

# 数ナノメートルの分子導線で 高効率ホッピング伝導特性を実現

基礎工学研究科 物質創成専攻

准教授 山田 亮

[https://researchmap.jp/\\_ryoy](https://researchmap.jp/_ryoy)

産業科学研究所 ソフトナノマテリアル研究分野

教授 家 裕隆

<https://researchmap.jp/read0105668>



## 研究の概要

分子の長さが数ナノメートルスケール以上になると、正孔などのキャリアが分子内に局在し、分子内の電子準位（ホッピングサイト）間を飛び移りながら移動するホッピング伝導が主要な輸送メカニズムとなります。このホッピング伝導の高効率化に向けた指針を得ることは、長距離電気伝導の実現において重要です。ホッピング伝導の活性化エネルギー ( $E_a$ ) は、ホッピングサイト間のエネルギー差 ( $\Delta E_{hs}$ ) と、ホッピングサイトの再配列エネルギー ( $\lambda$ ) の和で決まります。本研究では、 $\pi$  共役化合物から構成されるホッピングサイトに剛直な縮環構造を取り入れることで  $\lambda$  を低減しました。さらに、一定間隔のねじれ構造を導入して  $\Delta E_{hs}$  も低減し、分子を数ナノメートルスケールまで伸長させることで、高効率なホッピング伝導を実現しました。

## 研究の背景と結果

分子一つを介した電気伝導特性の解明は、導電性高分子や有機半導体などの有機電子材料の開発、さらには分子一つで電子素子を開発するために不可欠です。測定を行うには、電極間に分子を架橋させた単分子接合を作製する必要があります。単分子接合の測定技術は、ここ20年ほどで急速に発展しました。現在では、電気伝導度の分子長さ依存性や温度依存性などに基づく伝導機構の議論が深化しました。その結果、この分野はナノスケール電子物性研究の一領域として確立されています。

単分子接合における電気伝導機構には、電荷の波動性に基づくトンネル伝導と、分子内で熱活性化により電子がホッピングサイト間を移動するホッピング伝導が知られています。一般に、分子が短い場合に

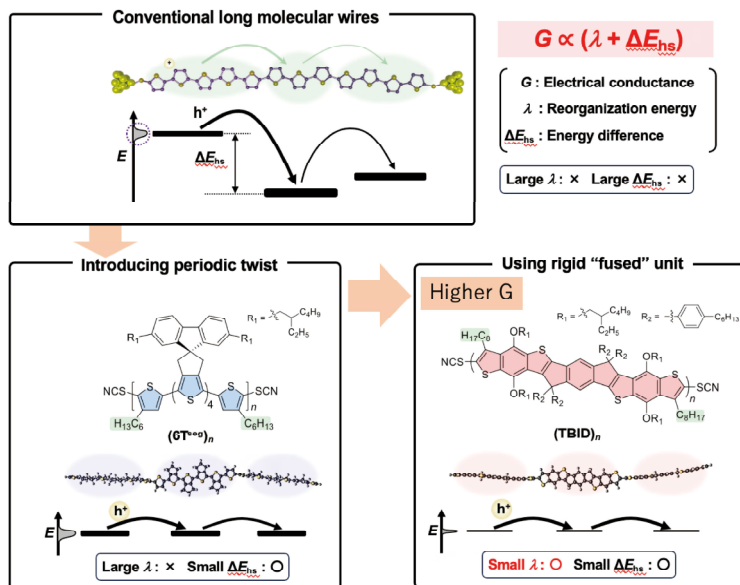
はトンネル伝導が支配的で、長くなるとホッピング伝導が主要となると考えられてきましたが、両者の転換点は明確ではありませんでした。また、ホッピング伝導の高効率化に向けた指針を得ることは、単分子エレクトロニクスや有機エレクトロニクスの実用化に向けた重要課題でした。しかし、ホッピング伝導を実験的に検証するために必要となる、数ナノメートルスケールの分子長、分子間相互作用を排除した完全被覆型分子構造、さらに分子長の精密制御を同時に満たす分子を有機合成的に準備することは非常に困難であったため、実験研究は遅れていました。

この状況において本研究は、有機分子の分子構造が分子内ホッピング伝導に及ぼす影響を明らかにした先駆的研究であるとともに、ホッピング伝導の高効率化が新たな電子機能を引き出すうえで有効である可能性を示した点で重要です。この知見を活かすことで、ホッピング伝導のさらなる高効率化に基づく新たな駆動原理やデバイス構造の創出、単分子エレクトロニクスにおける分子ワイヤ設計、有機エレクトロニクスにおける有機半導体材料の高性能化が推進できると期待されます。

## 研究の意義と将来展望

分子は人間が設計して作り出せる最小単位の物質です。分子一つを通じた電気伝導機構や電子機能の解明は、省電力で高速なコンピュータの開発につながります。このような研究を行うには、合成化学・電子物性計測・理論の共創的な研究が不可欠です。今回の研究により、長距離の電気伝導を実現するための分子設計に関する指針が得られました。本成果は、導電性高分子の性能向上のための指針としても役立ち、フレキシブルな電子素子や次世代有機電子材料の開発にも貢献すると期待されます。

### Evolution of molecular wire for higher electrical conductance



特許

論文

Yamada, Ryo; Ohto, Tatsuhiko; Ie, Yutaka et al. Periodically twisted molecular wires based on a fused unit for efficient intramolecular hopping transport. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146, 23529. doi: 10.1021/jacs.4c07548  
 Ie, Yutaka; Yamada, Ryo; Tada, Hirokazu et al. Improving intramolecular hopping charge transport via periodical segmentation of  $\pi$ -conjugation in a molecule. *J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143, 599. doi: 10.1021/jacs.0c10560  
 Ie, Yutaka; Yamada, Ryo; Tada, Hirokazu et al. Highly planar and completely insulated oligothiophenes: Effects of  $\pi$ -conjugation on hopping charge transport. *J. Phys. Chem. Lett.* 2019, 10, 3197. doi: 10.1021/acs.jpcclett.9b00747

参考URL

<http://www.molelectronics.jp/>  
<https://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/omm/>

キーワード

単分子エレクトロニクス、単分子接合、ホッピング伝導