

σ -非局在系を有する分子接合の電荷輸送特性

Charge Transport Properties of Molecular Junctions with σ -Delocalized Systems

東工大¹, 埼玉大² [○]藤井 慎太郎¹, 瀬古 紗弥², 田中 泰地², 吉原 勇輝¹, 古川 俊輔²,
西野 智昭¹, 斎藤 雅一²

Tokyo Tech.¹, Saitama Univ.², [○]Shintaro Fujii¹, Saya Seko², Taichi Tanaka², Yuki Yoshihara¹,
Shunsuke Furukawa², Tomoaki Nishino¹, Masaichi Saito²

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

近年の技術進歩により、分子レベルにおける分子接合の輸送特性研究が盛んに行われている。これまで、高い電気伝導性を示す分子接合を戦略的に構築する上で、導電性の π -共役分子骨格の使用は不可欠であると考えられてきた。しかし、従来の π -共役系のみには頼ることは、分子接合の構造的な多様性を活用するには不十分であると考えられる。有機化学の分野では、 σ -軌道が非結合原子上に非局在化した σ -非局在化系が π -非局在化系を補完する存在として知られている (図 1a)。 π -非局在化系では、分子接合の電荷輸送方向は p 軌道に対して垂直であるが、 σ -非局在化系では p 軌道は電荷輸送方向に平行に並ぶ。 σ -非局在系は分子接合における電荷輸送経路を新たに設計する新たな機会を提供し、有機エレクトロニクスの研究分野の発展を後押しすることが期待される。 π -非局在系を持つ単分子の電荷輸送は長い間注目され、研究されてきたが、 σ -非局在系を持つ分子接合はほとんど研究されていない。そこで、本研究ではベンゼン環上に 6 つのセレン原子が環状に配置された σ -非局在化系 (図 1b) を持つ単分子接合の電荷輸送を Break Junction 法を用いて明らかにすることを目的とした。

電気計測および熱電計測の結果、 σ -非局在系を持つ分子接合は、従来の π -非局在系を持つ分子と比較して、約 $10^{-2} G_0$ (ここで $G_0 = 77.5 \mu\text{S}$ は電気伝導度の量子化単位) の高い電気伝導度と、約 $50 \mu\text{V K}^{-1}$ の比較的大きな熱起電力を示すことが明らかになった。本研究は、これまでほとんど研究されてこなかった σ -非局在系を有する分子接合の電荷輸送の理解を促進し、 σ -非局在軌道を用いた単分子伝導体の設計に新たな洞察をもたらすものと考えられる。

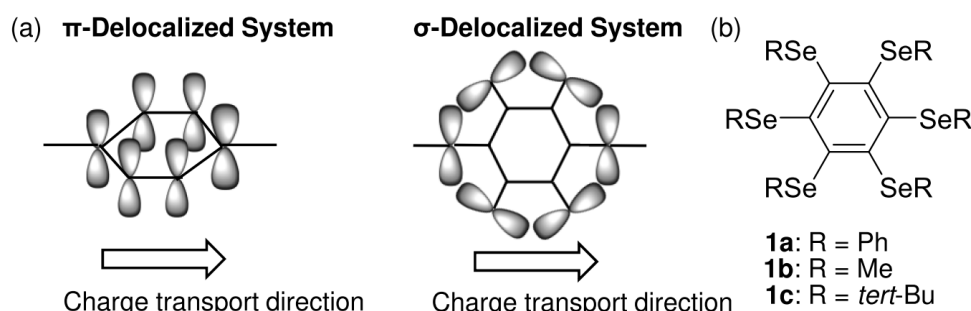


Fig. 1 (a) Schematic illustration of charge transport through π - and σ -delocalized systems. (b) Chemical structures of molecules used for the present study.