

Conductance and Vibrational States of Single-Molecule Junctions Controlled by Mechanical Stretching and Material Variation

단일 분자를 통한 전하전송 연구는 1997년에 하나의 벤젠분자를 통한 전도도를 측정하면서 본격적으로 시작되었고[Reed 외, *Science* **278**, 252 (1997)], 2009년에 분자 트랜지스터 연구가 보고되면서[송현욱, 김영상의 *Nature* **462**, 1039 (2009)], 분자-스케일의 소자구현 가능성과 함께 활발히 연구되고 있다. 특히, 분자와 전극 금속원자의 구조와 결합세기에 따른 분자소자의 전기적 특성변화는 중요한 연구주제이다. 예를 들면, 전자빔 리소그래피 방법으로 제작된 100 nm 선폭의 금속 나노 와이어에 분자를 자기조립하고 Mechanically controlled break-junction (MCBJ) 장치를 이용하여 전극을 구부리면, 나노 와이어가 당겨지면서 단일 원자 접합 이상에서 전기 전도도가 양자단위(1G₀)로 양자화됨을 볼 수 있고, 이 금속 접합을 더욱 당기게 되면 ~mG₀ 영역에서 편평대(plateau)가 나타나는데 이것을 단일 분자 접합 소자의 특성 전도도라 한다. 하지만 이 특성 전도도가 일정한 값을 보이지 않고 여러 전도도 값을 보여주는 것이 풀리지 않는 의문이었다.

최근 독일 Konstanz대학교 김영상(박사과정), Elke Scheer 교수 연구팀과 광주과학기술원 송현욱 박사(現 Yale대학교 박사후 연구원), 이탁희 교수 연구팀은 액체 헬륨 온도에서 MCBJ 장치를 이용하여 분자와 전극을 picometer 수준의 해상력으로 당기면서 전기 전도도와 비탄성 터널링 분광법(Inelastic electron tunneling spectroscopy)을 측정하였다.[김영상, 송현욱 외 *Phys. Rev. Lett.* **106**, 196804 (2011)]. 분자는 Hexanedithiol (HDT)이 이용되었고, 구조적으로 단순하고 유연한 형태를 가지고 있다. 그리고 thiol은 금속에(특히 Au에) 화학적으로 강하게 결합하는 특

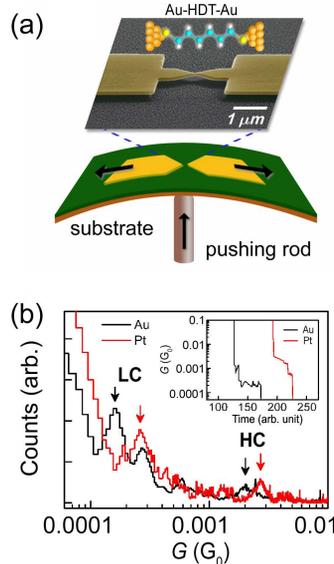


그림 1. (a) 단일 분자 접합 소자 도식. (b) 다른 두 전극을 이용한 단일 분자 접합 소자의 전기 전도도 히스토그램과 (삽입) 전기 전도도.

성이 있다. 전극에는 Au과 Pt이 비교되었는데 Pt은 Au보다 원자 사이의 결합력이 더 강하고, 페르미 준위에서 d -오비탈의 상태밀도가 더 높다. 그림 1(a)은 MCBJ 구조와 주사전자현미경 사진을 보여준다.

단일 분자 접합 소자를 당기면서 전도도를 측정하고 통계적으로 히스토그램을 그려보면 그림 1(b)처럼 높고 낮은 전도도 상태를 볼 수 있다.

연구진은 높은 전도도 상태와 낮은 전도도 상태에서 분자와 전극의 구조 변화를 관찰하기 위해 비탄성 터널 분광법을 수행하였다. 이와 같이 분자 접합을 당기면서 비탄성 터널 분광법과 전도도를 함께 측정함으로써 금속의 포논(phonon)과 분자의 진동 모드와 같은 단일 분자 접합 소자의 특성을 관찰할 수 있다.

Au-HDT-Au 접합의 특정 상태에서 비탄성 터널 분광법의 진동 모드를 분석하여 HDT 분자의 gauche와 trans 구조를 구분할 수 있었으며, gauche 구조가 더 낮은 전기 전도도 상태를 실

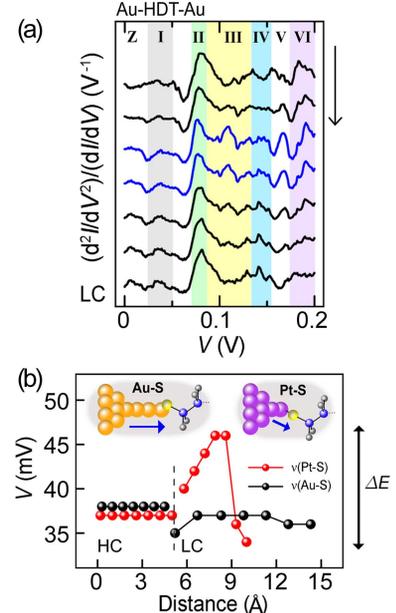


그림 2. (a) 단일 분자 접합 소자의 당김에 따른 비탄성 터널 분광 그래프. (b) 당기는 거리에 따른 Au-S와 Pt-S 접합의 진동 에너지 변화.

험적으로 증명하였다.

단일 분자 접합 소자를 당기면서 Au과 Pt 그리고 Au-S과 Pt-S 결합 진동모드의 변화를 분석함으로써, 그림 2(b)처럼 Au 원자는 분자와 강하게 결합하여 1차원 사슬형태로 점점 늘어나고 Pt 원자는 늘어나지 않고 분자와의 결합이 약해진다는 것을 알 수 있었다.

이 연구에서 Au과 Pt 원자 사이에 연결된 단일 분자의 당김 의존성을 전기 전도도와 비탄성 터널 분광법으로 비교하였고, 전극 금속의 특성이 분자의 형태나 전극 구조를 결정한다는 사실을 확인하였다. 이러한 다각적인 실험적 분석 방법은 전극과 분자 접합의 정확한 구조와 전도특성 간의 상호관계를 이해하고 전하전송을 조절하는데 새로운 방법을 제시한다.

김영상 (Konstanz대학교), 송현욱 (광주과기원, 現 Yale대학교), Florian Strigl, Hans-Fridtjof Pernau(Konstanz대학교), 이탁희(광주과기원), Elke Scheer(Konstanz대학교), *Phys. Rev. Lett.* **106**, 196804 (2011).