

## 単一分子接合の形状変化が伝導に及ぼす影響

### Influence of molecular conformation on the conductance of single molecular junction

筑波大学<sup>1</sup>、産総研<sup>2</sup>、東京大学<sup>3</sup>

○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>

Univ. of Tsukuba<sup>1</sup>, AIST<sup>2</sup>, Univ. of Tsukuba<sup>3</sup>, <http://dora.bk.tsukuba.ac.jp>

M. Nakamura<sup>1</sup>, S. Yoshida<sup>1</sup>, T. Nakamura<sup>2</sup>, Y. Mera<sup>3</sup>, O. Takeuchi<sup>1</sup>, H. Shigekawa<sup>1</sup>

単一分子デバイスは、分子の構造変化に対して伝導特性が可逆的かつ鋭敏に変化するため、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が期待されている。これまでに、我々の研究グループではSi電極を用いた単一分子接合の形成に初めて成功している。用いた

diethynylbenzene(DEB)分子は両側のSi電極とSi-C結合を

介して強固に結合することから、外力印加に対しても破断することなく接合を維持するため、外力による分子形状の操作が可能である。これまでの研究から、電極間距離を変化させながら、伝導特性(I-Vカーブ(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、IV曲線を計測したところ(図2)、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現れており、瞬間的な変化と連続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を引き起こされたものと考えた。この変化を理論的に解析するためにGaussian03を用いて、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。

その結果、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、電極間距離が近い場合はシス体、電極間距離が遠い場合はトランス体が安定であることが明らかになった。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した。詳細な計算や実験の結果は本講演にて議論する。

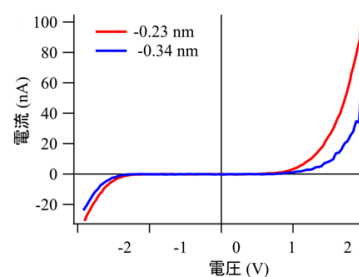


図1 Si分子接合のIV曲線

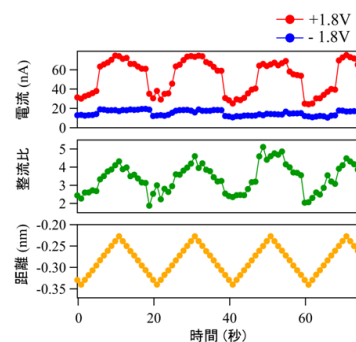


図2 電極間距離に対するコンダクタンスの変化

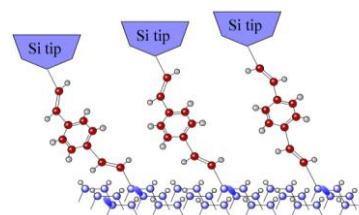


図3 分子接合のモデル図(左、中央;シス型、右;トランス型)