

直鎖カルバゾールオリゴマー単分子接合の電流電圧特性

Current voltage characteristics of single carbazole oligomers

○美濃出圭悟¹, アルブレヒト健², 波多健太郎¹, 下店隆史¹, 大戸達彦¹, 山田亮¹,
山元公寿², 夢田博一¹ (1.阪大基礎工 2.東工大資源研)

○K. Minode¹, K. Albrecht², K. Hata¹, T. Shimomise¹, T. Ohto¹, R. Yamada¹,
K. Yamamoto², and H. Tada¹ (1. Σ -Osaka Univ. 2. Tokyo Tech.)

E-mail: minode@molelectronics.jp

分子ダイオードは単分子エレクトロニクスにおける最も基本的な素子の1つである。本研究では、非対称性を生む分子構造として、3つのカルバゾール基を一定の方向で連結させたカルバゾールオリゴマー分子に注目した(図1a) [1]。図1bに分子軌道計算で求めた分子の最高被占有軌道(HOMO)の分布を示す。この分子では、カルバゾール基の連結により生じた分極によりカルバゾール基間の電子状態にエネルギー差が生じ、HOMOは図中、分子の右側に偏って存在している。図の右方向に向かって一様な電界 F を印加すると(図1c)、外部電界による電子密度の変化によりカルバゾール基間の準位差が小さくなり、HOMOが分子全体に広がる。逆方向に電界を印加した場合には、HOMOの局在をより強める。分子を電極に接続した系においても同様に、電界の方向に依存した電子軌道の空間分布の非対称な変化が電極と分子の電子カップリングにより引き起こされ、整流性が発現すると期待できる。

測定は、両末端にチオール基をもつ3量体オリゴマー分子を試料とし、金電極を用いた Mechanically controllable break junction 法により、低温(77K)、 N_2 減圧雰囲気下で行った。電極間隔を広げた際の電気伝導度の変化(図2a)をみると、単分子接合が形成されたことを示すプラトーが3箇所、 $7.0 \times 10^{-4} G_0$ 、 $9.0 \times 10^{-5} G_0$ および $1.0 \times 10^{-5} G_0$ 付近で観測された($G_0 = 2e^2/h \sim 77.4 \mu S$)。電流-電圧(IV)測定を行い図2aの破断曲線内の矢印と同色でIVカーブ(図2b)を示した。図2bの -1 nA から 8 nA までの領域を拡大したものを添付した。

また、図2bに各IVカーブの ± 500 mVにおける電流値を I^+ 、 I^- とし、 $I\text{-Ratio} = I^+/I^-$ として図2aに棒グラフで示した。その結果、最も電極間距離が長い時に現れる最もコンダクタンスが低いプラトーにおいて $I\text{-Ratio}$ が大きくなった。最も低いコンダクタンス値は、分子が直線状に伸びた構造に該当すると思われる、分子の双極子と電界の向きが平行となるとときに $I\text{-Ratio}$ が大きくなったことに対応すると考えられる。

これらの結果から、双極子による分子軌道分布の非対称性は分子ダイオードの設計に有用であることが明らかになった。

謝辞

この研究は科研費新学術領域研究「分子アーキテクニクス」の助成により行われた。

[1] K. Albrecht et al, J. Am. Chem. Soc. (2009) 131, 2244-2251.

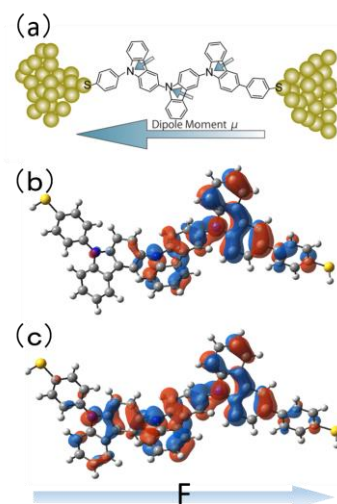


図1. (a) 分子接合の模式図, (b) 孤立分子の HOMO の分布, (c) 図中、右方向に電界を印加した時の HOMO の分布。矢印は双極子モーメントと外部電界の方向を示す。

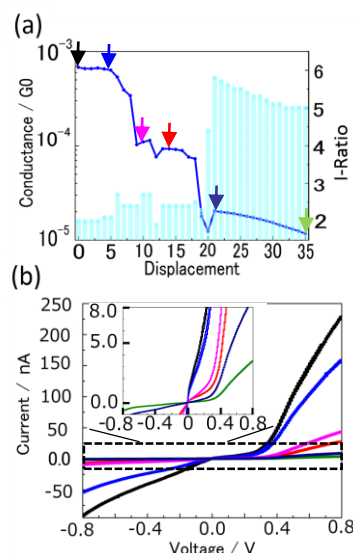


図2. (a) 分子の破断曲線, (b) 各矢印部における IV 特性。