## 単分子接合の電流-電圧特性:フィッティングによる架橋構造解析

Study on anchoring configurations in single molecular junctions by numerical simulation of current-voltage characteristics

## 阪大基礎工<sup>1</sup>, 阪大産研<sup>2</sup> <sup>0</sup>沼井優一<sup>1</sup>, 井上拓也<sup>2</sup>, 美濃出圭悟<sup>1</sup>, 徳本潤平<sup>1</sup>, 山田亮<sup>1</sup>, 大戸達彦<sup>1</sup>, 家裕隆<sup>2</sup>, 安蘇芳雄<sup>2</sup>, 多田博一<sup>1</sup>

Σ-Osaka Univ.<sup>1</sup>, ISIR- Osaka Univ.<sup>2</sup>, <sup>°</sup>Y. Numai<sup>1</sup>, T. Inoue<sup>2</sup>, K. Minode<sup>1</sup>, J. Tokumoto<sup>1</sup>, R. Yamada <sup>1</sup>, T. Ohto<sup>1</sup>, Y. Ie<sup>2</sup>, Y. Aso<sup>2</sup>, H. Tada<sup>1</sup>

E-mail: numai@molectronics.jp

金属/単分子/金属接合(単分子接合)の電気伝導度測定が広く行われているが、接合界面の情報を 得ることは難しい。本研究では、単分子接合の電流電圧特性を測定し、測定結果を理論式を用い てフィッティングすることで分子の架橋構造を推測した。今回は新たなアンカー部位として開発 された三脚アンカー分子[1,2]に着目した。チオフェンを有したアンカー部分と分子骨格部分とを  $\pi$ 電子系で繋いだ三脚分子(Fig.1)を用い、金を電極として Mechanically controllable break junction 法により 100 K, N<sub>2</sub>雰囲気で、電流電圧特性を計測した。

Fig.2a にコンダクタンスヒストグラムを示す。 $10^{3}$  G<sub>0</sub> (1 G<sub>0</sub>~77.4 µS)と  $10^{5}$  G<sub>0</sub>付近に 2 つのピ ークが観測され、三脚分子が二つの電気伝導度を示すことが明らかとなった。それぞれのコンダ クタンス領域で測定された電流電圧特性を見ると、高コンダクタンス側では対称的であるのに対 して (Fig.2b)、低コンダクタンス側では非対称であった (Fig.2c)。電流電圧特性を Eq.1[3]の理論 式(F:Coupling strength , $\epsilon_{0}$ :Molecular energy level)を用いてフィッティングすると、電極と分子の結合 の強さを表すカップリング強度が前者では左右で同じ値であったのに対し、後者では異なってい た。このことから、 $10^{3}$  G<sub>0</sub>付近では分子骨格の $\pi$ 軌道と直結したチオフェンが両電極に接続して おり(Fig.3a)、 $10^{5}$  G<sub>0</sub>付近では非対称な接続構造を構成していると考えられる (Fig.3b)。



Eq.1:Equation of current-voltage characteristics



Fig.1:Molecular structure

Fig.2: Conductance histogram of single molecule junction (a) taken at the bias voltage of 200 mV and current-voltage characteristics at  $10^{-3}G_0$  (b) and  $10^{-5}G_0$  (c).

Fig.3: Symetric (a) and asymmetric (b) junction between tripod anchor and gold electrode

【参考文献】

<sup>[1]</sup> Yutaka Ie et al., J. Am. Chem. Soc., 133, 3014 (2011).

<sup>[2]</sup> Yutaka Ie et al., J. Phys. Chem. Lett., 6, 3754 (2015).

<sup>[3]</sup> R. Matsusita et al., J. Phys. Chem. C, 117, 1791 (2013).