

アルカンチオール単分子膜のエネルギー準位接続と電気伝導特性 ～Transition Voltage Spectroscopy による解析～

Energy Level Alignment and Charge Transport Property of Alkanethiol Molecular Junctions

～An Analysis Based on Transition Voltage Spectroscopy～

千葉大院融合¹, 千葉大先進² °野勢 大輔¹, 山本 真人¹, 石井 久夫^{1,2}, 野口 裕^{1,2}

AIS Chiba Univ.¹, CFS Chiba Univ.²

°Daisuke Nose¹, Makoto Yamamoto¹, Hisao Ishii^{1,2}, Yutaka Noguchi^{1,2}

E-mail: himajin_-abdoria730@chiba-u.jp

背景 分子デバイスの実現には単分子接合の電気伝導機構を理解することが重要であり、これまで多くの研究がなされてきた。2006 年に Beebe らによって報告された“Transition Voltage Spectroscopy (TVS)”は、分子接合の電気伝導特性とエネルギー準位接続との相関を解析する手法として近年注目されている。TVS では、得られた I - V 特性を Fowler-Nordheim(F-N)プロット($\ln I/V^2$ vs $1/V$)し、その極小点の電圧値 $V_{\min}$ から分子接合に形成されるエネルギー障壁高さ $\Delta E (= E_f - \varepsilon_0)$ を見積もる(図 1) [1]。ただし、 E_f は電極のフェルミ準位、 ε_0 は分子軌道のエネルギー準位である。しかし、 $V_{\min}$ と実際の接合に形成される ΔE との間には定性的な相関はあるものの、その解釈にはまだ議論の余地が残されている。今回、我々は TVS の定量的な理解を目的に、Au 基板上アルカンチオール単分子膜の分子接合の電気伝導特性を測定し、得られた $V_{\min}$ を実測したエネルギー障壁高さに基づいて解析した。

実験 Au 基板上に鎖長の異なるアルカンチオール(C6T~C12T)の自己組織化単分子膜(SAM)を形成し、電流計測 AFM を用いて I - V 特性を測定した。また、光電子収量分光法(PYS)などを用いて SAM/Au 界面のエネルギー障壁高さ ΔE を求め、ランダウアーの式から分子接合の I - V 特性を計算した。得られた 2 つの I - V 特性からそれぞれ $V_{\min}(\text{exp})$ と $V_{\min}(\text{cal})$ を求め、両者を比較した。

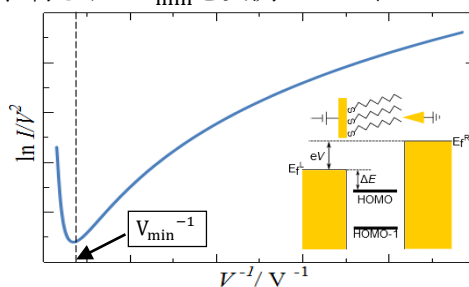


図 1: F-N 曲線と測定系概略図とエネルギーダイアグラム

結果・考察 図 2 は、実測した I - V 特性から得られた $V_{\min}(\text{exp})$ とエネルギー障壁高さから計算した $V_{\min}(\text{cal})$ を比較したものである。HOMO はチオール基に由来し、HOMO-1 はアルキル鎖に由来する分子軌道である。図 3 には、 $V_{\min}(\text{exp})$ とアルキル鎖長依存性を示した。 $V_{\min}(\text{exp})$ はアルキル鎖長依存性がなく、その大きさはチオール基由来の分子軌道から計算される値とよく一致する。これらの結果から、TVS ではチオール/Au 結合に由来する準位を観測しており、主鎖の影響をほとんど受けていないことが分かった。また $V_{\min}(\text{exp})$ は正、負の両極に現れるが、これらはそれぞれ LUMO、HOMO(ともにチオール基由来)に起因するものと考えられる。

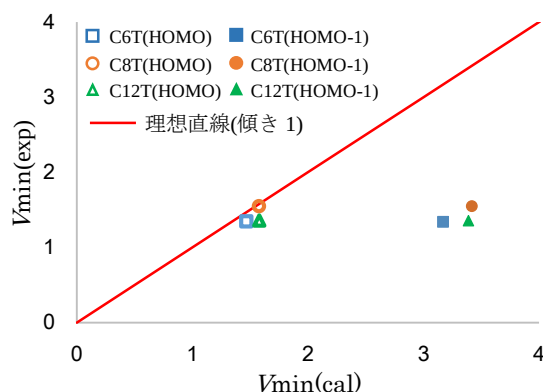


図 2: $V_{\min}$ の実測値と計算値の比較

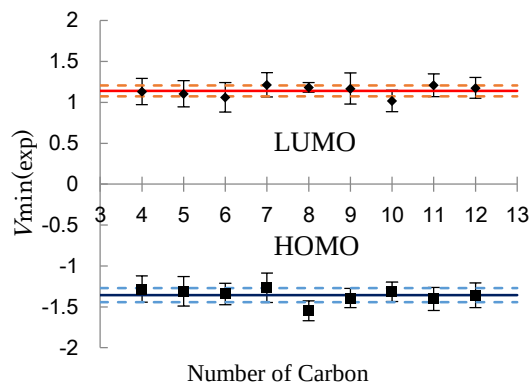


図 3: $V_{\min}(\text{exp})$ のアルキル鎖長依存性

[1] J. M. Beebe et al., Phys. Rev. Lett. 97, 026801 (2006).