

NEXAFS によるピラジン単分子接合構造の探求 NEXAFS Study on Structure of Pyrazine Single Molecular Junction

金子哲*, 木口学

東京工業大学大学院理工学研究科 化学専攻
〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1, W4-10

Satoshi Kaneko and Manabu Kiguchi

Department of Chemistry Graduation School of Science and Engineering, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 W4-10 Ookayama, Meguroku, Tokyo 152-8551, Japan

1 はじめに

単一分子が金属電極間に架橋された単分子接合は次世代の電子材料として注目を集めている。今までダイオード、トランジスタ、スイッチ等の様々な機能を持つ単分子接合が作製されてきた。中でもピラジン単分子接合系は、ピラジン環内の二つの準安定構造が存在することが期待でき、更に外力により界面構造を変化させることで接合の伝導性を制御する事が期待できるため、興味深い単分子接合系である。我々はこれまで、Pt-ピラジン単分子接合が二つの電気伝導度状態を持つ事を見出し、外力により異なる電気伝導度を持つ準安定構造を作製できる可能性を見出した[1]。外部摂動により電気伝導度を制御するためにも、ピラジン分子の架橋構造に関する知見を得ることは重要である。そこで本研究では NEXAFS (near edge X-ray absorption fine structure) スペクトルを活用して、Pt-ピラジン界面構造を決定することを目指した。

2 実験

NEXAFS スペクトルの測定はフォトンファクトリーのビームライン7Aで行った。Arスパッタと加熱アニールにより清浄化Pt(111)表面に対して、約240 Kでピラジン分子を多層吸着させた。Pt基板を室温近くまで加熱することで多層吸着したピラジン分子を脱離させ、Pt(111)表面上に一層程度のピラジン膜を作製した。

3 結果および考察

図1はX線入射角度55°、30°で測定したPt表面上の多層および、単層のピラジン膜のNEXAFSスペクトルである。C-吸収端において284 eV, 287 eVに観測されているピークはC 1sから π^* 軌道への遷移に対応しており、304 eVのピークはC1sから σ^* 軌道への遷移に対応している。N-吸収端においては397 eV, 407 eVに観測されているピークはそれぞれN1sから π^* , σ^* 軌道への遷移に対応している[2]。多層と単層のピラジン膜のスペクトルを比較した場合、N-吸収端において、単層状態では π^* 軌道に由来したピークの線幅が増加した。N-吸収端におけるNEXAFSスペクトル

はピラジン分子内における窒素のp軌道の電子構造に関係しているため、ピラジンがPt表面と窒素部位を通して結合していることが示唆された。

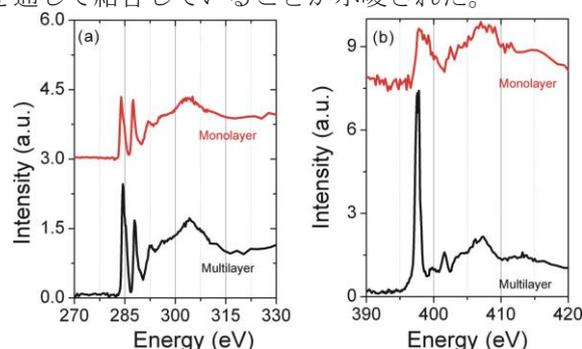


図1 (a)C端, (b)N端において測定した NEXAFS スペクトル. X線の入射角度はそれぞれ 55° (a)、30° (b)[3].

以上の NEXAFS 測定から得られた知見に加えて、単分子接合の電気伝導度測定、振動分光、理論計算を行う事で、二つの伝導度領域における単分子の架橋構造を明らかにすることが可能となる[1]。

4 まとめ

本研究では Pt 表面上に吸着したピラジン分子の NEXAFS スペクトルを測定した。単層における N-吸収端の π^* 軌道に由来したピーク幅の増大からピラジン分子が Pt 電極間に窒素部位を介して吸着していることが明らかとなった。

参考文献

- [1] S Kaneko, *et al.*, *Nanotechnology*, **24** (2013) 315201.
- [2] A.L. Johnson, *et al.*, *J. Phys. Chem.*, **89** (1985) 4071.
- [3] S.Kaneko, M.Kiguchi, *Fullerene, Nanotube, Carbon nanostructures*, **22** (2014) 166.

* kaneko.s.aa@m.titech.ac.jp