

長脚型キレートホスフィン配位子を有する 有機金属分子ワイヤーの単分子電気伝導度計測

Single-Molecule Conductance Study of Organometallic Molecular Wires with Long-Legged Ligands

東工大化生研¹, 理² 〇田中 裕也¹, 裴 えな¹, 小笠原 郁弥¹, 藤井 慎太郎², 穂田 宗隆¹

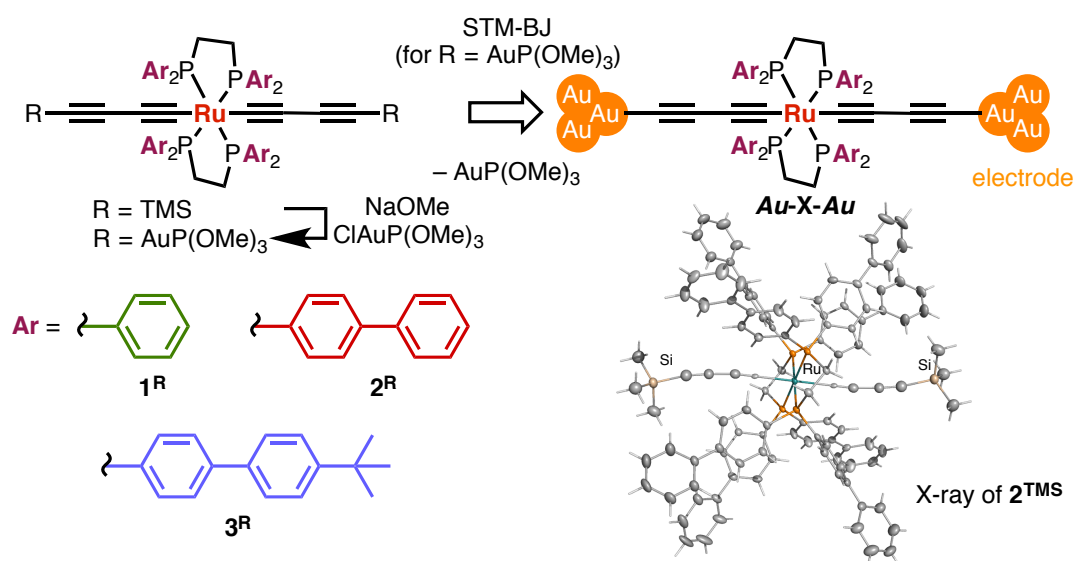
¹CLS, IIR, Tokyo Tech., ²Dept. Chem. Sch. Sci., Tokyo Tech.,

〇Yuya Tanaka,¹ Yeana Bae,¹ Fumiya Ogasawara,¹ Shintaro Fujii,² Munetaka Akita¹

E-mail: ytanaka@res.titech.jp

単分子デバイスにおいて、高く明確な伝導度を有する分子ワイヤーの開発は重要な課題である。これまでに我々は有機金属ポリイン分子ワイヤーが高い単分子電気伝導度を示すことを明らかにしてきた¹。一方で、アセチリド末端を持つ分子ワイヤーはブレイクジャンクション法を用いた単分子電気伝導度計測時に広範な伝導度分布を示すことが知られており²、有機金属ポリイン分子ワイヤーにおいてもブロードな伝導度分布がみられた。そこで本研究では支持配位子の立体を制御することで伝導度分布の制御を試みた。

有機金属分子ワイヤーの支持配位子であるキレートホスフィン配位子にビフェニル (**2**) および *tert*-Bu ビフェニル置換基を導入した **3** をそれぞれ合成した。**2**^{TMS} の結晶構造からビフェニル置換基の立体が分子ジャンクション形成時に影響を及ぼすことが期待できる。STM ブレイクジャンクション法による単分子電気伝導度計測の結果、**Au-X-Au** (**X** = **1-3**) はほぼ等しい伝導度を示したのに対して、**Au-2-Au** および **Au-3-Au** の伝導度分布は **Au-1-Au** に比べてそれぞれ 2/3 倍、1/3 倍程度狭くなった。発表では理論計算を踏まえてディスカッションを行う。



1) Y. Tanaka, Y. Kato, T. Tada, S. Fujii, M. Kiguchi, M. Akita, *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, *140*, 10080.

2) D. Millar, L. Venkataraman, L. H. Doerr, *J. Phys. Chem. C.*, **2007**, *111*, 17635.