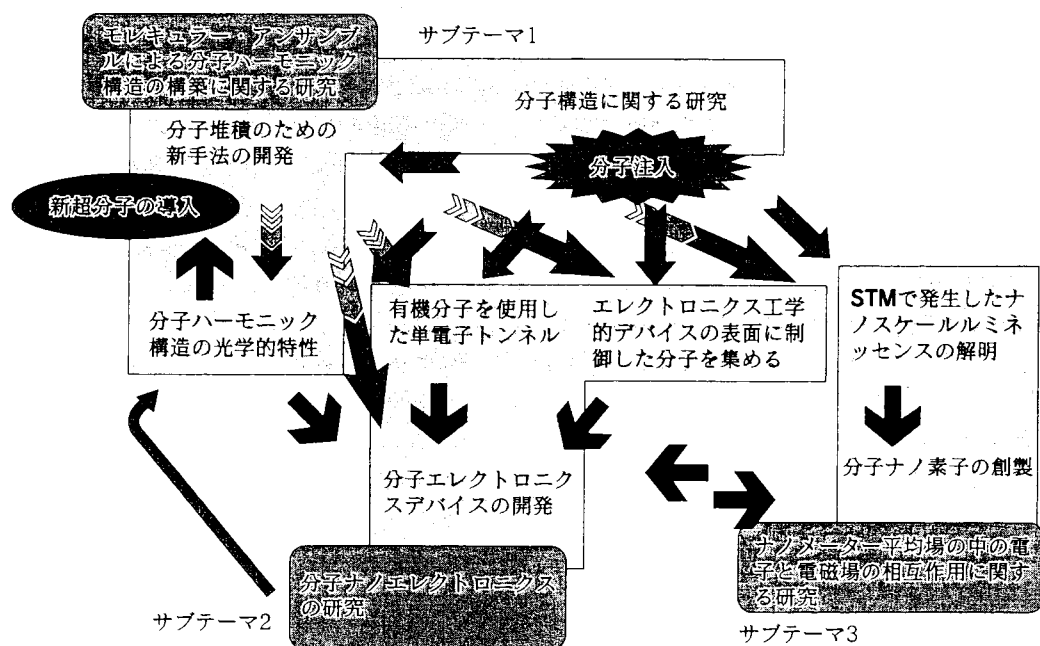


図1 サブテーマ間の連携状況

場の中の電子と電磁場の相互作用に関する研究」の一環として、「STM発光のメカニズム」と題して国際ワークショップをつくばにおいて開催し、この分野の理論の専門家を招き、意見交換および情報交換を行った。

(2) サブテーマ間の連携

本研究プロジェクトが掲げる研究課題は、分子科学・光科学・表面科学等々異なる分野にまたがる、典型的な学際的研究分野に位置付けることができる。また、“分子を真空中で組み立て素子構造を作る”という前提の上に成り立っているため、サブテーマの研究課題がすべて融合研究である。研究の中心となる場所は、研究のための施設と研究者の技術がある場所によって決められ、効率よく推進するように設定されている。具体的に、サブテーマの研究課題との実施場所、技術の関係を示すと図1のようになる。

物質・材料研究機構においては表面科学、超高真空技術および走査プローブ顕微鏡技術を得意分野とする。一方、通信総合研究所（以下、通総研）ナノ機構研究室においては、機能性有機分子について高い合成技術と評価技術を有している。このようなそれぞれの得意とする専門技術・知識をさらに効果的に融合させていくために、両研究機関の研究員が一堂に会して研究活動を推進していけるような施設として「ナノ分子フォトニクス共同実験施設（以下、志段味ラボ）」を名古屋市に設立した。これが、本プロジェクトの融合研究に向けた取り組みの最大の特徴である。物質・材料研究機構は茨城県つくば市に位置し、通総研は兵庫県神戸市に位置する。これら両研究所にとって、地理的にもほぼ中間に位置する名古屋市守山区に志段味（しだみ）ラボを設立した。具体的な設立場所は、名古屋市の一角にある志段味ヒューマンサイエンスパーク先端技術連携リサーチセンター内とした。

図1の最終的素子のイメージのなかで言えば、サブテーマ3の目標は、電極の間にある分子の構造を作ることである。分子同士や分子と電極などとの結合を行って一定の形を作り、結果として新しい機能をだす事をめざしている。サブテーマ2では、STMの探針で金属表面の分子に電子を注入し、発光する現象の研究とデバイス化の研究を行っている。また、名古屋市の志段味におけるサブテーマは分子のアセンブリ技術、ナノ電極との分子の接合、分子の単電子現象等の研究を含んでいる。物質・材料研究機構および通信総合研究所はそれぞれ微小エレクトロニクスおよび分子科学において特徴を持っているので、このテーマはプロジェクトの融合研究として最も期待されるテーマと考えられる。

平成15年度は、特にサブテーマ2を中心とした研究の集約化を図る計画である。すなわち、分子を中心とした研究のサブテーマ3と表面やナノ電極などのファブリケーション技術を統合し、サブテーマ2において基本的な素子を作成する。

(3) 融合への取り組み

前節で述べたように、研究自体が融合研究であることと融合のために名古屋市内に開設したナノ分子フォトニクス共同実験施設に、より強い融合体制が出来ている。平成14年度のサブテーマ2の常駐者は、物質・材料研究機構の職員2名、特別研究員2名、アルバイト2名および通信総合研究所の職員1名、特別研究員3名の陣容で研究を行った。現在、上記の研究員を中心に研究を行っているが、物質・材料研究機構、通信総合研究所からも研究員が、頻りに訪れ共同で研究を進めている。物質・材料研究機構、通信総合研究所においても当然であるが、特にナノ分子フォトニクス共同実験施設においては統一的な研究構想を確立し、これに基づいて研究を進めている。また、平成13、14年度には、両研究機関の理事をはじめとする首脳がナノ分子フォトニクス共同実験施設を訪れ、研究所として強力にバックアップする体制をとっている。

当初目指していたように、共通の場所で相互の研究員が同一の装置を用いて研究を進めることにより、これまでは単独の研究所では困難であった研究が進展している。特に研究施設の整備と大型の実験装置の整備を行い、この分野の研究施設として他の研究施設に比べ遜色のない施設とした。その結果、融合なくしては実現できなかった実験成果が挙げられている。このような体制に基づいて、物質・材料研究機構（つくば市）と通信総合研究所（神戸市）が相互に併任職員を任命し、3つの研究サイト間で相互の研究員が頻りに訪問し、活発に研究討論を行ってきている。

(4) 融合研究推進委員会における支援の取り組み

開放的融合研究を推進するために、融合研究推進委員会を設置し、以下の事項について異なる制度の両研究機関で研究マネジメントを統一的に行う。

- ① 融合研究遂行に必要な融合研究機関間で併任などの人的措置に配慮するとともに、開放性を踏まえ非常勤職員の任用に努める。
- ② 研究費の統一的運用が行えるよう両研究機関で努力する。
- ③ 研究計画に関して、両研究機関のサプリーダーが策定した計画に対し、承認を行うとともにその遂行のために大型施設などの使用に関して配慮を行う。
- ④ 研究スペースの確保、特にナノ分子フォトニクス共同実験施設の運用について両研究機関が協力して運営するよう努める。
- ⑤ ホームページの運用を協力して行えるよう努める。
- ⑥ 知的所有権の確保と運用に関して、両研究機関の間で共同研究契約書を取り交わす。

国際シンポジウムの開催に当たって、両研究機関で協力して推進できるよう支援する。

3. 年次計画

研究項目	11年度	12年度	13年度	14年度	15年度
1. モレキュラー・アンサンブルによる分子ハーモニク構造に関する研究					
① 分子構造に関する研究		STM分子発光機能ユニットの作製			
		自己組織能を持つ分子機能ユニットの作製			
② 分子ハーモニク構造の光学的特性	分子の溶液および膜構造の構築光学特性の研究			界面分子ナノ構造の光学特性	
③ 分子堆積のための新手法の開発	噴霧法による分子導入とナノ構造構築			イオントラップ法による分子導入とナノ構造構築	
2. 分子ナノエレクトロニクスの研究					
① 有機分子を用いた単一電子トンネル素子の試作	有機材料によるプロトタイプ単一電子トンネル素子の開発		単一光子-電子変換単一電子トンネル素子の開発		
② 金属基板上での分子自己組織化制御	基板上での分子自己組織化制御			自己組織化された分子の光・電子機能性評価	
③ 極微電極の作成と分子ナノ電子素子の開発	ナノ分子素子のための極微小電極の作成		MBE-AFM複合装置によるナノ分子電子素子の開発		
3. ナノメーター平均場の中の電子と電磁場の相互作用に関する研究					
① 単一分子をベースにした現象解明および単一分子の操作技術の開発	原子分解能でのSTM発光測定技術の確立		STM発光の量子力学的機構解明		
② 単一分子デバイスの創製とその動作原理の解明	極限電磁場環境における単一分子状態の創製		電磁場制御素子の動作原理解明		
所要経費(合計)	401百万円	394百万円	394百万円	353百万円	319百万円

II 平成15年度における実施体制

研究総括責任者：木村 克美 (㈱物質・材料研究機構ナノマテリアル研究所ナノデバイス研究グループ 特別研究員)

研 究 項 目	担 当 機 関	研究担当者
1. 分子・ハーモニック構造の構築と電磁場制御デバイスの開発に関する研究 (1) モレキュラー・アンサンブルによる分子ハーモニック構造に関する研究	㈱通信総合研究所	○益 子 信 郎 大 友 明 横 山 士 吉 ペー フェルディナンド 山 田 俊 樹 上 門 敏 也 三 木 秀 樹 奥 野 好 成 中 浜 龍 夫 シュウ ビンニュウ 古 海 誓 一 足 立 進 李 佳 蒲 生 健 次 上 田 里 永 子 瀧 口 義 浩 グ マ オ フ ァ
(2) 分子ナノエレクトロニクスの研究	㈱物質・材料研究機構 ㈱通信総合研究所	○若 山 裕 横 山 崇 久保田 徹 鈴 木 仁 照 井 通 文 田 中 秀 吉 長谷川 裕 之 永 瀬 隆
(3) ナノメーター平均場の中の電子と電磁場の相互作用に関する研究	㈱物質・材料研究機構	○ドン ゼンーチャオ 三 木 一 司 内 橋 隆 カク シンーリ アルテム トリフォノフ ピーター ヨハンソン

(注：○はサブテーマ責任者)

Ⅲ 融合研究評価委員会・融合研究推進委員会

(1) 融合研究評価委員会

委 員	所 属
○国 武 豊 喜	北九州大学 副学長, (株)理化学研究所 フロンティア研究システム時空間機能材料研究グループ グループディレクター
潮 田 資 勝	東北大学 電気通信研究所 教授
塚 田 捷	東京大学 大学院理学系研究科 教授
緒 方 直 哉	千歳科学技術大学 学長
スタニスラフ ネスブレック	チェコ 科学アカデミー 高分子化学研究所 教授
ヘルマン ファン ケンペン	オランダ ナイメヘン大学材料研究所 教授
マーク ウエランド	イギリス ケンブリッジ大学 ナノスケール科学研究所 教授
ジェームス ジムゼウスキー	アメリカ カリフォルニア大学ロサンゼルス校 化学・生物化学科 教授

(注：○は研究評価委員長)

(2) 融合研究推進委員会

委 員	所 属
○吉 原 一 紘	物質・材料研究機構 理事
青 野 正 和	物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所長
佐 藤 明 夫	物質・材料研究機構 研究資源室長
小 口 信 行	物質・材料研究機構 総合戦略室長
酒 井 保 良	通信総合研究所 理事
田 中 宏	通信総合研究所 総務部長
大 森 慎 吾	通信総合研究所 企画部長
板 部 敏 和	通信総合研究所 基礎先端部門長
廣 本 宣 久	通信総合研究所 関西先端研究センター長

(注：○は研究推進委員長)