

有機金属ポリイン分子ワイヤーの単分子電気伝導度計測

Single-Molecule Conductance Study of Organometallic Polyynic Wires

東工大化生研¹, 東工大元素セ², 東工大理³ ○田中 裕也¹, 加藤 佑弥¹, 多田 朋史²,
藤井 慎太郎³, 木口 学³, 穂田 宗隆¹

Tokyo Tech. LCL¹, Tokyo Tech. MCES², Tokyo Tech. Sch. Sci.³, Yuya Tanaka¹, Yuya Kato¹,
Tomofumi Tada², Shitaro Fujii³, Manabu Kiguchi³, Munetaka Akita¹

E-mail: ytanaka@res.titech.ac.jp

金属電極—分子—金属電極間の単分子電気伝導度解明は分子エレクトロニクス実現へ向け重要な課題である。一般的な有機分子ワイヤーは長鎖化することで伝導性が大きく低下することから、高い伝導性を示す分子の探索が行われている。有機分子ワイヤーの中でもポリイン分子ワイヤー($C\equiv C$)_nは理論計算により高い伝導度が予測されているが、一般にポリイン化合物は潜在的爆発性があり、単分子電気伝導度計測を実験的に行った報告はない。

最近、当研究室では有機分子ワイヤーであるジピリジルブタジインにルテニウムユニットを導入した分子ワイヤー(**3**)を合成し、分子長が伸長したにもかかわらず、伝導度を 2.5 倍向上させることに成功した。¹⁾そこで我々は、ポリイン分子ワイヤーに金属ユニットを導入した有機金属ルテニウム分子ワイヤー(**1**ⁿ, $n = 2-4$)を設計した。末端に金錯体を修飾することでトランスメタル化を経由して金電極と接合することが可能である。²⁾

1ⁿ ($n = 2-4$)は対応するトリメチルシリル前駆体 **2**ⁿ から塩基性存在下、AuClP(OMe)₃ を作用させることで得られた。STM ブレイクジャンクション法による単分子電気伝導度測定の結果、**1**ⁿ ($n = 2-4$)は対応するピリジンやチオエーテルアンカー基を有する有機分子ワイヤーと比較してそれぞれ 100 倍、6 倍程度高い伝導度を示した。高伝導性の要因について DFT ならびに hybrid-DFT/NEGF 法に基づく議論を行う。³⁾

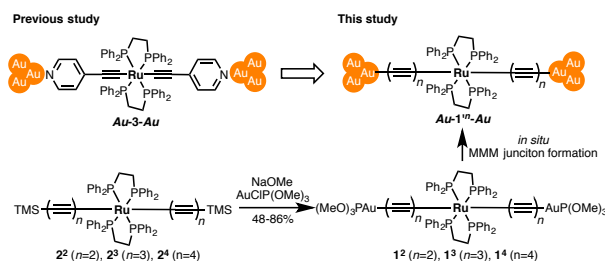


Figure 1. Schematic illustrations of MMM junction of organometallic molecular wires and synthesis of the polyynic molecular wires **1**ⁿ ($n = 2-4$).

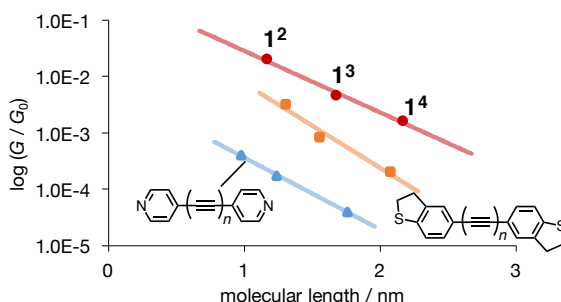


Figure 2. Distance dependence of single molecule conductance of **1**ⁿ ($n = 2-4$) and those of the related organic polyynic molecular wires.

1) K. Sugimoto, Y. Tanaka, S. Fujii, T. Tada, M. Kiguchi, M. Akita, *Chem. Commun.*, **2016**, 52, 5796-5799.

2) D. Millar, L. Venkataraman, L. H. Doerrer, *J. Phys. Chem. C.*, **2007**, 111, 17635-17639.3) Y. Tanaka, Y. Kato, T. Tada, S. Fujii, M. Kiguchi, M. Akita, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, 140, 10080-10084.