SERS 計測によるナフタレンチオール二量体の電子輸送特性の解明

Investigation on the Electron Transport through Naphthalenethiol-Molecule Dimer Utilizing Surface-Enhanced Raman Scattering Spectra

東工大理 [1]，物材研 MANA[2]，JST さきがけ [3]，○(B)本間寛治 [1]，金子哲 [1,3]，塚越一仁 [2]，西野智昭 [1]

Tokyo Tech [1], NIMS MANA[2], JST PRESTO[3]

○Kanji Homma[1], Satoshi Kaneko[1,3], Kazuhito Tsukagoshi[2], Tomoaki Nishino[1]

［緒言］π 共役分子間における電子輸送は DNA 分子の情報伝達や有機半導体の電気特性に関連するため注目されており、近年では一分子レベルで DNA 分子や π 共役分子の電子輸送特性の計測が進められている。しかし、単一分子計測に比べ π 共役分子間における電子輸送特性の実験的知見は少なく、計測手法も電流検出に限定されているためその架橋構造の決定が困難であるという課題がある。我々はこれまで表面増強ラマン散乱スペクトル(SERS)計測および電子輸送計測に立脚し、種々の分子接合に対して伝導特性、分子種同定、構造評価が可能であることを示してきた[1]。本研究では π 共役分子のモデル分子として 2-Naphthalenethiol(NT)を用い、SERS により二量体構造の形成を確認し，さらに NT 分子間における電子輸送特性の解明を目指した。

［実験］分子接合は、NT エタノール溶液 1 mM を金電極に滴下し乾燥させた後 Mechanically Controllable Break Junction (MCBJ)法により作製した[1]。作製した接合を保持した状態で電気伝導度および SERS スペクトルを同時に室温計測した。また、SERS 計測中における電流値の時間変化を離散フーリエ変換し、ノイズ強度を算出することで Flicker ノイズを見積もった。

［結果・考察］図は分子接合の電気伝導度に対応する $10^{-1.5}$－10^{-4} G_0 (G_0 = $2e^2/h$)の領域における C-H 変角振動の振動エネルギーと電気伝導度(G)の相関図である。電気伝導度 $10^{-2.0}$ G_0 及び $10^{-2.8}$ G_0 を中心とした二つの要素からなる分布が主に観測された。低伝導度領域では高伝導度領域と比べ、振動エネルギーが低波数側にシフトした状態が観測された。ナフタレン二量体では π－π 相互作用により、孤立状態に比べて振動エネルギーが低波数シフトしうる[2]。また、対応する結合状態を詳細に調べるために SERS 計測中における電流値の Flicker ノイズの解析を行ったところ、低伝導度領域では Flicker ノイズが電気伝導度の 2 乗に比例し、非共有結合性の分子間相互作用を介して電子輸送されていることが示唆された[3]。したがって、振動エネルギー変化とノイズ解析より、低伝導度状態は π－π 相互作用を介した電子輸送に対応していることが明らかとなった。以上より、単一ナフタレン二量体が接続した架橋構造を特定し、その電気伝導度を評価することに成功した。

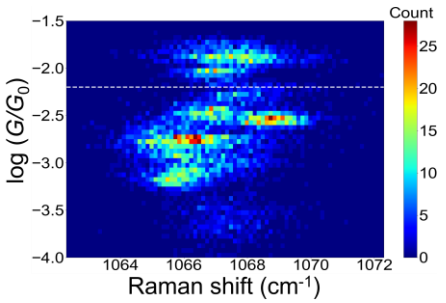

Figure. 2D Histogram representing the correlation between conductance (G) and Raman shift for the NT junction.

[1] K. Yasuraoka *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interface*, 13 (2021) 51602.

[2] M. Saeki *et al.*, *J. Chem. Theory Comput.*, 2 (2006) 1176. [3] O. Adak *et al.*, *Nano Lett.*, 15 (2015) 4143.

© 2022年 応用物理学会