

# 単一分子エレクトロニクスの実現に向けた素子設計

大戸 達彦  
OHTO Tatsuhiko

大阪大学大学院基礎工学研究科 助教

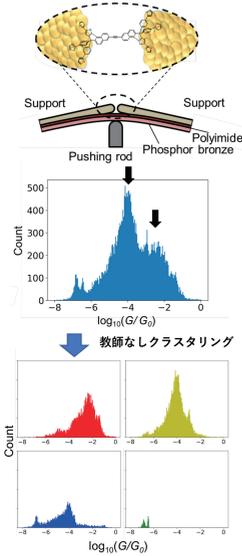


図1 機械学習（クラスタリング）によって、膨大な単一分子電気伝導度のデータを分類



分子1つを電極間に架橋した単一分子接合は、電子デバイスの小型化や有機物ならではの電気応答の利用に向けて研究が進められています。単一分子の架橋構造を直接視認することはできず、電気伝導度の計測を通じて分子架橋を確認することになるため、単一分子デバイスの電気伝導特性の計測と評価の手法を確立することは重要な課題です。我々は、ブレイクジャンクション法と教師なしクラスタリング、第一原理計算を組み合わせることで、架橋構造の特徴に従って電気伝導度を分類する手法を開発しました（図1）。今後は、最先端のデータサイエンス手法を単一分子エレクトロニクスに応用することで、より精密な電気伝導特性の評価を目指していきます。加えて第一原理的手法に量子コンピューティングを導入することで、単一分子デバイスの伝導特性に関する精度の高い理論予測を実現し、新しい分子デバイス開拓と性能評価を推進していきます。

## キーワード

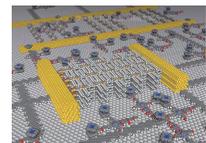
分子エレクトロニクス、第一原理計算、機械学習 量子技術

## 応用分野

ナノスケール電子デバイス、触媒反応、生体模倣デバイス

## [研究の先に見据えるビジョン] 単一分子伝導度の制御と組織化による機能の創出

近年では単純に電気を流すだけではなく、ダイオードやスイッチング機能を持つ分子が次々と報告されています。次のステージとして、そのような機能を持つ単一分子を組み合わせ、組織化することで、分子デバイスの短所である不安定性を克服し、効率よく、かつ冗長性のある分子デバイスの実現を目指しています。我々は、電場・磁場・酸化還元反応などの外部刺激を用いて単一分子の電気伝導度やスピン状態を制御する手法を開拓し、特に外場による電子状態制御の機構を理論的に解明することで個々の分子のスイッチ機能を増大させます。また、分子配向を制御しつつ電極間に架橋する分子設計・デバイス作製の研究者と連携することで、多数の分子が協働する新しい分子デバイスの実現を目指します。



様々な分子を自在に組み合わせた新しいデバイス