
单分子量子输运研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/38822.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

单分子量子输运研究取得进展

。在纳米与亚纳米尺度电子器件中，电极与导电沟道之间的接触界面通常决定器件性能的上限。对于单分子结这类极限尺寸器件，金属—分子—金属界面属于典型的异质界面，电极与分子之间的能级与轨道失配会引发

电子背散射，使器件电导远低于量子电导极限 $G_0=2e^2/h$

。因此，如何抑制界面散射并实现接近理论极限的量子输运是分子电子学领域的重要挑战。

近日，中国科学院化学研究所科研团队发展出碳纳米带分子界面化学键的原位操控方法，成功构筑了原子级界面融合结构，并在实验上首次观测到逼近理论极限的单分子电导。

研究发现，通过电场与分子曲率的协同调控，可原位诱导金原子插入稠环碳纳米带分子骨架，在分子两端形成稳定的C—Au—C共

价桥接结构。该结构呈约90

的几何构型，使分子共轭骨架与金电极之间实现原子级连续连接，从而将传统的分子—电极接触界面转变为分子—电极融合界面。

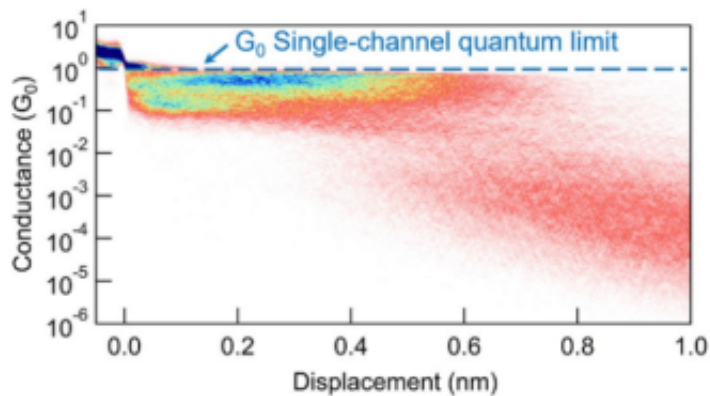
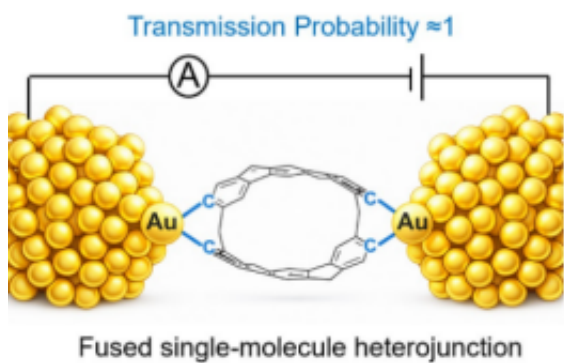
理论计算表明，该界面结构的几何匹配能够激活金电极“惰性”d轨道参与界面成键，并在费米能级附近形成强界面杂化态，从而构建连续的d—共轭量子输运通道。这一机制明显降低了界面电子散射，使电子在整个分子结中实现接近无反射的传输。单分子输运实验进一步证实，在界面融合结构形成后，单分子电导接近量子电导

极限 G_0 ，电导统计分布在 G_0

附近，并呈现明显的饱和行为，这表明电子输运已接近理想的单通道量子极限。

该研究首次在实验上实现了分子—电极的原子级界面融合，提出了基于几何匹配实现界面去异质化的新策略。这一成果不仅为突破传统异质界面散射限制提供了新思路，也为开发高注入效率、低能耗的下一代纳米电子与光电器件奠定了重要的物理基础。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（Journal of the American Chemical Society）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会、中国科学院等的支持。



单分子器件输运逼近量子电导极限

研究团队单位：化学研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发