

日本- スペイン・チェコ国際共同研究 「原子レベルでの材料設計」 2023 年度 年次報告書	
研究課題名（和文）	単分子接合に特徴的な機能、物性の探索および発現機構の 解明
研究課題名（英文）	Design and Control of Single Molecule Junctions
日本側研究代表者氏名	藤井 慎太郎
所属・役職	東京工業大学 理学院・特任准教授
研究期間	2023 年 4 月 1 日 ～ 2026 年 3 月 31 日

1. 日本側の研究実施体制

氏名	所属機関・部局・役職	役割
藤井慎太郎	東京工業大学 理学院・特任准 教授	単分子接合の輸送特性の計測と構造 評価

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

プローブ顕微鏡法に基づいたブレイクジャンクション法により単分子ポテンショメータの伝導度計測を行う。また、プローブ顕微鏡法により単分子ポテンショメータと外部電極の接続位置を変化させることで、伝導パスや分子と電極の界面構造を制御し、電気伝導度と熱電能のスイッチ機能を実証する。

3. 日本側研究チームの実施概要

単分子接合の電気伝導特性は、外部電極に接続される分子内接点の位置と、接点における分子-金属間の界面構造に応じて変化するため、接点の位置や界面構造を制御することで単分子ポテンショメータとしての動作が期待される。2023 年度、日本側研究チームは単分子

ポテンショメータ分子の設計および構造、電気伝導特性の実験的評価を行った。分子内に外部電極と接続可能な接点を複数有するマルチチャンネル分子を用いて単分子接合を作製し、分子内接点の位置や電極と分子間の結合様式を変化させながら電気伝導度計測を行った。プローブ顕微鏡法により単分子ポテンショメータの(1)電極と分子間の結合様式、(2)分子内接点の位置、(3)伝導パスを制御することで電気伝導度を 300 倍程度制御することに成功した。

欧州側の研究チームは、日本側で実験的に観察された単分子ポテンショメータ特性を基に、モデル分子について理論的なシミュレーションを行うことで電極と分子間の結合様式の変化が単分子ポテンショメータの電気伝導性に与える影響を理論的に解明した。