化学所等在单分子电导调控方面取得系列进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/9838.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！

近年来，分子电子学领域陆续发展了机械可控裂结技术（MCBJ）、扫描隧道显微镜裂结技术（STM-BJ）、石墨烯-分子-石墨烯的单分子结方法（GMG-SMJs）等技术，实现了对单分子电导的测量。通过向共轭分子（分子
导线）两端引入锚定基团（如-SCH_3和-NH_2
），其分别可与电极结合和连接，进而可以将共轭分子（分子导线）“ 锚定 ”在两个电极之间和测量单分子电导。该方法已被用于研究共轭分子的结构以及“ 锚定 ”基团对单分子电导的影响规律。

自2015年起，中国科学院化学研究所研究员张德清与厦门大学教授洪文晶、英国兰卡斯特大学教授Colin Lambert开展密切合作，发挥在响应性功能分子的研究基础，设计合成含有“ 锚定 ”基团的响应性功能分子（张德清课题组），开展单分子电导的高精度测量（洪文晶课题组）以及理论计算（Colin Lambert课题组），实现了对单分子电导的可逆调控。他们研究了萘二酰亚胺（NDI）单分子结的电输运性质，并通过原位电化学反应，成功测定了NDI阴离子自由基和二价负离子的电导，在单分子层次上实现对三个电导状态的可逆调控（*Angew. Chem. Int. Ed.* 2015, 54, 13586.）。设计合成了在不同位置取代“ 锚定基团 ”的薁分子(Azulene)，不仅“ 锚定基团 ”取代位置可以影响薁分子单分子结的电导，而且发现质子化（加入三氟乙酸）可以进一步改变单分子结的电导（*Chem. Sci.* 2017, 8, 7505.）。特别是向体系中引入螺吡喃分子，利用其开环异构体可以可逆地与质子结合和释放，通过分子间光诱导质子转移策略在单分子尺度下实现了紫外/可见光照对单分子电导的可逆调控，构筑了高度可逆且单分子电导开关比达到一个数量级的单分子开关；利用质子和紫外/可见光照可以调控薁分子单分子结的电导的性质，构筑了以质子、紫外/可见光照为输入信号、以单分子电导为输出信号的分子逻辑门（*Angew. Chem. Int. Ed.* 2019, 58, 3829.）。

他们进一步运用通过单分子电导研究共轭分子间π-π相互作用对传输性能的影响。他们设计合成了一系列带有双“ 锚定 ”及单“ 锚定 ”基团的噻吩寡聚物分子，并分别构建了模拟分子链内输运的单分子器件和模拟分子链间输运的双分子组装体器件。研究发现通过分子链内的电导随分子长度增加呈指数降低，而双分子组装体器件通过分子间电输运过程的电导基本不随分子共轭结构及长度的变化而改变。表明在单分子尺度，分子间输运甚至可以提供比分子链内输运更高效的电传输途径。同时还发现噻吩寡聚物分子形成双分子组装体器件的概率随着分子共轭长度的增加而提高。表明增大分子的共轭区域有利于分子间π-π相互作用，进而提高了形成双分子组装体器件的概率。该工作通过在单分子尺度构筑模型分子体系，揭示了噻吩类衍生物分子结构与其电输运性质之间的构效关系，为理解聚集态有机半导体材料的电输运过程提供了独特的视角，也为构筑基于分子间电输运作用的新型分子器件开拓了思路。研究成果发表于近期出版的《德国应用化

学》上（*Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 3280.）。

图：含双“锚定”及单“锚定”基团的联噻吩分子和单分子电导研究

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