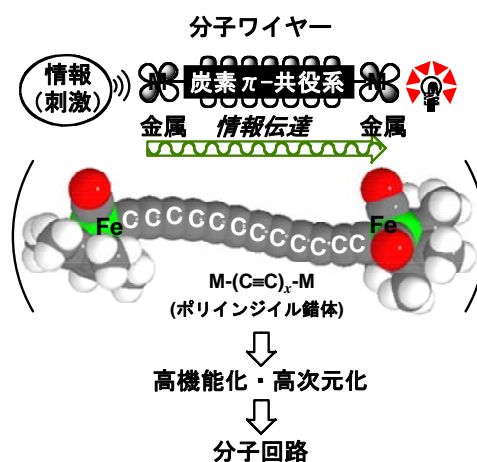


ディビジョン番号	5
ディビジョン名	錯体化学・有機金属化学

大項目	2. 有機金属化学
中項目	2-2. 有機金属クラスター
小項目	2-2-4. 有機金属分子ワイヤー

概要（200字以内）

トランジスタ等の論理回路ならびにリード線、スイッチ等の電子部品を分子で構成する分子回路は、究極の電子回路の小型化法であり、 $\pi$ 共役系を含む多核金属錯体研究という観点から、現在分子ワイヤーについて研究が進展しているが、分岐構造を持つ高次元ワイヤーやスイッチ、論理回路などの機能性部分については開発途上である。錯体合成化学を基盤に、新規物性発現化合物開発に展開する有機金属化学の新しい研究テーマである。



現状と最前線

電子回路の小型化に向かって、現行のトップダウン方式の回路作成法と並んで、「分子回路」が有望なミニチュア化法の一つとして注目されている。分子回路とは、ダイオード、トランジスタなどの論理回路ならびにリード線、スイッチなどの電子部品を分子で構成するものであり、その実現のためには、各パーツの合成とその評価について、実際にこれらを組み合わせて回路を作成する必要がある。

最も単純な「分子ワイヤー（リード線）」については、金属フラグメントが $\pi$ 共役系の両末端に結合した一連の多核錯体が1990年代から活発な研究の対象となった。共役系部分でエネルギー的なシンクを作らないこと、また末端金属部分とのエネルギーギャップをできるだけ小さくして電子が系全体にできるだけ効率よく移動できるようにするためには、炭素原子で構成される $\pi$ 電子系が最も有効である。中でも複数のアセチレンユニットが結合して構成されたポリインジール錯体については、様々な金属フラグメントを含む誘導体が合成され、その性能の比較評価、炭素鎖長に対する依存性、電子伝達のメカニズムなどの詳細な研究が行われた結果、現在最も有望視されている。この他オレフィン、芳香族環などを構成要素とする分子ワイヤーについても広範に研究が進められている。一方、有機金属化学側から見れば、目標化合物は炭素集合体を配位子とする多核金属錯体ととらえることもでき、金属表面吸着種のモデル化合物としての研究や、炭素集合体が常に $\pi$ 電子系を含むことからこれと金属

中心の相互作用を分子レベルで解明することは、構造・物性の観点からも興味深い。

一次元ワイヤーと比較して、分岐構造を持つ二次元・三次元ワイヤーについてはこれまでほとんど報告がなく、またスイッチ、ダイオード、論理回路などの機能性部分については、研究のごく初期段階にあり、未知の領域である。今後は例えばクロミック化合物などの機能性有機基を導入して部品開発の基本的な設計概念の確立を目指すと共に、実際に大規模回路の合成に向けて研究を展開する必要がある。しかし、目標化合物は、有機・錯体部分を含んだ複雑な構造となるために、その合成のためには総合化学技術としての合成化学の基盤を充実させると共に、これを十分に活用する必要がある。また分子回路を合成することは将来的には可能であると予測されるが、途中の段階では現行のトップダウン方式の技術と組み合わせることや、研究によって解明された原理をトップダウン方式に展開するなど、実用化を早める工夫も考慮する必要がある。

以上のように錯体化学的な合成化学を基盤に、新規物性を発現する化合物開発に展開することは、有機金属化学に新しい潮流を導入してこの領域を活性化できる側面も併せ持っている研究テーマである。

J. Jortner and M. Ratner, *Molecular Electronics*, Blackwell Science, Oxford, 1997. M. Ratner, *Nature*, 2000, **404**, 137. J. M. Tour, *Acc. Chem. Res.*, 2000, **33**, 791. K. W. Hipps, *Science*, 2001, **284**, 536. R. L. Carroll and G. B. Gorman, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, 2002, **41**, 4378. *Molecular Nanoelectronics*, eds. M. A. Reed and T. Lee, American Scientific Publishers, Stevenson Ranch, CA, 2003. A. C. Benniston, *Chem. Soc. Rev.*, 2004, **33**, 573. P. J. Low, *Dalton Trans.*, 2005, 2821. M. I. Bruce and P. J. Low, *Adv. Organomet. Chem.*, 2004, **50**, 231.

#### 将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題
- ・ スイッチ、ダイオード、トランジスターなどの分子パーツ設計の基本的な指針ならびに合成方法を確立する。
- ・ 回路パーツとしての性能評価を行う。
- ・ 初歩的な論理回路を構成し、性能評価を行う。
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
- ・ 大規模回路を合成する。
- ・ トップダウン方式の回路と組み合わせて、実用的な回路構成に組み込む。

#### キーワード

分子回路 分子ワイヤー モレキュラーエレクトロニクス

(執筆者： 穂田 宗隆 )