

1, 4-ベンゼンジアミン単一分子接合の3次元動的制御

3D Dynamic Probe Analysis of 1,4-Benzenediamine Single-Molecule Junction

筑波大, [○]杉田 佳弘, 吉田 昭二, 谷中 淳, 武内 修, 重川 秀実

Tsukuba Univ., Yoshihiro Sugita, Shoji Yoshida, Atsushi Taninaka, Osamu Takeuchi,
and Hidemi Shigekawa

<http://dora.bk.tsukuba.ac.jp/>

近年ブレイクジャンクション法などを用いた、単一分子伝導機構の研究が精力的に行われている。しかし、分子形状や電極との接合状態が伝導特性に与える影響についての精密な実験計測はほとんど行われていない。我々は、これまでに STM 探針と基板表面の間に形成した単一分子接合の形状を3次元的に制御する手法を開発してきており[1,2]、本研究では Au/1,4-ベンゼンジアミン (BDA)/Au 単一分子接合の測定を行い、Au-NH₂ 接合形状と単一分子コンダクタンスの関係を明らかにした。Fig 1 に測定の概要を示す。STM の Au 探針と Au(111)基板間に BDA 分子が架橋し、単一分子接合を形成している。この状態で探針-基板間電圧を 10mV に固定し、分子に流れる電流値を計測しながら、z 方向 sin 波状に一周期変化させる。この動作を xy 平面の 41 点×41 点で行うことで、探針位置に対するコンダクタンス[G/G₀]の3次元的な分布を求めた。Fig2a は探針の Retract 時に得られたコンダクタンスを3次元的にマッピングしたものである。xy 断面(Fig2b)のコンダクタンス分布が Au(111)の格子パターン(Fig2c)と一致しており、ここから Au(111)表面での分子吸着サイトとコンダクタンスの関係が得られる。また Fig2d の G-z カーブより z ~ 0.08nm においてコンダクタンスのスイッチングが観測されている。このスイッチングの z 位置はサイト(xy)位置に依存し変化するが xy 全範囲で再現性良く観測された。非平衡グリーン関数法と密度汎関数を用いた解析により、このコンダクタンススイッチング現象は Fig2e の赤矢印で示した NH₂ 末端の形状変化が原因であることが分かった。発表ではより詳細な解析・結果についての紹介を行う。

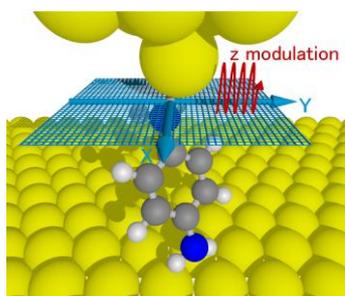


Figure 1. Schematic illustration of the 3D dynamic probe system.

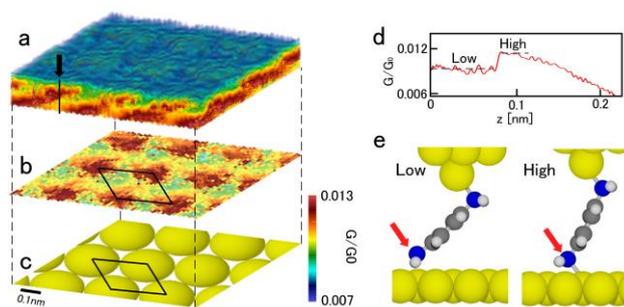


Figure 2. (a)3D volume plots. (b)xy cross-section. (c)Au(111) atomic structure. (d)G-z curve.(e)The high- and low-conductance states model.

[1] M. Nakamura et al, Nature Communications, 6, 8465 (2015)

[2] S. Yoshida et al, ACSnano, 2016, 10 (12), pp 11211–11218