分子拓扑调控长程相干电荷输运研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/42130.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！

分子拓扑调控长程相干电荷输运研究取得进展
。单分子器件是研究极限尺度下电荷输运规律、探索分子电子学功能的重要平台。长期以来，相关研究主要采用线性分子，通过分子末端的锚定基团将其连接于金属电极之间。但这种构筑方式限制了器件结构与功能的拓展。如何将更复杂的分子骨架引入器件，并在更长距离上维持有效电荷输运，是单分子电子学领域的重要研究方向。

此前，中国科学院化学研究所等科研团队研发了碳基环形单分子器件，通过弯曲碳骨架与金电极的直接耦合，在无需传统锚定基团的条件下实现了分子组装，降低了接触电阻。在此基础上，团队通过分子对称性调控实现了室温三态电导开关，并依托原子级界面融合获得了接近量子极限的单分子电导，展现了环形架构在提升输运性能与调控器件功能方面的独特优势。

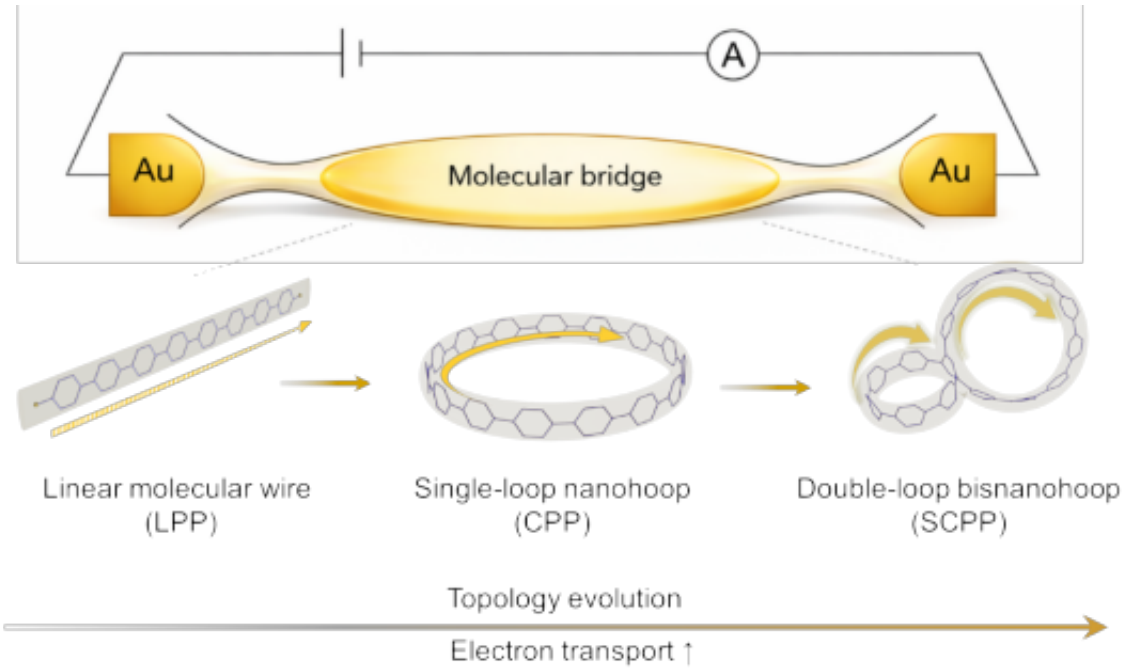
近日，该团队与中国科学技术大学合作，将研究进一步拓展至具有“ 8 ”字形双环拓扑的三维共轭分子。这类分子由两个相连的碳纳米环构成，具有更复杂的空间结构。团队利用两环弯曲程度的差异，无需引入传统锚定基团，实现了双环单分子结的可重复构筑，为研究复杂拓扑结构中的电荷输运奠定了实验基础。单分子电导测量表明，双环拓扑不仅能够提高电导性能，更能减缓电导随输运距离增加的衰减。与线性和单环对照体系相比，双环体系的电导表现出较弱的长度依赖性。在相近输运距离下，其电导最高可达单环体系的约100倍；在约10个苯环单元的输运距离上，仍可维持相干隧穿，显示出双环拓扑在长程电荷输运中的优势。

理论计算揭示了上述输运特性的电子结构机理。双环连接改善了分子与电极之间的能级匹配，随着两环尺寸差异减小，参与输运的电子态由主要分布于单个环逐渐扩展至整个分子骨架，与两侧电极的耦合也更均衡。这些效应共同提升了电荷输运效率，并减弱了分子长度增加所引起的电导衰减。

该研究将碳基环形单分子器件
拓展至更复杂的三维共轭体系，表明
分子拓扑的分子骨架整体连接方式，是调控电子输运的重要结构因素。这一工作将研究视角从局部结构修饰拓展至整体拓扑设计，为在更大分子尺度上实现高效电荷输运提供了新的结构设计思路。

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。

论文链接



单分子器件中分子拓扑结构的拓展

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转发