

## (2) 開放的融合研究

## 「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」

(H11年度～H15年度、H13予算額：3.9億円(3.9億円))

研究代表者(研究総括責任者)：木村克美(物質・材料研究機構特別研究員)  
融合研究機関：物質・材料研究機構、通信総合研究所

研究の概要・目標	諸外国の現状	研究進展・成果がもたらす利点
<p>1. 何を目指している (1) 有機分子内に<u>高機能を盛り込んだ新材料</u>の開発 (2) <u>ナノメータースケール</u>での電子と電磁場を制御した<u>デバイス</u>の開発及び理論構築。</p> <p>3年後の目標 ●理論的設計の確立</p> <p>5年後の目標 ●新型デバイスのプロトタイプの開発</p> <p>2. 何を研究している (1) 有機分子に電子・電磁場特性を組込んだ<u>新たな系の合成</u> (2) <u>単一分子スケール</u>での電子・電磁場現象の解明 (3) 単一分子から発生するフォトン(光子)の<u>高時間分解能</u>での現象解明</p> <p>3. 何が新しいのか 従来、分子を二次元に<u>ランダムに配置された</u>特性しか使用されてこなかった。これを<u>単一分子スケール</u>で操作し、<u>分子の配置を制御</u>しコヒーレンスな電子を注入することによって今迄にない<u>量子現象</u>を発現させ、新たな<u>分子スケールデバイス</u>へと結びつく点が新しい。 (ナノメーター：10億分の1メーター)</p>	<p>1. 現状 欧米においても单一分子スケールでの現象解明が始まった。特にスイスは单一分子で電子-フォトン変換で世界をリードしたが、その高機能化で我が国も追随している。</p> <p>2. 我が国の水準 (1) 单一分子での電子・フォトンの変換という点ではスイスに遅れている。</p> <p>(2) しかし、高機能を盛り込んだ有機分子の合成に関しては欧米にひけをとらず、この分野における電磁場現象解明は諸外国に肩を並べている。更に近接場を用いて変換光を探索する技術は諸外国を上回っている。</p>	<p>1. 世界との水準の関係 (1) 従来の知見では解明されていない新しい量子論を世界で初めて解明 - 分子スケールという量子論が適用されるべきスケールで、実験的に量子論の妥当性及び新たな量子論を解明。</p> <p>(2) 新しい高機能性分子を世界で初めて開発 - 単一分子での機能を解明し、これらを高度に複合させ合成する技術「分子・ハーモニック構造」を構築。</p> <p>2. 波及効果 (1) 新しい分子スケール電磁場分野が創出され、国際的リーダーシップの獲得が可能となるほか、優秀な研究者の結集が可能となる。</p> <p>(2) 国際特許の取得により次世代デバイス分野の国際的イニシアティブを獲得できる。</p> <p>(3) 「分子・ハーモニック構造」を応用した新産業創出が期待できる。</p> <p>- 高効率電子-光変換デバイス、通信用情報処理素子、高エネルギー変換効率素子の開発など</p>

# 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

## 1. 目的、意義、必要性

既存の半導体を用いた電子デバイスの限界を突破するデバイスの動作原理開発を目指す。このためには通信総合研究所が有する有機分子の合成技術、物質・材料研究機構が有する単一分子の分子スケールでの評価・単一分子の操作技術を統合し、分子から放射される単一光子状態の測定を融合ラボにておこなう。

## 2. 研究概要

通信総合研究所では有機分子を自在に組み合わせ、機能性を織り込む。物質・材料研究機構では個々の分子を走査トンネル顕微鏡を用いて、原子分解能の高分解能で評価する。融合ラボでは、以上の技術を結集し、分子に注入する電子の位相と、そこから放出される単一光子の状態を明らかにする。これにより、最終的には新たな原理に基づく電磁場制御デバイスの動作原理を開発する。

## 3. 研究総括責任者

木村 克美

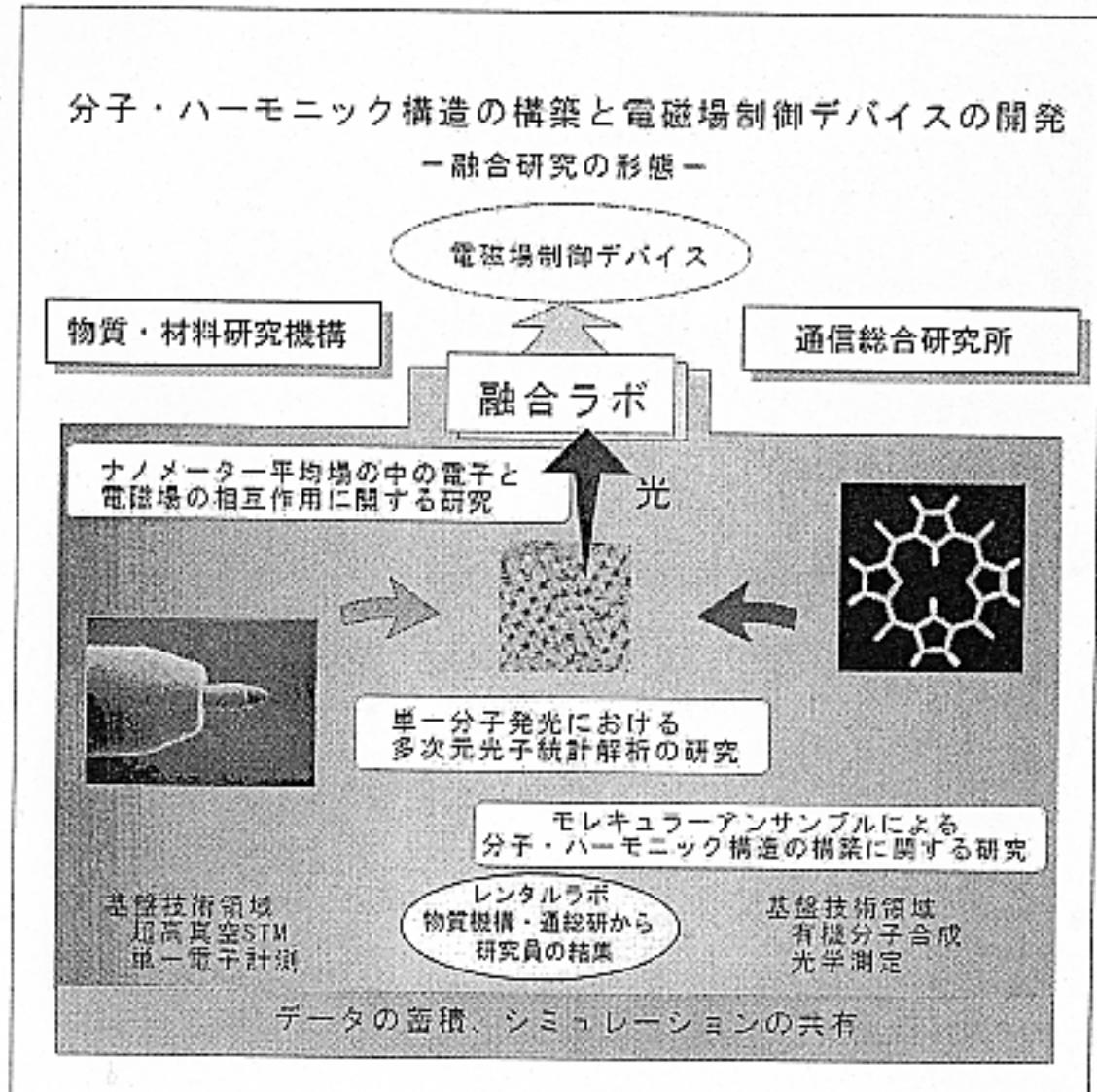
(独立行政法人 物質・材料研究機構特別研究員)

## 4. 融合研究機関

独立行政法人 物質・材料研究機構

独立行政法人 通信総合研究所

## 5. 研究期間 平成11年度～平成15年度



融合研究の研究体制について

	物質・材料研究機構	通信総合研究所	融合の形態(「融合」を含む)
#テーマ1 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	<p>研究内容 超高真空走査顕微鏡と近接場光子顕微鏡を用いて、極端複合平均場における電子と電磁場の相互作用について研究する。</p> <p>融合のメリット 通信総合研究所が独自に合成した機能性有機分子の導入が可能となり、光計測との関連から研究領域の拡張が可能となる。</p>	<p>研究内容 単一分子状態を作り出すための分子構造の設計・作製を行うと共に、発光機構についてナノメータースケール電磁場との関連性について研究する。</p> <p>融合のメリット 物質・材料研究機構が有する超高真空走査顕微鏡を用いた電子注入による単一分子状態の計測が可能となり、新たな分子デバイス研究の可能性が広がる。</p>	<p>物質・材料研究機構と通信総合研究所で研究に応じて併任によって着任して研究を行う。また、研究の進捗状況に応じて短期潜在実験を行う。</p> <p>双方の研究機関から人、装置、材料を持ち寄り、中間地点に当たる東海地区に融合ラボ(志段味サイト)を設置し、結集型の融合研究を推進する。</p> <p>併任(7) 物材機構(6)←通総研招へい等(11)</p>
#テーマ2 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	<p>研究内容 分子合成によって分子の構造と金属表面及び分子間を制御した新しい機能構造を、超高真空走査トンネル顕微鏡を用いて電子注入し、新たな現象の検索を行うと共に、金属界面の分子の電子物性について研究を行う。</p> <p>融合のメリット 電子-光変換の分子や導電性と言った様々な機能を持つ分子の研究に拡張性があるとともに、超高真空走査顕微鏡の新たな利用技術の開拓ができる。</p>	<p>研究内容 分子自身の構造を合目的に機能を発現させるために設計・作製と金属界面を利用した分子マニュビュレーションを行うと共に、金属界面の分子の光学特性について研究を行う。さらに、高次のデバイス構造に関する研究を行う。</p> <p>融合のメリット 溶液や薄膜とは異なる金属-真空の界面で、新たな分子・ハーモニック構造を作るためには、超高真空走査顕微鏡によるマニュビュレーション技術や電子物性の評価が必要である。</p>	<p>物質・材料研究機構と通信総合研究所で研究に応じて併任によって着任して研究を行う。また、研究の進捗状況に応じて短期潜在実験を行う。</p> <p>双方の研究機関から人、装置、材料を持ち寄り、中間地点に当たる東海地区に融合ラボ(志段味サイト)を設置し、結集型の融合研究を推進する。</p> <p>併任(6) 通総研(12)←物材機構招へい等(11)</p>
#テーマ3 単一分子発光における多次元光子統計解析の研究	<p>研究内容 単一分子を超高真空走査近接場顕微鏡を用いて認識する。単一分子に電子を注入するとともに、この分子からの発光を検出し、電子の位相と放射される光の位相の間の相關を検出する。</p> <p>融合のメリット 同一場所に高機能性分子及び走査近接場顕微鏡を設置し、かつ経験を有する研究者を結集することにより、単独に研究している場合には行うことが不可能である、単一分子における電子とフォトンの位相相關を測定することが可能となり、新たなデバイスの動作原理を得ることが可能となる。</p>		<p>双方の研究機関から人、装置、材料を持ち寄り、中間地点に当たる東海地区に融合ラボ(志段味サイト)を設置し、結集型の融合研究を推進する。</p> <p>結集(13) 融合ラボ(志段味)←物材機構 結集(16) 融合ラボ(志段味)←通総研招へい等(9)</p>

## 所用経費

### (1) 研究費の配分一覧 (サブテーマ毎)

(単位:千円)

サブテーマ名	サブテーマ リーダー	11年度 予算	12年度 予算	13年度 予算
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	益子 信郎	167,290	127,086 <sup>*2</sup>	100,319 <sup>*3</sup>
2. 分子エレクトロニクスの研究	若山 裕	90,743	125,168	146,965
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	董 振超	142,474 <sup>*1</sup>	141,604 <sup>*2</sup>	146,509 <sup>*3</sup>
合 計 額		400,507	393,858	393,793

\*1 うち、共通経費として、事務局の人件費と運営費、国際シンポジウム用経費（会議費用、旅費、謝礼金等）、そして広報費用が含まれる。

\*2 うち、共通経費として、事務局の人件費と運営費、国際シンポジウム用経費（会議費用、旅費、謝礼金等）、そして広報費用が含まれる。

\*3 うち、共通経費として、事務局の人件費と運営費、国際シンポジウムに評価委員会用経費（会議費用、旅費、謝礼金等）、そして広報費用が含まれる。

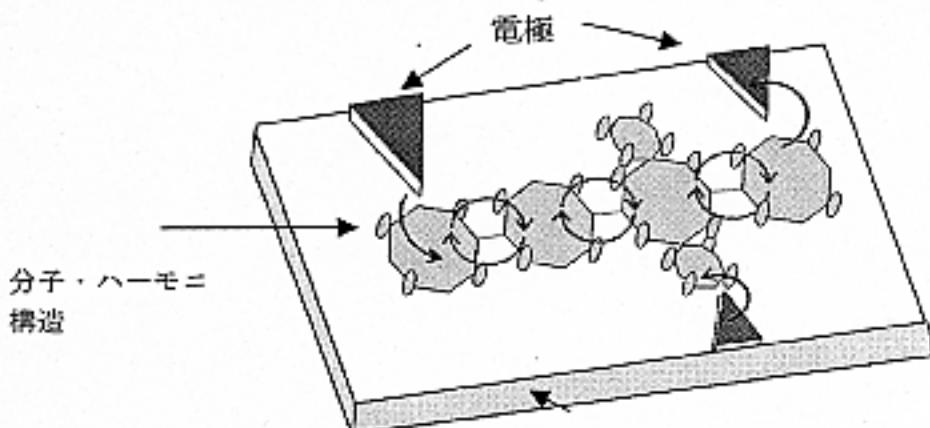
### (2) 年度毎予算額推移 (機関毎)

(単位:千円)

機関 年度	11年度予算	12年度予算	13年度予算	合 計
物質・材料研究機構	216,728	200,843	207,831	625,402
通信総合研究所	183,779	193,015	185,962	562,756
合 計	400,507	393,858	393,793	1,188,158

## 研究成果の概要

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・解析を中心とし、後半は、それらの技術を集積してデバイス開発を目指す。前半の本課題の研究目標は、①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こと、②分子を様々な機能ユニットとして作製し、それを基板上で光・電子機能を持つ高次の構造体として組み上げ、デバイス化の可能性を探ることである。

現在は、①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ている。②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、基板上に蒸着した研究段階になっている。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になってきている。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る。これまでに設計を終え、プロトタイプの試作機が完成し、特性試験が行われている。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予定である。

以下に、これまでに得られた研究成果のうち、代表的なものについて簡単に説明する。

### (1) STM探針からの電子注入による単分子発光の測定

分子の電子状態と共鳴的に結びついた局所的電磁場モードを用いることにより、STM探針と基板の共鳴器の中の有機分子からトンネル窓に誘起されたフォトンが発生する機構を明らかにする。有機合成法によりポルフィリン分子に側鎖をつけた分子を、超高真空中の金属基板上へ微量を蒸着して単分子状態を作り出し、STM探針から電子注入をした。分子は、金属基板から一定の距離を持っており、2重のトンネル接合が形成されると考えられる。また、この発光を測定するため、集光のための光学系やその検出系の開発、ファイバーチップを用いた走査プローブ顕微鏡の開発を行った。その結果、単分子から強い発光が観測され、そのスペクトル測定から分子の単位を介した発光であることを示した。また、その電子一光の変換効率などの測定を行った。

### (2) 分子の自己組織化による分子ハーモニック構造の構築

有機合成法によりポルフィリン分子に側鎖をつけるなどの構造改変を行った分子を、超高真空中の金属基板上へ蒸着し、自己組織化によって分子の高次構造を作成した。ポルフィリン分子は平面骨格を持った対象性の高い分子である。側鎖として tertiary-butyl-phenyl 基をつけると、金属表面での吸着力が弱まり、分子間力による分子の集積性が高まる。この特性を利用し、ポルフィリン骨格を中心として CN 基を適当な位置に配置する事によって、分子間力を制御して高次の構造を作り出すことに成功した。構造としては、分子 2 量体、3 量体、ワイヤー状、蜂の巣状に分子配列させることに成功した。この配列は、分子軌道計算によっても支持されることを明らかにした。

### (3) デンドリマー分子によるレーザー発振

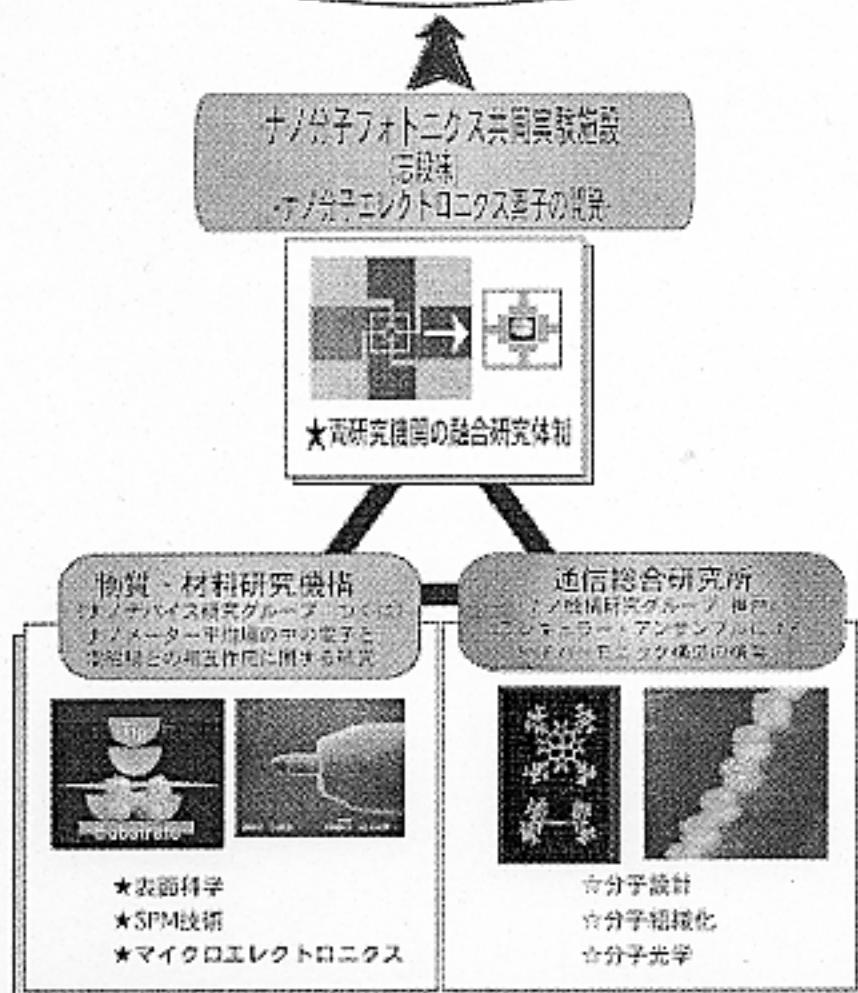
単分子の状態を乱さないで、他の物質中におくための方法として、コアシェル構造を持つデンドリ

マーガーがある。コアとして、蛍光色素ローダミンBを用いてその効果を評価している。その過程から、デンドリマー・クラスターをレーザー媒体に用いた誘導放出の実験で、外部共振器を有しない自然放出光増幅であるにもかかわらず、レーザー発振に匹敵する単色性及び指向性の高いレーザー輻射を観測した。これは、光の散乱と増幅による光の局在化というデンドリマー・クラスターに於ける新たな光応答が関与しているものと考えられる。このことは、構造制御されたデンドリマー分子を用いると、マクロな新機能光学材料や素子などの開発の可能性があるということを示す。

#### (4) デンドリマーを中間電極とする単電子トンネル素子の開発

デンドリマー分子を用いることにより、機能分子単位の会合を減らし、中心構造を中間電極とした単一電子トンネル素子の作成とその電気特性を測定している。ローダミンBを中心色素とするローダミンデンドリマーを中間電極として用いて単電子トンネルの測定を行った。また、この特性を光照射によって変化・制御することを目的に、光照射可能な素子構造を設計・作製し、その特性を測定した。トンネル障壁には、単分子膜厚のポリイミドLB膜を用いた。5. 2K の極低温で単一電子トンネル特性を測定し、その後白色光を照射し、特性を測定した。その結果、明確な単電子トンネル伝導特性が得られ、光照射によってその電流値が減少している様子が観測された。有機分子には、分子単独で電子機能、光機能を有しており、無機物質では難しい量子ドットの容量変調や光による単一電子移動の制御などの発展も考えられる。

### 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



## 研究成果公表等の状況 <課題全体>

### 【研究成果発表等】

	原著論文による発表	左記以外の誌上発表	口頭発表	合計
国内	8 (1) 件	4 件	58 件	70 (1) 件
国外	64 (9) 件	0 件	94 件	158 (9) 件
合計	72 (10) 件	4 件	152 件	228 (10) 件

(注:既発表論文について記載し、投稿中の論文については括弧書きで記載のこと)

### 【特許出願等】

7 件 (国内 7 件、国外 0 件)

### 【受賞等】

2 件 (国内 2 件、国外 0 件)

"Spatial Photon Confinement and Laser-like Emission by Dendrimer"  
MABE Award 受賞 (平成13年3月) 通信総合研究所 横山 壽吉

"Control of Self-assembled Structures for Porphyrin-based molecules on Au (111) surface"  
MABE young scientist Award 受賞 (平成13年3月) ナノ分子フォトニクス共同実験施設  
横山 崇

### 【主要雑誌への研究成果発表】

Journal	Impact Factor	サブテーマ 1	サブテーマ 2	サブテーマ 3	合計
Applied Physics Letters	3.906	1	1	1	3
Journal of Physical Chemistry B	3.386	1			1
Journal of Chemical Physics	3.301	1 (1)			1 (1)
Physical Review B	3.065		2	2	4
Journal of Physical Chemistry A	2.754	1			1
Surface Science	2.198		(1)	2 (2)	2 (3)
Journal of Applied Physics	2.180		1		1
Applied Physics A	1.613			2	2
Journal of Vacuum Science & Technology B	1.605			1	1
Applied Surface Science	1.222			1	1
Thin Solid Films	1.160	(1)	1		1 (1)
Japanese Journal of Applied Physics	1.157	1		2	3
Polymers for Advanced Technologies	1.066	1			1
Molecular Crystals and Liquid Crystals	0.885	1			1
Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena	0.875		2		2
Journal of the Chinese Chemical Society	0.418		1		1
主要雑誌小計		7 (2)	6 (1)	7 (1)	16 (3)
発表論文合計		7 (2)	8 (1)	11 (2)	26 (5)

\*上記インパクトファクター数値は全て 2000 年のデータを使用。

## 開放的融合研究に向けた研究体制の概要 <課題全体>

### 【研究総括責任者の指導状況】

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、研究総括責任者は研究グループ会議、3つの研究グループ、融合研究推進事務局を設置して、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。

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。これらを効果的に推進するため、融合研究推進事務局を設置している。

### 【サブテーマ間の連携状況】

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がいて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し、一方通信総合研究所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くような施設として「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。

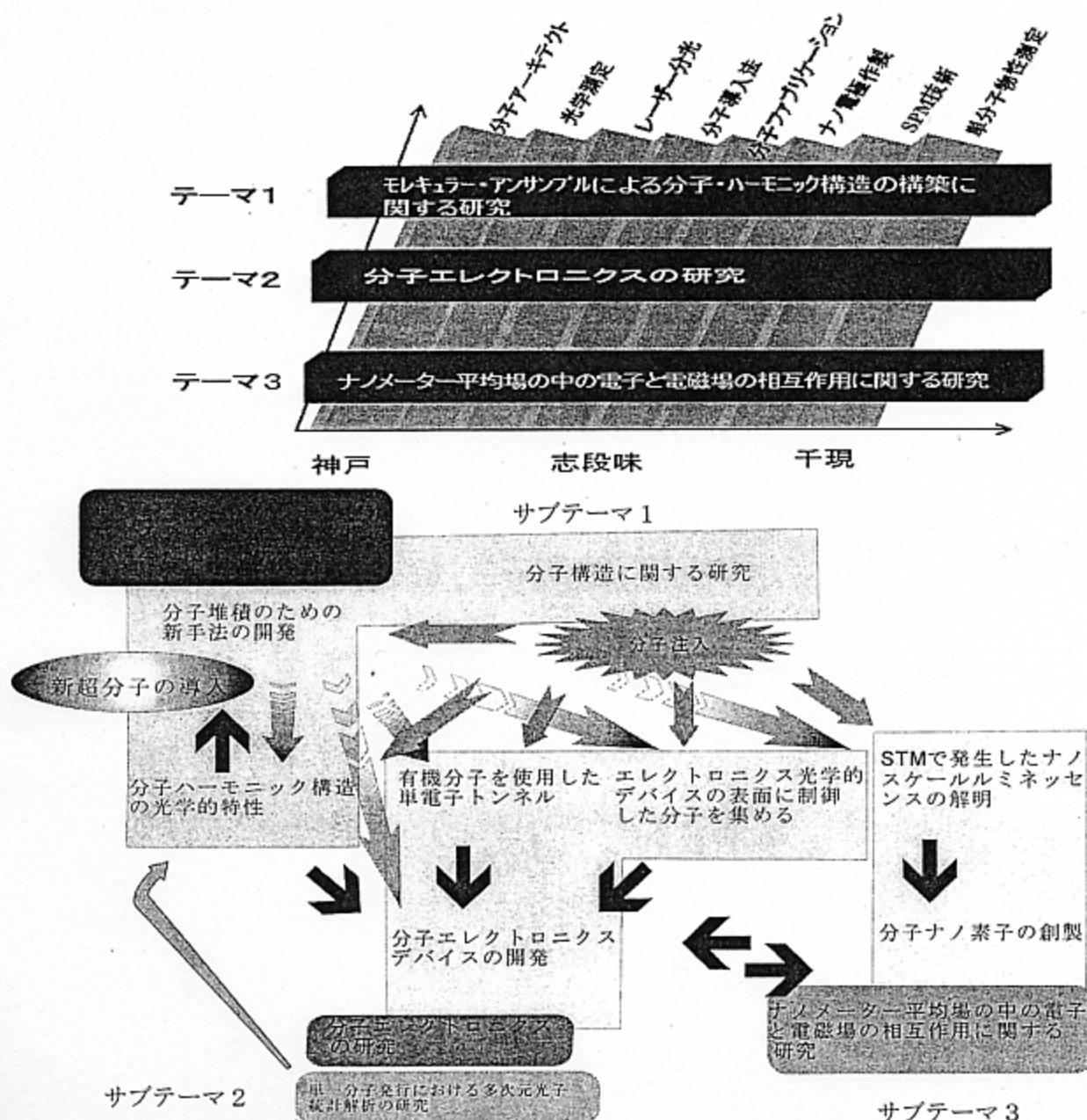
物質・材料研究機構は茨城県つくば市に位置し、通信総合研究所は兵庫県神戸市に位置する。これら両研究所にとって地理的にもほぼ中間に位置する名古屋市守山区に志段味（しだみ）ラボを設立した。具体的な設立場所は名古屋市の一角にある志段味ヒューマンサイエンスパーク先端技術連携リサーチセンター内とした。

平成11年度は事实上志段味ラボにおける研究環境の立ち上げと整備に注力した。大型装置としては、物質・材料研究機構からトンネル誘起光子検出機構を平成12年2月に設置した。これに加えて科学技術振興事業団創造科学推進事業高柳粒子表面プロジェクトより、極低温粒子表面構造解析装置の貸与を受け、平成11年11月に移設した。通信総合研究所側からは、表面分析用の角度分解電子線構造解析装置、フェムト秒レーザーシステム、光パラメトリック発振器などが、相次いで整備された。また、サブテーマ1において計画していたスプレー法による分子の高真空中への導入技術のための試作機が、融合的環境において開発する方が効率よく優れた物が出来るであろうとの判断から、平成13年3月に設置された。

人員については志段味ラボが開設された平成11年10月の時点では、通信総合研究所から1名、物質・材料研究機構から3名が赴任した。また、浜松ホトニクス株式会社から3名、物質・材料研究機構との契約に基づき開放的融合研究の研究員として参加した。その後、物質・材料研究機構から事務員、特別研究員2名、通信総合研究所から1名の特別研究員が赴任し、総勢10名となった。また、平成13年4月より、研究の進展から研究場所の拡張を行い、居室2実験室4のスペースを確保した。

実際の研究は、研究施設の制約や技術的に効率よく推進できる場所において研究を行うという観点で推進している。

図はそれぞれのサブテーマと研究融合上での研究の関係を示す。最終的素子のイメージのなかで言えば、サブテーマ1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3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。



### 【開放的融合研究に向けた取り組み状況】

物質・材料研究機構ナノデバイス研究グループにおいては超高真空技術を中心とした表面科学や走査プローブ顕微鏡技術を得意分野とし、通信総合研究所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光機能性についての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ことにより、本プロジェクトの掲げるナノ分子素子の開発に取り組んでいる。プロジェクト発足当時は特に通信総合研究所で合成したポルフィリン誘

導体を物質・材料研究機関にて観察・光学測定するといった役割を分担していた。さらに研究内容を発展させ、より強固な融合体制を構築することを目的に第3の研究サイトとして名古屋市にナノ分子フォトニクス共同実験施設を設立した。

前述したとおり、本研究プロジェクトが掲げる研究課題は、いくつもの異なる分野の融合が必要不可欠な、典型的な学際的研究分野に位置付けられる。このような分野において実のある研究成果を挙げていくためには、多様な人材を有効に融合させて研究活動を推進していくことが大切である。異なる研究機関に所属している研究員同士が自由闊達に議論や研究活動を推進していくうとするとき、それぞれの研究組織の範囲内だけでなく、ひろく開かれた共通の研究活動の場があればより融合研究が促進されることになる。この目的のために我々は名古屋市に中間ラボとしてナノ分子フォトニクス共同実験施設(志段味ラボ)を設立した。融合研究に向けての最も顕著な取り組みとして挙げられる。

ここ志段味ラボにおいては、両研究機関から常勤および非常勤の機関職員や特別研究員が配置されている。大きな特長として各研究員の専門分野が大きく異なる点が挙げられる。例えば真空技術を基本とした薄膜作成技術を専門とする者や有機分子の光電子分光学を永年研究してきた者などが所属している。これら研究員がそれぞれの得意とする分野を担うことにより、あるいは補うことにより本プロジェクトの目標達成を目指した研究活動を進めている。

もちろん、3つの研究サイト間での交流も精力的に押し進めている。特に研究成果のひとつとして挙げられるポルフィリン分子の自己組織化がその典型例と言える。通信総合研究所で合成された分子を志段味にて観察、その結果を即日伝えることにより次にどのような構造の分子を合成したらよいかフィードバックする。こういった体制を整えることにより効果的に高度に自己組織化されたポルフィリン分子集合体の構築に成功した。その他新規に取り組み始めた分子ナノエレクトロニクス素子の開発についても、電極作成・分子合成・基板調製・機能評価等々それぞれのサイトで押し進めている各要素技術の融合があつてこそ成しえる課題と言えよう。

以上はいずれも両研究機関間での融合性について述べたものである。開放性の確保については、毎年国際シンポジウムを主催すること、論文や学会発表にて成果を公表すること、国内外の研究者を客員研究員として招き共同研究体制を整えること等により促進している。さらには志段味ラボにおいて特別研究員として浜松ホトニクス株式会社より数名の研究員を招聘している。これにより国立の研究機関や大学のみでなく民間企業も含めた産・公・学の研究機関との融合性・開放性の促進も押し進めていることも合わせて報告する。

### 【融合研究推進委員会の支援状況】

#### (第1回開放的融合研究推進委員会)

1. 日時：平成11年8月20日
2. 場所：旧金属材料技術研究所材料試験事務所会議室
  - 1) 開放的融合研究主旨説明 根城ユニットリーダー
  - 2) 「推進委員会について」設置とその規定の提案がなされ、承認された。

#### (第2回開放的融合研究推進委員会)

1. 日時：平成12年8月30日
2. 場所：通信総合研究所 本所
  - 1) 根城研究総括責任者より、平成11年度成果報告及び平成12年度計画についての説明があり、承認された。
  - 2) 益子室長より、通信総合研究所の平成11年度成果報告及び平成12年度計画についての説明があり、承認された。

## 評価結果 <課題全体>

### 1. 進捗状況について

#### (1) 目標の達成度について

分子エレクトロニクスを実現するための基礎技術として、機能分子の合成と2次元配列、個別分子の精密物理測定を融合させるという中間目標は全般的に達成されており、目標以上の成果を上げたテーマもある。研究プログラムが一部（真空中での金属及びその他の界面分子の自己組織化と光学的測定によるナノ構造体の創製）変更されたが、研究戦略自体を変える必要はない。

ただし、「電磁場制御」については、理論構築やコンセプトの証明や検証が十分追求されていない。

#### (2) 研究全体の進捗状況について

いくつかの研究では期待以上の進展があった。個々の研究者レベルでの研究の展開はめざましい。新設された志賀味ラボへのノウハウや実験設備の移動が円滑で、立ち上げが極めて迅速に行われた。また、物質・材料研究機構は走査プローブ顕微鏡に関する技術を能率的に融合研究全体に行き渡らせた。通信総合研究所の合成分子も全施設に提供されている。また、要請に応じて新しい分子の合成も行っている。これらの状況から研究所間の連携がよくとれている、と判断できる。しかし、単一分子デバイスという最終目標の実現という点では進歩が不十分である。個々の研究努力を全体目標に向かって凝結させることが必要である。

### 2. 目標設定について

#### (1) 当初の目標設定が適切であったか否かについて

分子エレクトロニクスは分子合成から物理計測に至る幅広い内容を含むため、統合的な研究を実施することは容易でない。本融合研究はその陸路を打破する領域横断的な試みであるので、その点でも評価できる。当初からの目標である分子エレクトロニクスの確立は将来の重要な産業技術であり、研究テーマは適切かつ時宜を得ている。

#### (2) 最終目標の変更の必要の有無について

現在までの研究成果から見て、最終目標の変更は必要ない。ただし、当初の目標に対する個別テーマの絞込みが十分でないところもある。優れた研究成果が得られているので、それを踏まえた研究内容の方向付けを明確にすることが必要となる。

### 3. 研究成果について

#### (1) 研究成果の科学的価値について

個別の研究課題においては、世界最高水準にあるものが多く見受けられた。その例として以下の研究項目が挙げられる。

- 1) 合理的な分子設計による線状、環状などポルフィリン誘導体の分子組織化の制御原理の開拓
- 2) デンドリマー・色素複合体によるレーザー発振の発見
- 3) デンドリマー・色素複合体を含む薄膜での単電子トランジスタ機能の発見
- 4) ジェットスプレー法による有機超薄膜作成装置の開発
- 5) STM誘起による光子発生現象の解明

本プロジェクトでは化学者、物理学者および材料科学者間の学際的連携を生かした科学的価値の高い成果が得られており、これらの成果の多くは一流の国際誌に掲載されている。

#### (2) 研究成果の波及効果について

本プロジェクトの成果は国際的な一流の専門誌に数多く報告されており、また本プロジェクト主催による国際会議が開かれることからも、成果の十分な波及が期待される。具体的には、上記1) 2) 3) はいずれも独創的な成果であり、国内外の研究活動を刺激するであろう。4) についても、新しい方法論としての関心が高まると考えられる。

### (3) 研究成果の情報発信について

専門誌上や国内外の学会での論文発表、シンポジウム開催など様々なメディアを通じた情報発信はよく行われている。

しかし、大きな問題点として、開放融合研究プロジェクト専用のホームページがないということが挙げられる。一般市民および業界関係者への情報提供に、ホームページは不可欠である。また、所管官庁や母体研究機関に対しても情報提供する必要がある。それに、参加研究員自身が、常にプロジェクト全体を俯瞰できるようにするためにも、きわめて重要である。日本語版と英語版両方を準備し、頻繁に更新を行い、ハイライトや最新ニュース・活動状況を掲載する。サイトの立ち上げや更新は、研究者間の連携を示すよい例となるだろう。特に、若手研究員にホームページに関する中枢的役割を担ってほしい。

ホームページは評価委員会に対しても必要不可欠な情報を提供する。ホームページは一般閲覧可能部分とパスワードで管理する内部専用ページに分けておけば、後者は研究用で参加研究員同士が情報をシェアするのに使用できる。

## 4. 研究体制について

### (1) 研究総括責任者の指導性について

分子エレクトロニクスは、激しい国際競争が行われている最先端の研究課題である。その実現を目指して、想像力に富むプロジェクトが開始されたことに対しては、そのリーダーシップを高く評価したい。

しかし、プロジェクト運営状況に関して不安点が見受けられる。責任者は、意志疎通能力を磨かなければならぬ。プロジェクトの後半において研究目標となる具体的なデバイスを実現させるには、明確な目標、中間段階、実現可能項目、重点項目、スケジュールを計画的に設定する必要がある。個別テーマ連携のための積極的な手段を講じることで、方向性は高まると思われる。

### (2) サブテーマ間の連携状況について

分子を作成する化学者と、その分子を利用する側との連携が良く取れている。また、殆んど全ての研究者が走査プローブ顕微鏡に関する技術を取得でき、各々の研究テーマにおいて活用している。

全般的に短期間ですばらしい連携が築かれ、各グループとも融合の実を挙げることに前向きに取り組んでいる。実際、このような連携の中から数々の複雑な技術的課題が解明されている。3グループともに良い連携を呈しているが、特に、通信総合研究所と志段味ラボの間には強力な連携関係があり、今後の研究活動の模範となる。志段味ラボにおける成果は、そのような協力関係の結実を如実に示している。

一方、各施設の責任者間に多少意見の相違が見受けられることも事実であり、今後、具体的な成果、特にデバイス応用につながる成果に結実させるためには、一層の有機的協力が必要となろう。

### (3) 開放的融合研究に向けた取り組み（積極的な融合が図られているか）

分子素材の提供と精密物理測定の組み合わせは優れており、よく機能している。特に志段味ラボの設立と運営は、この取り組みが成功していることを裏付ける。研究者同士の信頼感を一層高めて融合の実が挙がることを期待したい。最終目標を焦点をあわせて絞り込むために、実験グループと理論グループとの間の交流を推進すべきである。

外部からの研究員、特に諸外国からのボス・ドク研究員が多数任用されて研究活動に大きく貢献している。外部からのビジターや客員研究者もプロジェクトに参加している。ただし、理論的領域においては外部の支援をもっと積極的に求めるべきである。若手研究者にとって、これらの優れた外部研究者との交流と討論の場が必要であり、それらの場を通じた研究指導が重要である。

#### (4) 融合研究推進委員会の支援

本項目に関しては、文書資料からもプレゼンテーションからも、評価に足りる十分な情報は提供されなかった。施設見学の間、推進委員会としての明確な役割を理解するのは困難であった。しかし、母体研究所が本プロジェクトの推進に極めて協力的であり、それを重要な業務ととらえていることは明らかであった。研究担当者がプレゼンテーションの際、その業務内容をより理解できるよう配慮すれば良かったと思う。