

中国科学院物理研究所 SF10组供稿  
北京凝聚态物理国家研究中心

第91期

2019年12月25日

## 单分子水平实现光场和电场对器件的调控

偶氮苯分子作为光致变色分子，在紫外和可见光的照射下，可实现顺式与反式之间的相互转化。利用分子电路在单分子水平研究偶氮苯分子的异构化，不仅能实时观测单个分子对外界刺激的响应，研究其动力学过程，同时也有望实现单分子开关、单分子存储器等应用，实现器件微型化。

最近，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心SF10组博士生孟利楠在孟胜研究员和北京大学化学与分子工程学院郭雪峰教授的指导下，与加拿大麦吉尔大学郭鸿课题组、物理所张广宇课题组等合作发现石墨烯基单分子器件中光场和电场能有效地调控单个偶氮苯分子的结构和输运性质，揭示了偶氮苯分子异构化的内在物理机制。相关成果发表在《自然 通讯》(Nature Communications) 上。

他们与合作者设计合成了以三联苯为主链、偶氮苯为侧链的分子，并在末端修饰上氨基，通过酰胺键将分子连接在石墨烯电极之间(图1a)。该分子在反式与顺式两种不同的构象下不仅在分子结构上有较大的差异，而且偶极矩在沿主链方向的投影也有很大的不同(图1b)。在单分子器件中，他们研究了偶氮苯分子输运信号对偏压以及光照的响应。分子结构的变化会影响分子的轨道能级，进而通过电导的变化表现出来。

研究发现偶氮苯分子在光场或某一方向的电场下，会发生由反式到顺式的构象变化，即光/电场会诱导偶氮苯分子异构化(图2a，负向偏压)。结合理论计算，他们发现由于反式与顺式结构下偶氮苯分子沿主链方向的偶极矩不同，因此电场对分子能量的调控能力有差异。在某一个电场方向下，随着电场场强的增加，偶氮苯分子顺式结构与反式结构的能量差  $\Delta E = E^c - E^r$  逐渐减小，继续增加电场强度，顺式结构的能量就会低于反式结构的能量，顺式结构更加稳定。而在相反的电场方向下，顺式结构与反式结构的能量差随着电场强度的增大而逐渐增大，反式结构始终是最稳定的结构(图2c)。与此同时，他们还实现了在不同波长的光照下偶氮苯分子在反式与顺式之间的转换(图3)。

该工作不仅结合实验和理论计算实现了光/电场对偶氮苯分子构象的调控，是一种新型的“门电压”，同时可以通过分子结构调控实现单分子存储器和单分子光开关。该研究成果以“Side-Group Chemical Gating via Reversible Optical and Electric Control in a Single Molecule Transistor”为题发表在Nature Communications 10, 1450 (2019)上。

此外，孟胜课题组与国家纳米科学中心戴庆、北京大学刘开辉、国防科技大学戴佳钰、芬兰阿尔托大学Sun Zhipei等团队合作，成功实现了完全由光波的电场诱导的碳纳米管电子发射，获得超过40阶的极端非线性相干光电子发射源(图4)。实时电子动力学模拟表明，与通常的场发射和多光子激发过程不同，光子电场诱导价带电子通过隧穿直接发射，因而具有强相干性、高亮度、极端非线性等特点。论文以“Extreme nonlinear strong-field photoemission from carbon nanotubes”为题发表在Nature Communications 10, 4891(2019)上。

这些工作得到了来自科技部、国家自然科学基金委、北京市科委等基金的支持。

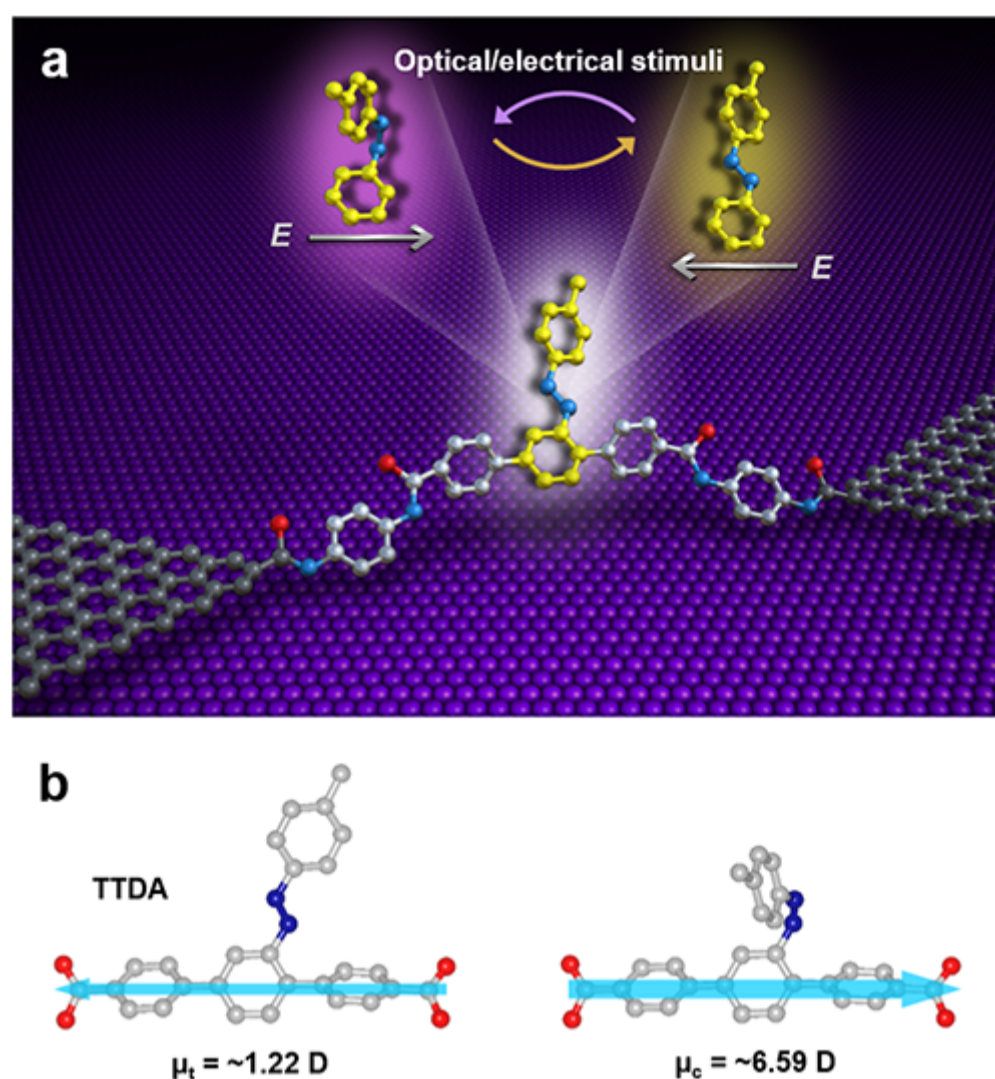


图 1. 石墨烯基单分子器件的结构示意图(a)及偶氮苯分子反式(*trans*)与顺式结构(*cis*)下偶极矩(b)。

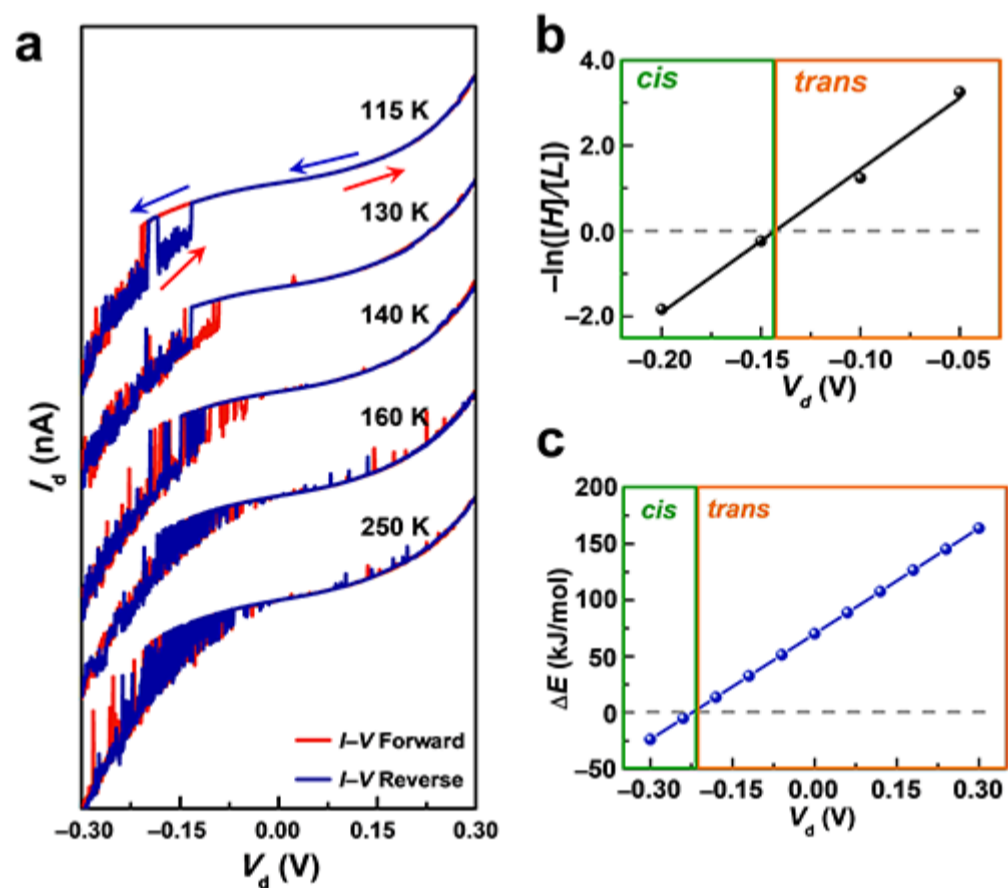


图 2. 电场诱导偶氮苯分子构象变化。a为不同温度下测试得到的IV曲线；b是实验得到的高低电导态比例随偏压的变化（H为高电导态*cis*，L为低电导态*trans*）；c是计算得到的能量差随偏压的变化。

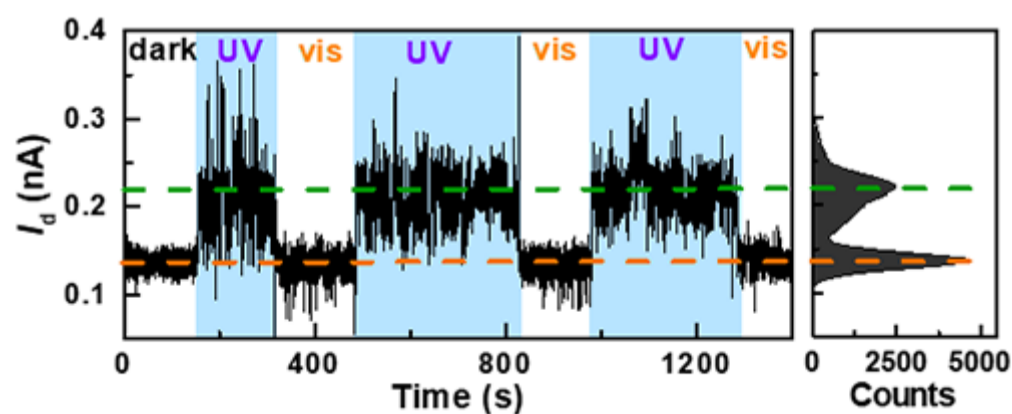


图 3. 偶氮苯分子在连续的光照条件下发生构象变化。

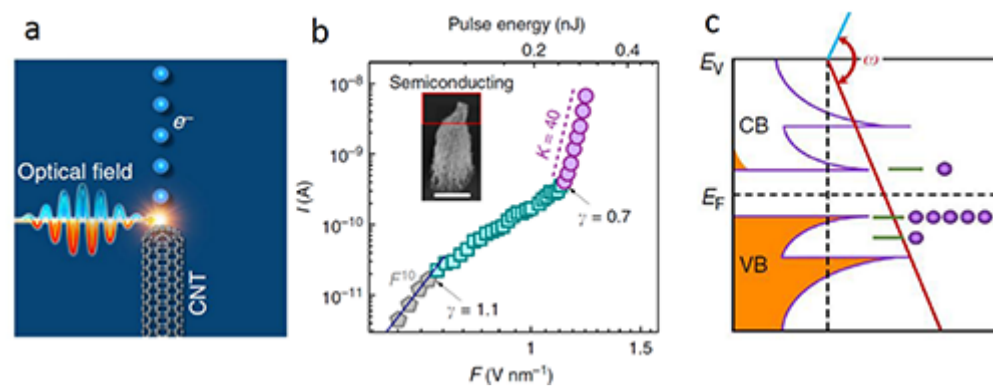


图 4. 光波电场诱导的碳纳米管高阶非线性光电子发射。

[NComm10.1450\(2019\).pdf](#)

[NComm10.4891\(2019\).pdf](#)

[公开课](#)
[微信](#)
[联系我们](#)
[友情链接](#)
[所长信箱](#)
[违纪违法举报](#)



中国科学院  
CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

版权所有 © 2015-2020 中国科学院物理研究所 京ICP备05002789号 京公网安备1101080082号 主办：中国科学院物理研究所 北京中关村南三街8号 100190