

3次元計測法を用いた単一分子接合の分子形状効果

○谷中 淳, 吉田 昭二, 杉田 佳弘, 武内 修, 重川 秀実

筑波大数理

E-mail: jun_t@bk.tsukuba.ac.jp, http://dora.bk.tsukuba.ac.jp

単一分子を用いた電子デバイスを構築する場合、重要なのは、単一分子の電気伝導特性の解明および単一分子とその接点まで含めたダイナミクス解明である。特に単一分子と接点のダイナミクスは、分子と接点の構造変化による電気伝導特性の変化に強く関係しているため、構造変化を含めた分子ダイナミクスと電気伝導特性を同時に解明する必要がある。これまで走査トンネル顕微鏡を用い、単一分子接合を3次的に制御しながらコンダクタンスを測定できる3D dynamic probe methodを開発し、第一原理計算と組み合わせることで分子ダイナミクスと電気伝導特性の関係について解明を行ってきた[1-3]。本研究では、電極間隔が大きいときと小さいときの1,4-ベンゼンジチオール(BDT)および1,4-ベンゼンジアミン(BDA)に対し3D dynamic probe methodと第一原理計算を適用し、分子のダイナミクスとコンダクタンス変化の関係について比較を行った。

図1(a)および1(b)に電極間隔が大きい場合および小さい場合における計算と実験で得られたBDTのコンダクタンスカーブを示す。電極間隔が大きい場合、計算と実験においてコンダクタンスカーブの形状はほぼ一致した。BDTのベンゼン環の回転は僅かであり、コンダクタンスの変化はAuアトームおよびS原子とAu表面との間の透過率に依存している。一方、電極間隔が小さい場合、計算においてコンダクタンスの急激な減少が実験に比べ短い距離で生じている。これは、計算では伝導パスの破断後、ベンゼン環の回転によるコンダクタンスの変化が生じているのに対し、実験では上部電極(STM探針)とBDTとの間の立体障害のために、ベンゼン環の回転の後に伝導パスの破断が起こっていることを示している。

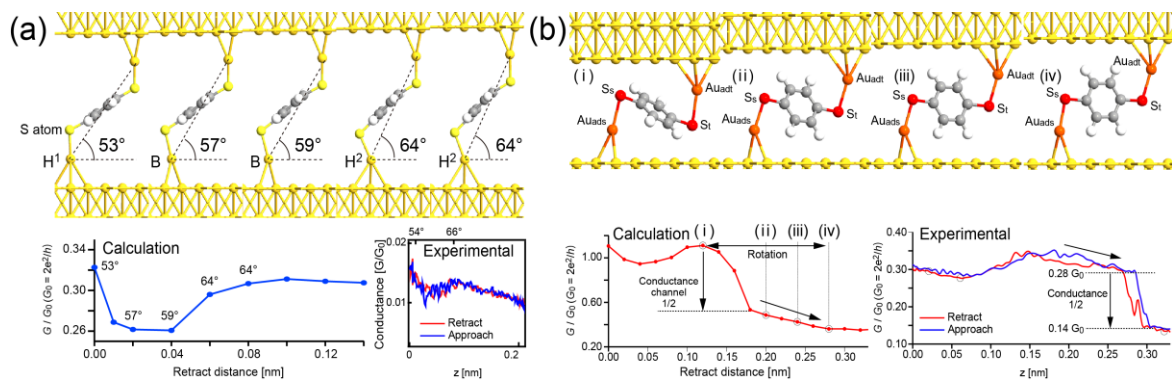


図1 計算と実験から得られたBDTのコンダクタンスカーブ。(a)電極間隔が広い場合、(b)電極間隔が狭い場合。

[1] S. Yoshida *et al.*, *ACS Nano* 2016, 10, 11211-11218.

[2] Y. Sugita *et al.*, *Scientific Reports* 2018, 8, 5222.

[3] A. Taninaka *et al.*, *submitted to Scientific Reports*.