

## 『固体表面・界面における分子デバイス開発の新展開』

**【日 時】** 平成28年1月15日（金）  
13:00～16:30（懇親会17:00～）

**【場 所】** ホテル新大阪コンファレンスセンター  
大阪市淀川区西中島6-2-19  
JR 新大阪駅（在来線口）を出て正面口より徒歩 約5分  
地下鉄御堂筋線新大阪駅⑦号出口を出て徒歩 約5分  
(<http://www.shinosaka-conference.com/>)

**【趣 旨】** 微細加工技術の進歩が牽引してきた半導体集積回路の小型化は間もなく10nmの長さスケールに到達し、現在新たな局面を迎えつつあります。微小な電子デバイスでは、高集積化に伴う発熱の増大や開発コストの上昇などの問題が深刻となるだけでなく、バルク固体と本質的に異なる原子・分子レベルでの電子物性の理解が不可欠となります。微小な電子デバイスを実現する1つの方向性として、近年、固体表面・界面において単分子スケールの電子素子を設計する技術の開発に著しい進展がありました。そこでは電子デバイスを構成する高機能な有機分子の合成技術や、原子レベルでのダイナミカルな構造変化に起因する伝導特性を精密に制御する技術とともに、それらの微視的な理解を可能にする数値シミュレーション手法が重要な役割を果たします。第69回を迎える本研究会では、これらの分野の第一線で活躍されている4名の講師をお招きし、固体表面・界面上の分子デバイスに関する最新の研究成果をご講演頂きます。本研究会を通して得られた知見を参加者各人が今後の研究活動等に活かせることを切に願っております。奮ってご参加下さい。

### 【プログラム】

- 13:10-13:55 「単分子エレクトロニクスに向けたナノスケール機能性ユニットの設計と開発」  
大阪大学 産業科学研究所 家 裕 隆 氏
- 13:55-14:40 「分子接合の可逆制御と分子伝導の精密計測」  
京都大学 大学院理学研究科 奥 山 弘 氏
- 14:40-15:00 休憩（コーヒープレイク）
- 15:00-15:45 「分子スイッチの理論計算」  
大阪大学 大学院基礎工学研究科 大 戸 達 彦 氏
- 15:45-16:30 「第一原理シミュレーションによる抵抗変化型メモリの動作機構の検討」  
北海道大学 触媒科学研究所 中 山 哲 氏
- 17:00- 懇親会

家 裕隆 氏

## 単分子エレクトロニクスに向けたナノスケール機能性ユニットの設計と開発

単一分子に電子素子の機能を付与した“単分子エレクトロニクス”を目指した研究が盛んに行なわれている。単分子エレクトロニクスは自在に構造変換ができる有機分子の特徴を活かして、分子レベルで素子を組み上げる究極のボトムアップアプローチである。近年になって、ようやく単純な化学構造の単分子電気伝導特性や金属電極-有機分子との接合能評価、等の基礎的知見が得られている状況であり、素子機能化に向けて精密に設計された化合物は開発途上である。我々は、有機合成化学・構造有機化学を基盤とする分子合成技術を用いて、単分子エレクトロニクスへの応用が可能なユニット開発をこれまで行ってきた。本講演では、分子導線の役割を担う機能性オリゴチオフェン、および、金属電極とのアンカー部位の役割を担うテトラフェニルメタン骨格の三脚型分子について、設計指針、有機合成、基礎物性、素子機能の結果を概説する。

奥山 弘 氏

## 分子接合の可逆制御と分子伝導の精密計測

走査トンネル顕微鏡(STM)を用いて分子接合を非破壊、可逆的に形成することで、分子伝導の精密計測を行った。Cu(110)表面に吸着したフェノキシ (PhO) 分子 (ベンゼンの一つの水素が酸素に置換されたもの) に対して STM 探針を近づけると、フェニル基が持ち上がり分子架橋が形成する。探針を遠ざけることで分子と探針の結合が切れて分子は表面上に戻る。フェニル基と探針間の比較的弱いパイ相互作用が on と off を切り替えており、これが可逆な接合形成を実現している。この可逆制御を用いて分子伝導の精密計測を行った。まず、アンカー原子について酸素と硫黄の二種類を比較することで後者が約2倍の伝導性を持つことが明らかとなった。これは硫黄と電極の強い接合を反映している。次に電極表面に吸着した他の(伝導分子以外の)分子の影響について実験を行った。その結果、隣接するフェノキシ分子の電場によって伝導分子の電子状態が変調され、その伝導度が影響を受けることを明らかにした。隣接分子がゲートとして作用していると考えられる。

大戸 達彦 氏

## 分子スイッチの理論計算

固体表面上に吸着した分子に電流を流すことで、分子像を観測するだけではなく、分子振動を励起して構造変化を起こすこともできる。分子構造の違いを利用して電気伝導度の変化を起こす「分子スイッチ」の実験的報告は近年相次いでいるが、そうしたスイッチング動作がどのように、またどのくらいの頻度で起こるのかは完全には理解されていない。

最新の理論計算では、固体表面上に吸着した分子の電気伝導度の予測のみならず、電流による振動励起に伴う分子構造変化の頻度など、動的な挙動までを予測することができるようになりつつある。本講演では、電圧がかかっている時に分子にどのような影響が及ぶのかを第一原理計算によって記述する理論を概説した上で、理論計算によって分子スイッチを取り扱った実例を紹介する。加えて電流誘起だけではなく、分子の電荷量の操作など異なる手法で電気伝導度の変化を起こす実例とその理論計算についても紹介する。

中山 哲 氏

## 第一原理シミュレーションによる抵抗変化型メモリの動作機構の検討

不揮発性抵抗変化型メモリ (ReRAM) は抵抗変化が高速であり、大きな抵抗変化比を保ったまま微細加工できるために次世代メモリとして期待されている。酸化物 (Ox) を金属電極 (M) で挟んだ M-Ox-M 構造における抵抗スイッチ効果を利用したメモリの研究開発が活発に行われており、これは酸化物に酸素欠陥による伝導パスが形成されることで抵抗値が大きく変化することを利用している。本講演では、M-Ox-M 構造における伝導パスの構造や電子状態、導電メカニズム、さらに抵抗スイッチング効果における物理的メカニズムに関して、第一原理シミュレーションを基に、我々が取り組んできたことを紹介する。また、第一原理シミュレーションの手法や他の応用例についても紹介したいと考えている。