

高次フラーレン単分子接合の電荷輸送特性

Charge Transport Properties of Higher Fullerene Single-Molecule Junctions

東工大理 ○山根 蒼志, 藤井 慎太郎, 西野 智昭

School of Science, Tokyo Institute of Technology

E-mail: yamane.a.ab@m.titech.ac.jp

【緒言】フラーレンは球状に歪んだ π 共役系を持ち、高い電子受容性を示すことや様々な化学修飾が可能であることから、単分子トランジスタやスイッチ等の単分子デバイスへの応用が期待されている。本研究では、 C_{60} よりも大きな炭素クラスターである高次フラーレンに着目した。高次フラーレンは π 共役系の拡大による HOMO-LUMO ギャップの減少や、分子構造の非対称性など C_{60} とは異なった特徴を持ち、電気伝導度や熱起電力の増加など分子素子としての性能を向上させることが期待される。一方、高次フラーレンは金属電極に対する特定のアンカー基を持たないため、分子-金属界面構造を含む単分子接合の構造の決定が困難であり、その接合構造は未だ解明されていない。そこで本研究では走査型トンネル顕微鏡を用いたブレイクジャンクション法 (STM-BJ 法) により C_{70} 単分子接合を形成し、その接合構造や電荷輸送特性を明らかにすることを目的とした。

【実験】真空蒸着によって作製した Au/mica 基板を 0.1 mM C_{70} /toluene 溶液に浸漬し、 C_{70} を基板上に吸着させることでサンプルを作製した。室温・大気中で STM-BJ 法により単分子接合を繰り返し形成し、電気伝導度および電流-電圧 (I - V) 特性の計測を行った。

【結果・考察】 C_{70} 単分子接合の伸長過程で計測された伝導度-伸長距離曲線の 2 次元ヒストグラムを図 1 に示した。2 つの伝導度状態 (H, L 状態) が観測され、伝導度はそれぞれ 36 mG_0 , 0.57 mG_0 と求まった。ここで、 G_0 は量子化伝導度 ($G_0 = 2e^2/h$) である。H 状態から L 状態への遷移の際、単分子接合の伝導度は 1 桁以上の急激な低下 (伝導度ジャンプ) を示した。DFT 計算により接合破断過程のシミュレーションを行った結果、H 状態から L 状態への伝導度ジャンプは C_{70} が電極の側面から電極間のギャップへと移動する構造変化に起因することが示唆された。続いて、 C_{70} 単分子接合の I - V 計測を行い、共鳴準位モデルに基づいて I - V 曲線をフィッティングすることで、分子の伝導軌道と電極のフェルミ準位のエネルギー差 ϵ 、および分子と電極のカップリングの大きさ Γ を得た[1]。H 状態から L 状態に遷移する過程で Γ の値はおおよそ 1/5 に減少し、2 状態の伝導度の差は分子と電極のカップリングの減少に起因することが分かった。

本研究では、 C_{70} 単分子接合の電気伝導度および I - V 特性を計測し、接合の伸長による界面構造や電子状態の変化を明らかにした。これらの結果は、高次フラーレン単分子接合の電荷輸送特性を力学的に制御できることを示している。

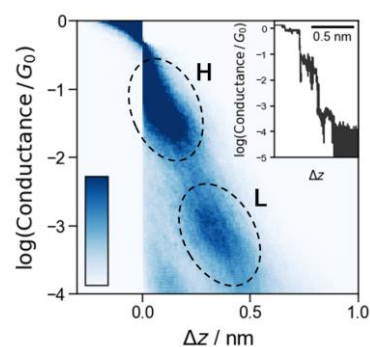


Figure 1. Two-dimensional conductance-elongation histogram of C_{70} single-molecule junctions (Inset: Example of the conductance-elongation trace).

参考文献

[1] Y. Komoto, S. Fujii, H. Nakamura, T. Tada, T. Nishino, M. Kiguchi, *Sci. Rep.* **2016**, 6, 26606.