

二国間交流事業 共同研究報告書

令和4年4月15日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[代表者所属機関・部局]
東京工業大学・理学院
[職・氏名]
特任准教授・藤井 慎太郎
[課題番号]
JPJSBP1 20192503

1. 事業名 相手国: チェコ (振興会対応機関: CAS)との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 単分子接合に特徴的な機能、物性の探索および発現機構の解明

(英文) Design and Control of Single Molecule Junctions

3. 共同研究全実施期間 2019年4月1日 ~ 2022年3月31日 (3年0ヶ月)

4. 相手国代表者(所属機関・職・氏名【全て英文】)

Czech Academy of Sciences・J.E. Purkyne Fellow・Vázquez Hector

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額	1,976,285 円
内訳	
1年度目執行経費	1,891,585 円
2年度目執行経費	84,700 円
3年度目執行経費	- 円

6. 共同研究全実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	7名
相手国側参加者等	3名

* 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣・受入実績

	派遣		受入
	相手国	第三国	
1年度目	2	5	0(0)
2年度目	0	0	0(0)
3年度目	0	0	0(0)
4年度目	-	-	-(-)

* 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣:本委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。

受入:相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は本委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流実績の概要・成果等

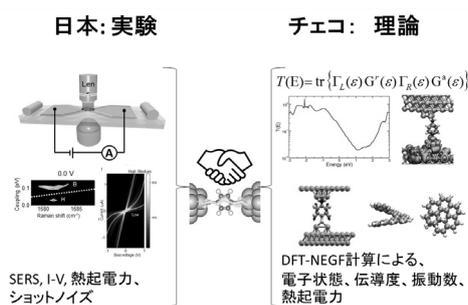
(1) 研究交流実績概要(全期間を通じた研究交流の目的・研究交流計画の実施状況等)

単分子接合研究を推進するには、実験と理論シミュレーションの融合が必要不可欠であり、実験を中心とする日本グループと、理論シミュレーションを中心とするチェコのグループの研究交流は重要である(図)。単分子接合に関する研究では、原子サイズの電極の間に捕捉された単分子を直接観測することが難しく、電気伝導度、熱起電力、ラマン信号などの単分子接合の物性量から、単分子接合の構造を議論する必要がある。日本のグループは、電流電圧($I-V$)特性、熱起電力、表面増強ラマン(SERS)信号など多数の物性量を同時に測定することが出来る技術を有する。一方、これらの物性量を単分子接合について理論計算するためには、構造最適化、電子-格子相互作用、熱の取り扱いなど、高い計算技術を要する。チェコのグループは単分子接合の理論計算について、突出した高い技術を有している。本研究プロジェクトでは、若手研究者や大学院学生の力を存分に発揮できる場を提供しながら、積極的にチェコとの国際共同研究を行うことで、次世代のナノスケールの分子科学研究を担う人材育成に貢献する。また、単分子接合の $I-V$ 特性、熱起電力、SERS の同時計測を行うことで単分子接合の基礎的な構造や電子物性を実験と理論の両面から決定することを目標とする。

2019 年度は、7月に日本側の研究者1名と大学院学生1名がチェコ科学アカデミーを訪問し、講演と共同研究の打ち合わせを行った。また、同時期に、日本側から4名がスウェーデンで開催された国際会議(IVC-21)に参加し、口頭3件、ポスター1件の成果発表を行った。チェコ側からも3名が IVC-21 に参加し、会議中に、新たに得られた単分子の熱起電力や SERS に関する共同研究の結果について議論を行った。加えて、日本側の研究者1名がポルトガルで開催された国際会議(META2019)にて共同研究の成果について招待講演を行った。2020年度は、チェコ側から3名の研究者と日本側の研究者1名と大学院学生3名が日本で開催される国際会議(ISSS-9)に参加し共同研究の成果を発表予定であった。しかし、新型コロナウイルス感染症の拡大が収まらず、ISSS-9が2021年11月に延期された。共同研究の遂行上、ISSS-9への参加と共同研究の成果発表は必要不可欠であり、代替ができないため、相手国代表者と調整の結果2021年度11月に延期することとなった。2021年度は、チェコ側から2名の研究者と日本側の研究者1名と大学院学生1名が日本で開催された ISSS-9 に参加し共同研究の成果について発表を行った。当初の想定に反し、新型コロナウイルス感染症の拡大が収まらず、チェコから日本に渡航できないことが判明し、オンラインでの学会参加となったため、当初予定していたチェコの研究者の日本滞在に関わる研究経費が不執行となった。ISSS-9では、チェコとの共同研究について大学院生が発表を行ったが、その成果が認められ、Young Researchers' Awardを受賞した。2022年度には、単分子接合の熱起電力の変調性に関する共同研究の成果を学術論文として発表予定である。

(2) 学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

これまで単分子接合研究により、トランジスタ、ダイオード、スイッチなど様々な機能が報告されてきた。しかし、例えばバルクで光により可逆的に変化するフォトクロミック分子を用いて単分子スイッチを作製すると、可逆性が失われるなど分子の特徴が十分には引き出せていない。また再現性が低いという課題も単分子接合研究にはある。本研究はこの単分子接合研究の抱える大きな問題を解決する重要な研究である。界面相互作用を利用することで単分子接合に孤立分子や結晶に観測されていない機能、物性を引き出すことで解決を図る。本プロジェクトでは、外力により界面相互作用を制御することで、単分子接合の熱起電力が変調可能であること、そして熱起電力の変調の起源が界面相互作用に依存する単



図：日本とチェコの共同研究

分子接合の電子状態変化であることを実験と理論の両面から明らかにした。

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学术交流することによって得られた成果)

日本側の単分子接合の伝導度とラマン信号の同時計測法と、チェコ側の精密な第一原理シミュレーション技術を組み合わせることで、単分子の結合状態を同定できる単分子分光法の開発を行った。その結果、電極上の単分子の吸着構造に応じて、そのラマン信号が変調されることを実験と理論の両面から明らかにした。この成果を、国際共著論文として発表した [文献 1]。 [文献 1] S. Kaneko, E. Montes, S. Suzuki, S. Fujii, T. Nishino, K. Tsukagoshi, K. Ikeda, H. Kano, H. Nakamura, H. Vázquez, M. Kiguchi, Identifying the Molecular Adsorption Site of a Single Molecule Junction Through Combined Raman and Conductance Studies, Chem. Sci. 10, 6261–6269, 2019 (裏表紙絵に採択)

また、2022 年度には、上述の単分子接合の熱起電力の変調性に関する共同研究の成果を学術論文として発表予定である。

(4)社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

単分子接合は、分子の多様な性質を利用して、さまざまな機能を持つ分子素子を実現できることから、社会的に注目されてきた。単分子素子を実現するためには、電極と分子の間の界面相互作用が単分子の電気伝導特性や熱電特性などの物性に与える影響を理解し、制御することが必要である。本研究では実験と理論の両面からこの課題に取り組み、界面相互作用を通じて、単分子素子の物性の制御を実現する新たなアプローチ法を示した。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取り組み、成果)

本研究プロジェクトでは、積極的に若手研究者や大学院学生にチェコとの国際共同研究に参画していただいた。海外の研究者と共同研究を行うこと、セミナーで自分の研究を発表すること、相手の研究発表を聞くこと、そして海外に滞在することは、若手研究者にとって貴重な体験となった。博士課程において、本研究プロジェクトに参画した大学院生は、共同研究の学会発表で数々の講演賞を受賞した。また、博士号取得後、日本学術振興会事業を通じて海外特別研究員として留学し、国際的な若手研究者として活躍している。

(6)将来発展可能性(本研究交流事業を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

本研究では界面相互作用を利用した新しいアプローチで単分子接合に特徴的な熱電能を創出した。この技術を応用することで、単分子接合の新しい機能、物性探索法として、単分子接合研究に広く展開できる。また、本研究により構造や電子状態を厳密に規定した単分子接合の物性研究が可能となれば、より厳密な議論が可能となり、機能、発現機構が明確になる。得られた知見を分子設計に還元することで、より高機能、かつ再現性の高い単分子接合を実現することができ、単分子素子を実現する新たな可能性を切り拓くことが期待される。

(7)その他

国際学会受賞

一色裕次(博士課程3年) ISSS-9 Young Researchers' Award (The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9)) Electronic Structure of a Single-Molecule Junction during the Junction-Breaking Process 2021 年 12 月

国内学会受賞

一色裕次(博士課程3年) 講演奨励賞 スチューデント部門 (2021 年日本表面真空学会学術講演会) 単分子接合の結合力と電気伝導性 2022 年 2 月 10 日

一色裕次(博士課程3年) 分子科学会優秀講演賞 (第 15 回分子科学討論会) 金属-分子結合の破断過程における単分子接合の電子構造の評価 2021 年 10 月 25 日