

3次元計測法を用いた短電極間距離における単一分子接合の分子形状効果

## Investigation of Conformational Effect in Single Molecular Junction for Short-Distance Electrodes using Dynamic Probe Method

筑波大数理<sup>1</sup>, °谷中 淳<sup>1</sup>, 吉田 昭二<sup>1</sup>, 杉田 佳弘<sup>1</sup>, 武内 修<sup>1</sup>, 重川 秀実<sup>1</sup>

Univ. of Tsukuba<sup>1</sup>, °Atsushi Taninaka<sup>1</sup>, Shoji Yoshida<sup>1</sup>, Yoshihiro Sugita<sup>1</sup>, Osamu Takeuchi<sup>1</sup>, Hidemi Shigekawa<sup>1</sup>

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、単一分子接合を3次元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という手法を用い、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を同時に解明し、電極間隔が十分大きいときの分子構造の変化や分子の回転などのダイナミクスとコンダクタンス変化の関係や、分子と電極の間の結合の違いによるコンダクタンス変化を求めることが可能になった[1,2]。しかし、分子の動きが制限されるような、電極間隔が狭いときの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は未解明であった。本研究では、3D dynamic probe methodと第一原理計算を用いて、電極間隔が狭いときの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)の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解明を行った。

図1(a)にBDAのXYコンダクタンスマップを示す。破線で示した通り、コンダクタンスが大きくなる位置が移動していることが見て取れる。電極を引き離すことでBDAが動き、電極との結合の違いが生じたためだと考えられる。図1(b)および1(c)にそれぞれ実験で得られたコンダクタンスカーブと計算で求めたコンダクタンスカーブを示す。カーブの形状は良く一致しており、これらからBDAと電極との結合の違いとダイナミクスを比較したところ、BDAのアミノ基は、図1a(I)~(III)の間でOn-topサイトからほとんど動いておらず、(IV)から他のサイトへ動き始めることがわかった。

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

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

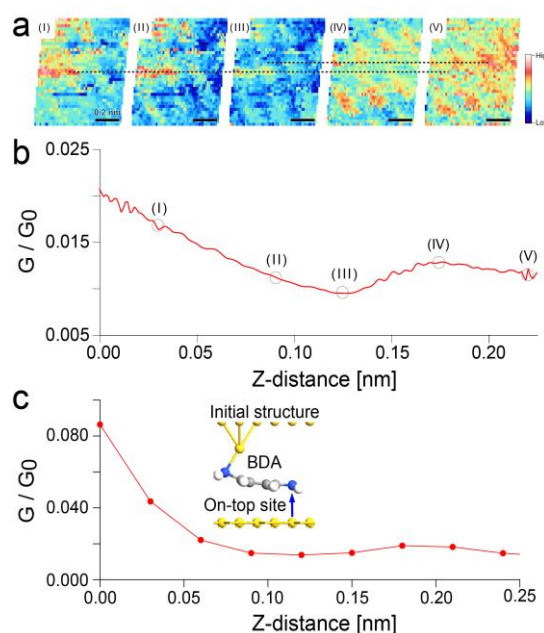


Fig. 1 (a) XY conductance mapping of BDA molecule, (b) Experimental result, and (c) Calculation result of conductance curve.