

# 分子接合制御と単一分子伝導スイッチ

## Control of single molecular junction realizing conductance switching

○中村美紀<sup>1)</sup>, 吉田昭二<sup>1)</sup>, 中村徹<sup>2)</sup>, 目良裕<sup>3)</sup>, 武内修<sup>1)</sup>, 重川秀実<sup>1)</sup>  
(筑波大学<sup>1)</sup>, AIST<sup>2)</sup>, 東京大学<sup>3)</sup>)

Abstract : We have carried out dynamic analysis by STM on  $I$ - $V$  characteristics of a single molecule junction. Abrupt switching of single molecular conductance, in addition to continuous change, was realized by controlling the molecular conformation between electrodes. Comprehensive explanation for the mechanism was obtained by theoretical calculations based on DFT+NEGF.

単一分子デバイスにおいて、分子の構造変化に対し伝導特性が可逆的かつ鋭敏に変化する場合、光、電場、異分子吸着などへの反応を利用したセンサー応用等が期待される。我々はこれまでに Si-STM 探針を用いた単一分子接合の形成、及びその解析に初めて成功してきた。用いた diethynylbenzene(DEB)分子は Si 電極と強固に Si-C 結合することから、分子接合を破断することなく外力による分子形状の影響を調べることが可能になる。

異なる電極間距離に対し伝導特性( $I$ - $V$ 曲線(図1))を測定したところ、電極間距離を遠ざけたときに顕著に電流が流れやすくなるという特異な性質が明らかになった。この変化を詳しく見るために、連続的に電極間距離を変化させて  $I$ - $V$ 曲線を計測した。図2に結果を示すように、ある距離(-0.28nm)を境にしてコンダクタンスが急峻に変化する現象が見出され、連続的な変化と瞬間的な変化を生じさせる2つの異なる機構の存在が再現性良く確認された。その可逆性から我々は、電極間距離変化によって、図3左、中央に示すような連続的な形状変化に加えて、シス・トランス間の構造変化(図3中央、右)が生じ、瞬間的なコンダクタンス変化が引き起こされるものと考えた。

この変化を理論的に解析するために、まず、シス、トランス体それぞれの分子接合において、電極間距離を変えながら最小構造エネルギーを求めた結果、ある距離においてシス、トランス体間で、分子接合の安定な状態が入れ替わることを確認した。次に、密度汎関数と非平衡グリーン関数法を用いて、それぞれの構造に対して伝導特性を計算することで、観察された現象を統一的に説明することが可能であることが確認された。

計算や実験結果の詳細は本講演にて議論する。

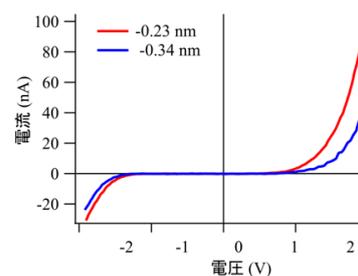


図1 Si分子接合の  $I$ - $V$ 曲線

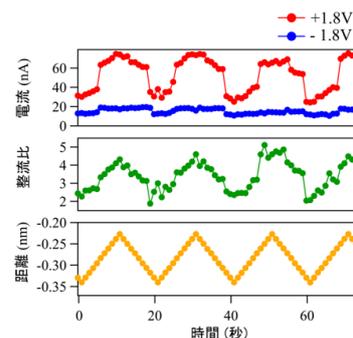


図2 電極間距離に対するコンダクタンスの変化

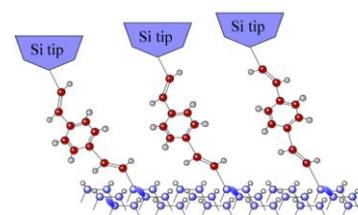


図3 分子接合のモデル図(左、中央; シス型、右;トランス型)

<sup>1)</sup>M. Nakamura, S. Yoshida, O. Takeuchi, and, H. Shigekawa Institute of Applied Physics, University of Tsukuba, Tsukuba, Ibaraki 305-8573, Japan, <http://dora.bk.tsukuba.ac.jp>.

<sup>2)</sup> T. Nakamura: AIST

<sup>3)</sup>Y.Mera: The University of Tokyo,