

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	電流 電圧特性,熱起電力計測に基づく単分子接合の電子状態計測
Title(English)	Resolving electronic structures of single-molecule junctions based on current-voltage characteristics and thermopower measurement
著者(和文)	小本祐貴
Author(English)	Yuki Komoto
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:乙第4170号, 授与年月日:2018年10月31日, 学位の種別:論文博士, 審査員:木口 学,大島 康裕,河内 宜之,沖本 洋一,西野 智昭
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:乙第4170号, Conferred date:2018/10/31, Degree Type:Thesis doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

論文審査の要旨及び審査員

(2000字程度)

報告番号	乙 第 号	学位申請者	小本 祐貴	
論文審査員	氏 名	職 名	氏 名	職 名
	主査 木口 学	教授	西野 智昭	准教授
	大島 康裕	教授		
	河内 宜之	教授		
	沖本 洋一	准教授		

本論文は "Resolving electronic structures of single-molecule junctions based on current-voltage characteristics and thermopower measurement 電流-電圧特性, 熱起電力計測に基づく単分子接合の電子状態計測"と題して、単分子接合の電子状態計測手法の開発、及び開発した単分子接合の電子状態計測による単分子接合の電子状態、及び架橋構造の決定に関する研究について述べている。本論文の本文は以下の8章から構成されている。

Chapter 1 General introduction では単分子接合研究の研究意義について社会的、科学的視点から解説しており、単分子接合研究の先行研究を追うことで、当該研究分野の現状と課題について述べている。研究目的を単分子接合電子状態計測法の確立、電子状態計測による金属-分子界面の構造決定と定めている。

Chapter 2 Theoretical background では単分子接合における電子輸送の理論的側面について述べ、本学位論文に用いられる単分子接合における伝導モデルの解説を行っている。

Chapter 3 Principles of measurement methods of electronic structures of single-molecule junctions では、単分子接合の電子状態計測法である、電流-電圧特性計測、熱起電力計測に関して、それぞれの手法により単分子接合の電子状態が求められる原理について述べられている。

Chapter 4 Determination of electronic structures of single-molecule junctions with Current-Voltage measurementsでは、1, 4-ベンゼンジチオール (BDT)、1, 4-ベンゼンジアミン (BDA)、1, 4-ビピリジンなどの典型的な単分子接合の電流-電圧特性計測結果が記述されている。それぞれの分子の電流-電圧特性曲線をBreit-Wignerモデルを用いてフィッティングすることにより、単分子接合の軌道エネルギー-金電極Fermi準位エネルギー差、及びカップリングを定量的に決定している。BDTの電流-電圧特性計測では、複数の伝導状態を観測し、各伝導状態の軌道エネルギー-金電極Fermi準位エネルギー差、及びカップリングを理論計算と比較することにより、各伝導状態の架橋構造を決定している。

Chapter 5 Thermopower measurement of single-molecule junctionsでは、BDT、1, 4-ビピリジンの熱起電力測定結果を報告している。ゼーベック係数の符号から、BDTは最高被占軌道、ビピリジンは最低空軌道を介した伝導であると結論付けている。Chapter 4の電流-電圧特性計測結果と組み合わせることにより、単分子接合の電子状態を決定している。また、電流-電圧特性計測との比較から熱起電力計測時における探針-基板間の実効的温度差を推定する手法が提案されている。

Chapter 6 Investigation of electronic structure of highly conductive single-molecule junctions via direct π -bondingでは、 π 共役面が電極と直接相互作用し、高い伝導性を示すメシチレン単分子接合の電流-電圧特性計測について述べられている。電流-電圧特性計測からメシチレン単分子接合の高い伝導性が大きいカップリングに起因すると明らかにしている。

Chapter 7 Current-Voltage characteristics of asymmetric junctionsでは、整流特性の発現が期待されている2種の単分子接合の整流性に関して報告されている。

Chapter 8 General conclusionsでは本論文の総括と本成果の貢献が期待される当該分野の将来展望が述べられている。

以上要約すると本論文は電流-電圧特性計測及び熱起電力計測を組み合わせ、単分子接合の電子状態計測法を確立した点、電子状態計測から、単分子接合の架橋構造の決定に成功した点、種々の分子接合の電流-電圧特性、電子状態を明らかにすることに成功した点において、単分子接合研究の基礎科学、応用展開に大いに貢献していると考えられる。したがって、本論文は博士(理学)の学位論文として十分な価値があると認められる。