

単分子接合のクロミズムと熱電能

Thermopower of Single-Molecule Junctions of Overcrowded Ethylene

東工大院理¹, 東工大化生研² ○藤井 慎太郎¹, 庄子 良晃², 福島 孝典², 西野 智昭¹

School of Sci., Tokyo Tech.¹, Lab. for Chem. and Life Sci., Tokyo Tech.²,

○Shintaro Fujii¹, Yoshiaki Shoji², Takanori Fukushima², Tomoaki Nishino¹

E-mail: fujii.s.af@m.titech.ac.jp

外部刺激により、分子の色・発光色や電子状態が変化する現象はクロミズムとして知られている。これまで、クロミズムを示す分子は、センサーや、外部刺激に基づいた情報記録デバイスや電気スイッチとして、その利用が期待されてきた。近年、我々の研究グループでは、クロミズムを示す分子 **1** (図 a) が、外部刺激に応答して配座異性化し、単分子レベルの電気伝導度 (G) のスイッチ現象を示すことを報告した [1]。本研究では、分子 **1** を用いて、クロミズムが熱電特性に与える影響を単分子レベルで明らかにすることを目的とした。単分子レベルにおける熱電特性を明らかにするために、ブレイクジャンクション法を用いて、微小な金電極間に分子 **1** の単分子接合を作製した[1]。そして、作製された単分子接合に温度勾配 ($\Delta T = 0, 11, 22, 33$ K) を与えながら、各温度勾配において熱起電力 (ΔV) の計測を 10,000 回繰り返し、計測された ΔV のヒストグラムのピーク値を決定した。 ΔT に対する ΔV のピーク値の依存性から、分子 **1** の単分子接合の熱電能 ($S = -\Delta V/\Delta T$) は $-19 \mu\text{V/K}$ と決定された (図 b)。次に、分子 **1** の配座異性化を伴うクロミズムと S の関係性を明らかにするために、 G と ΔV の相関を調べた。2 つの配座異性体は異なる G を示すことから、 G を用いて 2 つの配座異性体を識別できる (図 c)。その結果、 G に依存して ΔV が異なること、つまり分子 **1** の配座異性体に応じて、異なる ΔV を示すことが分かった。また、ボルツマン輸送方程式の枠組みで、モットの式を用いて G と S を対応付けることができるが [2]、本研究で ΔV の計測により決定された $S = -17, -26 \mu\text{V/K}$ と、モットの式を用いて、分子 **1** の単分子接合の G から予測される $S = -18, -25 \mu\text{V/K}$ [1] が良い一致を示すことも確認された。

参考文献

- [1] T. Suzuki *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **1997**, 36, 2495–2497 and S. Fujii *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 18544–18550
 [2] N. F. Mott and E. A. Davis, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials* (Oxford Classic Texts in the Physical Sciences).

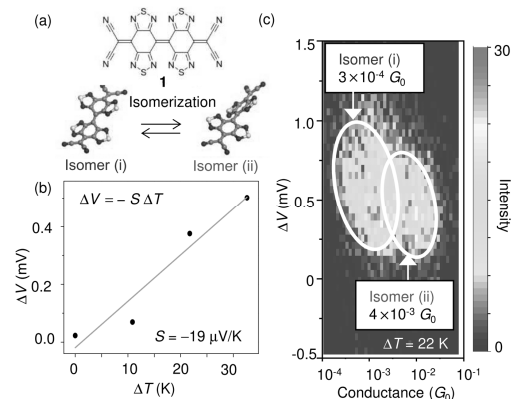


Figure (a) Chemical structure of **1**. (b) ΔV vs. ΔT plot (c) ΔV vs. conductance plot at $\Delta T = 22$ K where $G_0 = 2e^2/h$. The G values of the isomers (i) and (ii) are $3 \times 10^{-4} G_0$ and $4 \times 10^{-3} G_0$, respectively [1].