

分子を用いた脳型情報処理デバイスの実現へ基礎特性を解明

—化学結合制御に基づく非線形電気特性を実証—

【研究成果のポイント】

- ◆ 分子エレクトロニクスの研究分野では、脳のような低エネルギーで効率的な情報処理を実現するため、分子の性質を活用した情報処理デバイスの創成が目指されている。分子を介した非線形電気伝導特性は、ダイオードやメモリ、スイッチなどのデバイスの構成要素としての利用が期待できる。より高い非線形性を実現するために、分子と電極の結合状態と非線形特性の関係を理解することが重要である。
- ◆ 微小な電極間に分子が固定化された分子デバイスにおいて、分子と電極間の結合状態を化学的に制御することが、分子固有の性質（電子状態）を介した非線形電気伝導特性（一定範囲の電圧印加では電気を流さず、範囲外の電圧変化に対して電流値が非線形に変化する電気特性）を実現するために重要である事を実証した。
- ◆ 化学結合制御による非線形電気特性は、将来の脳型情報処理デバイスへの展開が期待できる。

❖ 概要

大阪大学大学院理学研究科の大塚洋一助教、西嶋知史氏（研究当時：大学院生（博士前期課程））、松本卓也教授らの研究グループは、分子を介した非線形電気特性の発現のために、分子と電極間の化学結合の制御が重要であることを明らかにしました。

我々の脳は低いエネルギーで効率的に情報処理を行うことができます。脳の神経細胞ネットワークでは、一定以上の強さの刺激に対して電位パルスが非線形的に発生し、伝搬することが知られています。分子エレクトロニクスの研究分野では、脳型の優れた情報処理を実現するために、電圧の印加量に対して電流値が非線形的に変化する分子デバイスの構築が求められています。そのためには、分子固有の電子状態や、分子と電極の化学結合をデザインし、分子と電極間の電流量を調整するための仕組みを理解し、実現することが極めて重要です。

今回、微小な電極間に分子と金ナノ粒子が直列に接続された分子デバイス（金ナノ粒子ブリッジジャンクション）を用いて、分子と電極間の化学結合を制御することにより、一定の大きさの電圧印加に対して分子の電子状態を介した電気が流れる、共鳴トンネル伝導を誘起し、閾値電圧を有する非線形電気特性が実現することを発見しました（図1）。

本研究成果は、明確な非線形電気特性を有する分子デバイスをデザインする上で有用な知見であり、分子の電子状態に基づく特異な非線形電気特性の実現と、それを活用した脳型情報処理デバイスへの展開が期待されます。本研究成果は、米国科学誌「ACS Applied Materials & Interfaces」に、6月25日に公開されました。

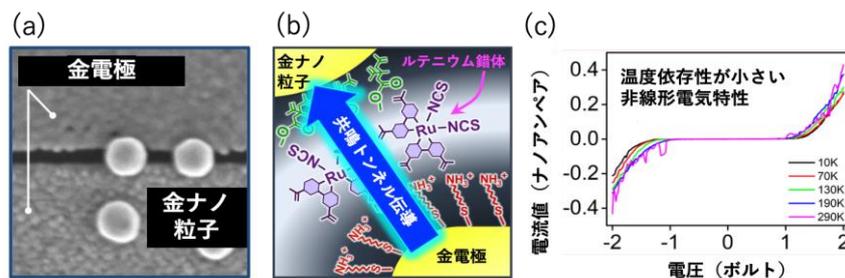


図1 (a) 金ナノ粒子ブリッジジャンクションの電子顕微鏡写真。ルテニウム錯体が固定された金電極間に、金ナノ粒子が架橋している様子を示す。(b) ルテニウム錯体を介した共鳴トンネル伝導の模式図。ルテニウム錯体は金電極上のアルカンチオール分子の上に固定されており、金電極とルテニウム錯体は電子的にデカップリングされている。(c) 非線形電気特性の温度依存性。±1Vを境に、電流値が大きく変化することが、幅広い温度領域にわたって計測された。



❖研究の背景

これまで、非線形電気特性を示す分子は、分子ダイオードや、分子メモリ、分子スイッチ^{*1}としての機能を持つことが報告されてきました。近年は、非線形電気特性を有する分子ネットワーク構造が、脳を模倣した電気スパイクの発生や確率共鳴現象^{*2}の発現に有用であるという報告がなされており、生体を模倣した情報処理デバイスの実現には、分子の非線形電気特性の理解と活用は今後一層重要になります。

非線形電気特性を獲得するための一つの方法として、共鳴トンネル伝導の利用が挙げられます。共鳴トンネル伝導は、電極間の分子の電子状態を介して、電子が電極間を移動する現象です。閾値電圧を越える条件で電流値が増加することが特徴であり、幅広い温度領域において非線形電気特性が得られる事が期待されます。これまでに共鳴トンネル伝導を用いた研究は報告されてきましたが、分子と電極の化学結合と共鳴トンネル伝導の相関を系統的に検討することが求められていました。

本研究では、金ナノ粒子ブリッジジャンクション(図 2(a))とルテニウム錯体^{*3}を用いて、電極と分子の化学結合が異なるデバイス構造(図 2(b,c))を形成しました。電極上とルテニウム錯体の化学結合の制御には、自己組織化単分子膜を用いました。ルテニウム錯体の配向や表面電位の評価には、分光分析法(X線光電子分光法、赤外反射吸収分光法、ケルビンプローブフォース顕微鏡法)を活用しました。

電気特性の検討の結果、ルテニウム錯体がアルカンチオール分子を介して電極に固定された場合に、1ボルトの閾値電圧を有する非線形電気特性が発現すること、電圧に対する電流値が、温度変化に対してあまり変化しない(温度依存性が小さい)ことを発見しました。さらに、非線形電気特性は共鳴トンネル伝導モデルによるフィッティングと良い一致を示すことも明らかになりました(図 2(d))。

以上の結果は、分子と電極間の電子デカップリング^{*4}が、分子固有の電子軌道を介した共鳴トンネル伝導を発現する上で重要であることを示唆するものとなりました。

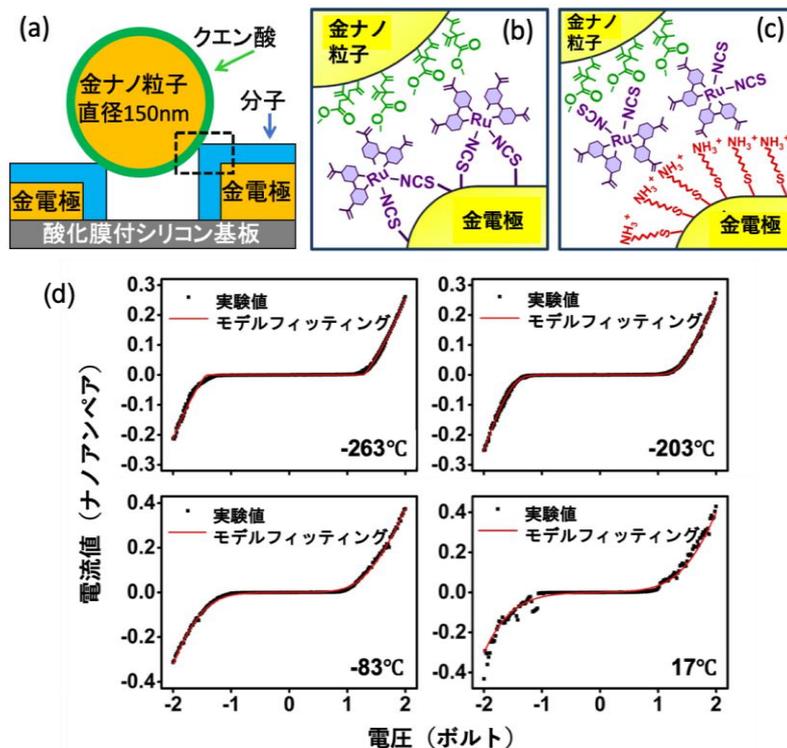


図 2 (a) 金ナノ粒子ブリッジジャンクションの模式図。金電極表面に分子膜が作られており、分子膜間を金ナノ粒子が架橋している様子を示す。(b,c) 分子膜の模式図。(b)では分子(ルテニウム錯体)が金電極に直接的に化学結合を形成する。(c)では分子が金電極表面のアルカンチオール分子に結合する。(d) 非線形電気特性の実験データと、共鳴トンネル伝導モデルを用いたフィッティングの結果。異なる温度条件下において、実験データとモデルが良い一致を示している。

Press Release

❖ 本研究成果が社会に与える影響

本研究成果は、明確な非線形電気特性を有する分子デバイスをデザインする上で有用な知見であり、分子の電子状態に基づく特異な非線形電気特性の実現と、それを活用した脳型情報処理デバイスへの展開が期待されます。

❖ 特記事項

本研究成果は、2019年6月25日に米国科学誌「ACS Applied Materials & Interfaces」(オンライン)に掲載されました。

タイトル: “Chemical Control of Electronic Coupling between a Ruthenium Complex and Gold Electrode for Resonant Tunneling Conduction”

著者名: Yoichi Otsuka, Satoshi Nishijima, Leo Sakamoto, Kentaro Kajimoto, Kento Araki, Tomoki Misaka, Hiroshi Ohoyama, and Takuya Matsumoto

ACS Appl. Mater. Interfaces 2019, 11, 27, 24331-24338.

DOI: 10.1021/acscami.9b05569

なお、本研究は日本学術振興会科学研究費補助金 JP25110014, JP24360011, JP16K21143, P16K13667 の助成を受けたものです。

❖ 用語説明

※1 分子ダイオード、分子メモリ、分子スイッチ

電極間に分子を固定し、電極間に電圧を印加した場合に流れる電流の変化の違いにより、異なる種類の素子としての役割が期待できます。分子ダイオードは一方方向の電圧に対して電流を流すことができます。分子メモリは電圧によって抵抗値を一定の値に保持することができます。分子スイッチは特定の電圧印加条件によって、抵抗値を高い状態と低い状態に変化することができます。

※2 確率共鳴現象

弱い信号にノイズ信号を加えることによって、一定の確率で信号を増強することができる現象。ヒトの触覚や知覚が確率共鳴現象によって向上することや、脳の情報処理における確立共鳴現象の貢献が報告されています。

※3 ルテニウム錯体

ルテニウム原子に配位子が結合した集合体。本研究では、光増感型太陽電池で利用されている N-719 を使用しました。太陽電池では電解質中の N-719 の光化学反応を利用する事で光エネルギーを電気に変換することが可能になります。本研究では、乾燥状態の N-719 の非線形電気特性を明らかにし、分子素子への展開を示しました。

※4 電子デカップリング

分子と電極間における、電荷の授受のしにくさの指標。電子デカップリングが大きくなると、電極のフェルミ準位と分子のフロンティア軌道が空間的に乖離し、分子のフロンティア軌道を共鳴トンネル伝導に活用する事が可能になります。



国立大学法人 大阪大学

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 1-1

TEL: 06-6877-5111 (代)

www.osaka-u.ac.jp

Press Release

❖ 本件に関する問い合わせ先

<研究に関すること>

大阪大学 大学院理学研究科 教授 松本卓也(まつもとたくや)

TEL:06-6850-5401 FAX: 06-6850-5403

E-mail: _matsumoto-t@chem.sci.osaka-u.ac.jp

<広報・報道に関すること>

大阪大学 理学研究科 庶務係

TEL:06-6850-5280 FAX:06-6850-5288

E-mail: ri-syomu@office.osaka-u.ac.jp