

# 論文審査の結果の要旨

氏名 平岡 諒一

本論文は、単一分子の電子輸送特性に関し、走査トンネル顕微鏡(STM)を用いて研究した成果を報告している。論文は以下の六章で構成されている。第一章は、研究の背景と位置づけを述べている。第二章は、実験手法の原理、装置構成、試料作製等の実験準備について説明している。第三章以降は実験結果及び考察である。それぞれ第三章 Electron Transport of Fullerene ( $C_{60}$ )、第四章 Electron Transport of Silicene Nano Ribbon (SiNR)、第五章 Magnetic Properties of Iron(II) Phthalocyanine (FePc) Junction となっている。第六章 Summary and Outlook では研究成果とその意義について総括している。以下で各章の特徴を詳しく述べる。

第一章では、電極に挟まった単分子の特徴を紹介している。本論文の主題は、単分子接合の電子輸送特性と以下の要素の関係を、実験的に調べ理解することである。電子輸送特性に影響を与える要素として、(1) 分子の電子状態(分子固有の性質)、(2) 電極に対する分子の幾何的な配置、(3) 電極の影響(電極が分子と接触し分子接合を形成する際に、分子本来の固有の性質がどのように影響を受けるか)、の3つがある。単分子接合の電子輸送現象の背後にある物理を詳細に理解するには、上記3つの要素の影響を明らかにすることが必要であり、STMを用いた単分子レベルの物性評価が有効であると述べている。

第二章は、実験手法である STM、STMを用いた電子状態の測定手法である走査トンネル顕微分光法(STS)、STMを用いた単分子接合の測定方法(STM contact 測定)、さらに第五章において実験結果を考察する際に用いた計算手法(密度汎関数法:DFT)について記述している。

第三章では、電子輸送チャンネルと分子の電子状態の関係、および電子輸送特性に対する分子の幾何的な配置の影響を調べる目的で、フラーレン( $C_{60}$ )分子について調査した結果と考察を記述している。超伝導電極に挟まれた  $C_{60}$  分子の I-V スペクトルには、多重アンドレーエフ反射が反映されるので、ランダウアの公式に基づく解析を実施して、単分子接合の電子輸送特性(電子輸送チャンネルの数と透過率)を決定した。さらに、異なる配向の二種類の  $C_{60}$  分子について解析し、共に3つの電子輸送チャンネルを持つことを示した。STSの結果、気相中の孤立状態では三重縮退している  $C_{60}$  分子の最低非占有軌道(LUMO)がフェルミ準位近傍に存在することが示され、電子輸送チャンネルの数とフェルミ準位近傍にある分子の電子状態の数が対応すると結論した。この二種類の  $C_{60}$  分子接合では、電子輸送チャンネルの透過率が異なることから、透過率が分子の幾何的な配置に依存することを実験的に明らかにした。

第四章では、ハニカム構造体の一種であるシリセンナノリボン(SiNR)を Ag(110)基板上に合成し、その電子状態と電子輸送特性について報告している。STSの結果から、SiNR特有の電子状態の一つであるエッジ状態が Ag 基板上では失われていることを示した。その原因は Ag 基板と SiNR の強い相互作用であると指摘している。STM 探針を SiNR と

接触させ、Ag 基板から SiNR を持ち上げた状態で、STM contact 測定を行うと、エッジ状態に由来すると考えられる鋭いピークが I-V スペクトル中に観測された。STM 探針による分子操作により、Ag 基板と SiNR の相互作用を弱めることで、SiNR のエッジ状態が復活したと結論している。この結果は STM 探針により分子の幾何配置を変えることで、単分子接合中の分子の電子状態を制御できる可能性を示唆している。

第五章では、Au(111)基板上的鉄フタロシアニン(FePc)分子のスピンの状態が単分子接合形成においてから受ける影響について報告している。Au(111)基板では、FePc 分子の二つの不対電子は共に近藤共鳴状態を形成し、見かけ上  $S=0$  の状態にある。STM contact 測定における I-V スペクトルと、その磁場依存性を調べた結果、STM 探針が分子に近づき、電極と分子の相互作用が生じると、FePc 分子の近藤共鳴状態は段階的に解消され、電極間に単分子接合が形成されると、 $S=1$  のスピン状態に変化していることが示された。理論計算も、これを支持する結果を示した。即ち、近接する STM 探針からの摂動を受け、FePc 分子のスピンの状態が変化することが示された。

第六章では、これらの結果を総括し、本論文で示された成果の意義を記述している。

論文提出者は、本論文に記載された研究の実験及び計算の主たる実施者として寄与した。従って、博士（科学）の学位を授与できると認める。

以上 1995 字