

熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御  
2018 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書
------------------

金子 哲

東京工業大学 理学院  
助教

分子素子実現に向けた単分子温度計測

## § 1. 研究成果の概要

本研究では一つの分子が金属間に架橋した単分子接合に着目し、分子レベルでの界面構造と電子構造の解明に基づく温度計測を目指している。

単分子接合は分子素子応用の可能性があることから、また究極サイズの界面構造のモデル系として基礎科学的に意義深いことから注目を集めている。これまでその電子輸送特性が主に計測されてきたが、分子と金属の接続構造については曖昧さがあり単分子接合における温度についての知見は十分ではない。そこで本研究では金属ナノ構造体で振動スペクトル強度が増強される表面増強ラマン散乱(Surface enhanced Raman scattering; SERS)スペクトルに着目し、スペクトルから得られる情報に基づき、単分子接合における温度計測を行う。

昨年度まで SERS 計測により単分子接合の温度を決定するために、金属ナノ構造体を用いた SERS 増強度のナノ構造体の形状依存性の解明と単分子接合における架橋構造の決定を行ってきた。本年度は、昨年度までに構築してきた計測系を用いて単分子接合における温度について 1,4-ベンゼンジチオール、4,4'-ビピリジンについて中心的に計測を行った。架橋構造の規定を突き詰め接合間距離を規定した、接合における分子の架橋構造の変化の追跡を通して分子の配向と振動スペクトルとを対応づけた。次に SERS スペクトルにより架橋分子種を特定したうえで、アンチストークス領域とストークス領域に観測されるピーク強度比から接合における振動温度を算出し、20 K 程度の局所加熱による温度上昇を検出した。更に、架橋構造を規定した状態で振動温度を定義することにより、接合構造変化に由来した局所加熱の影響が異なる事を明らかにした。

### 【代表的な原著論文情報】

1. "The Practical Electromagnetic Effect in Surface-Enhanced Raman Scattering Observed by the Lithographically Fabricated Gold Nanosquare Dimers" *AIP Advances* (2020) 10, 02530/1-5.
2. "Tolerance to Stretching in Thiol-Terminated Single-Molecule Junctions Characterized by Surface-Enhanced Raman Scattering" *J. Phys. Chem. Lett.* (2020) 11, 6712-6717.
3. "単分子接合における電気伝導度計測と接合構造の解析" (2020) 電気化学 88, 217-222.
4. "単分子接合における表面増強ラマン散乱スペクトルの観測とその挙動の解明" 分光研究 (2020) 69, 53-60.