

■ 分子スケールナノサイエンスセンター

物質を分子スケールで観測する様々な分光分析法の著しい進歩は、分子や分子集合体の高次な構造を精密にまた動的に取り扱うことを可能としてきた。一方、走査トンネル顕微鏡や高分解能透過電子顕微鏡の発達は、分子や分子集合体を直接に「観る」時代をもたらし、直接的な操作による機能性分子素子あるいは分子集合系の構築を可能にしつつある。分子科学研究所では、これまでの量子化学や統計力学によって培われた分子科学の成果と機能性分子の設計・合成における先端的な成果を融合させ、これらをナノスケールの諸現象解明や新しい物質系の構築に



(後列左から)清原公平、横山高博、吉村大介、奥平幸司、高嶋圭史、加藤清則、新美さとみ、高林康裕、細川洋一、高山敬史
(中列左から)佐々木時代、松本太輝、佃達哉、鈴木博子、久保園芳博、田中彰治、白沢信彦、菊澤良弘、牧田誠二
(前列左から)茅幸二、小丸忠和、李艶君、小宮山政晴、戸村正章、永田 央、柴山日出男

生かして「分子スケールの機能解明と機能開発」を目指す新しい科学を開拓するために分子スケールナノサイエンスセンターを発足させた。

本センターは、規模において大部門に相当する3つの専任研究部門と2つの流動部門から構成されており、研究系とセンターという枠を越えた所内の共同研究や、所外のような専門分野の研究者との共同研究を積極的に推進し、新しい研究分野の開拓を行うために相応しい組織となっている。また、本センターは、分子科学の研究に共通性の高い物性機器の集中管理、低温冷媒の供給、化学試料の分析を行い研究者の利用に供したり、実験廃棄物の管理や処理も行っている。

研究部門の構成及び研究内容は、以下の通りである。

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門：

特異な光・電子機能を有する有機薄膜素子および単一分子素子の構築の礎となる、分子の設計と開発、組織化および計測を行い、基本的物性および動作原理を解明するとともに、それに必要な新しい実験手法を確立し、新しい学問領域と技術基盤を創成することを目指す。

ナノ触媒・生命分子素子研究部門：

ナノスケールの触媒群の合理設計や生体ナノ反応場の構築を行い、触媒機能発現機構の精密な解明と理解、全く新しい機能を発現する新触媒創製、従来にない超高活性触媒や新機能反応場の開発を目指す。

ナノ光計測研究部門：

分子科学研究所が長年培ってきた独創的レーザー分光法と光源開発力を基盤として、新たなナノ空間計測法と分子制御法を開拓し、ナノ空間内の現象解明とその分子科学的応用を行なう。また、極端紫外実験施設に高輝度挿入光源を設置して先端的極端紫外光源の開発を行なうとともに、ナノシステムの構造評価、分子メス、ナノ反応場創製の研究に応用する。

界面分子科学研究部門（流動研究部門）：

ナノスケール表面解析手法による固-気および固-液界面における原子・分子の吸着構

造とその反応性の解明，シンクロトロン放射光による有機薄膜の表面物性の研究，およびフラーレンをベースにした界面・ナノ物性の開拓を行なう。

分子クラスター研究部門（流動研究部門）：

強磁場による化学反応・物理変化制御，化学反応のポテンシャル面の効率的生成，および優れたリサイクル能をもつナノデバイスの開発を行う。

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門

1．電界効果トランジスター（FET）の作製と特性評価

有機半導体の真空蒸着膜あるいは電気化学堆積膜を用いたFETを作製し，キャリア注入・輸送機構を解明して高移動度素子の作製指針を導出する。また電極間隔をナノメートルスケールにまで小さくして，単ーグレイン，微粒子などの特性を調べる。

2．シリコン・炭素共有結合性ナノインターフェースの構築

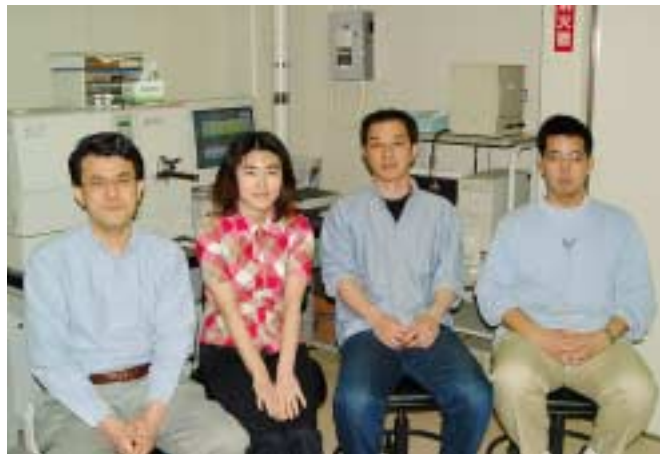
シリコン基板上に分子を直接結合し，シリコン・炭素結合を起点とする分子組織体を構築し，信号の入出力インターフェースとしての特性を調べる。



（後列左から）荒 正人、山田 亮、藤原栄一、埴田博一
（前列左から）高田正基、大石 修

3．分子エレクトロニクス素子のための有機半導体の開発

新しい電子物性を目指した分子物質開発のため， π 電子系有機分子の設計と合成を行う。特に，有機エレクトロルミネッセンス素子のためのアモルファス性電子輸送材料や有機トランジスタのためのn型半導体の開発を進めている。



（左から）鈴木敏泰、伊藤歌奈女、阪元洋一、白沢信彦

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

光合成を規範とする人工の物質変換システムの構築を目指して研究を進めている。具体的な研究テーマは以下の通りである。光励起電子移動と化学反応が組み合わさって進行する系を開発する。電子移動によって駆動される触媒的物質変換反応を開発する。ナノメートルサイズの物質の電気化学的特性について調べ、電子移動反応への展開をはかる。



(左から) 細川洋一、永田 央、菊澤良弘

ナノ光計測研究部門

金属ナノクラスターの創製と触媒機能

有機分子によって保護・安定化された金属ナノクラスターを大量に調製し、それらの構造と反応性を調べている。特に、生成・分離・評価という一連の調製プロセスに対して様々な技術を開発・導入しながら、サイズが揃ったクラスターの調製法の開拓に取り組んでいる。金属クラスターのサイズ特異的な触媒機能の発現機構を明らかにすると共に、新規ナノ触媒の創出を目指す。



(後列左から) 臼井千夏、佃 達哉
(前列左から) 村山美乃、根岸雄一

界面分子科学研究部門 (流動研究部門)

1. 空間分解分光法による光と固体表面ナノ構造との相互作用の研究

固体光触媒表面で起る光触媒化学反応は、光(主に紫外光)照射によって惹き起される固体光触媒バルクおよび表面での電子励起と、それに引き続く不均一触媒化学反応により構成されている。前者は通常、周期境界条件を仮定する、いわば無限の結晶構造を想定したバンドモデルで説明され、一方それに引き続く不均一触媒化学反応は、個々の反応分子と、触媒表面に存在するナノメートルオーダーの吸着サイトならびに反応サイトとの相互作用に強く依存する、すぐれて局所的な現象である。空間的には両極端を想定するこの両プロセスを包含した固体光触媒反応の統合的理解には、光による電子励起過程とその後の物理プロセスの原子レベルでの局所挙動に関する解明が必要不可欠である。

ここではこの目的のために、空間分解能の非常に高い走査型トンネル顕微鏡(STM)に分光測定機能を付加した、いわば空間分解分光法とでも言うべき方法を使用する。この方法により、不

均一系固体光触媒の局所構造ならびにそこにおける電子状態をナノおよび原子のレベルで観察し、その光触媒活性と局所構造および局所電子状態との相関を明らかにして、光・触媒表面・反応分子間の相互作用をナノ・原子のレベルで理解しようと試みる。またここで開発・使用される空間分解分光法は、固体光触媒のみならず、太陽電池や微粒子レーザーなどにおける光と固体との相互作用とその表面ナノ構造との関係を見るための研究にも拡張できるものと期待している。



(後列左から) 高嶋圭史、久保園芳博、横山高博、吉村大介、松本太輝、清原公平
(前列左から) 高林康裕、佐々木時代、李 艶君、小宮山政晴、奥平幸司

2. シンクロトロン放射光による有機薄膜の表面物性の研究

有機分子は数百万種におよび、さらに官能基の種類を変えることにより新しい機能の導入が可能である。このような有機分子からなる薄膜は高機能をもつ電子デバイスとして期待されているが、表示素子としてはすでに実用化がはじまっている。有機デバイスの特性は、それを構成している有機分子の種類だけでなく、膜表面の構造(分子配向)や電子状態と深く関連している。われわれは、種々の基板(グラファイトなどの層間化合物や金属)上に作成した単分子層のオーダーで制御された有機超薄膜、実用素子により近い複雑な構造をもつ高分子薄膜等に注目する。波長選択性、直線偏光性というすぐれた特性をもつシンクロトロン放射光による角度分解紫外光電子分光を中心とした表面敏感な測定法を用いて、有機薄膜の表面および有機/無機(金属)界面の構造(分子配向の定量的決定)と電子状態を明らかにすることを目的としている。

3. フラーレンをベースにした界面・ナノ物性の開拓

炭素原子がケージを構成した分子であるフラーレンは、それ自身が1 nm程度の大きさをもつために、ナノサイエンス・ナノテクノロジーの基幹物質としての期待が高まっている。フラーレンは、固体において超伝導、低次元物性、強磁性を始めとする興味深い性質を示してきた。最近では、フラーレン結晶を用いた電界効果トランジスター(FET)構造によって117 Kという極めて高い超伝導も実現している。FETにおいては、ゲート電極に電場をかけることによって絶縁膜であるアルミナから結晶に電子やホールが導入されて超伝導が実現しており、アルミナとフラーレン結晶の界面が超伝導実現の鍵を握っていると考えられている。現在、我々は、フラーレン薄膜によるFETの研究を進めており、強誘電性絶縁膜を利用することによる高キャリア導入時の物性の探索を行っている。また、*p*-シリコンへのフラーレンの蒸着によって*pn*接合の実現に向けた研究を進めている。これらは、フラーレンの界面での物性発現を目指した例である。一方、ナノメータサイズでの物性を探索するために、フラーレンをシリコン清浄表面に蒸着して、ナノメータサイズで様々なパターンを形成し、ナノメータサイズのフラーレンパターンを走査トンネル顕微鏡(STM)で直接観察するとともに、その電子状態を走査トンネル分光(STS)で調べる研究を進めている。さらに、ナノメータサイズでの直接的な電気伝導測定の手法についても研究を行っている。この研究のターゲットとなるフラーレンは、金属原子をケージに内包した金属内包フラーレンや、カーボンナノチューブとの複合系などの多岐に渡っており、量子伝導特性のように固体では現れなかった物性がナノメータサイズでは出現してくることが期待される。

分子クラスター研究部門（流動研究部門）

1．超強磁場による化学反応・物理変化の制御

物質固有の特性のひとつである磁性が、化学反応、物理変化や生物の行動にどのような影響を与えるのか、そのメカニズムを解明するとともに、磁性による化学反応・物理変化の制御——磁場による反応制御——についてこれまで種々の研究を行ってきた。例えば、磁場を利用して、高度に配向した結晶や薄膜など高品位な物性を持つ物質の創出を試みる研究や、有機光化学反応の磁場効果などの研究を行ってきた。ここでは特に、



（左から）太田明代、上地一郎、藤原昌夫、大庭 亨、石田俊正、谷本能文、藤原海人
“15テスラ”の超強磁場が、金属樹成長反応、光触媒反応などの化学反応やベンゾフェノンの結晶成長・カーボンナノチューブの配向といった物理過程にどのような影響を与えるのか、ナノ構造・クラスター構造の磁場制御などを視野に入れた特色ある研究にチャレンジする計画である。

2．化学反応のポテンシャル面の効率的生成

分子の反応を主に対象として、コンピュータを用いて研究を行っている。最近主に進めている研究は、反応のポテンシャル面の効率的で簡便な生成法である。ポテンシャル面とは、原子核のさまざまな相対的な位置に対する位置エネルギーを立体的に表したものである。原子核を動かしながら電子の運動について調べる方法も実用されているが、計算が大変である。そこで、内挿法に基づく簡便で効率的なポテンシャル面の生成法を探索している。うまくいけば、たとえば、大気汚染に関係する反応などを理論的に調べたりするのがますます効率的に行われると期待される。

3．優れたリサイクル能をもつナノデバイスの開発

次世代のデバイスには高い集積度だけでなく、必要なときだけ機能し、不要になったら容易に分解・リサイクルできるような性質をもたせたい。我々は自己会合性分子に種々の機能を付与し、そうした「機能ブロック」を会合させることにより、上記のコンセプトに基づくデバイスの実現を目指している。本年度はこれまで用いてきた「機能ブロック」を改良し、デバイスの機能の多様化とリサイクル能の向上を図りたいと考えている。