

Studium der elektronischen Zustände in Molekülen mit mechanisch variierbarer Ankopplung

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt von

Bernd Briechle

an der Universität Konstanz
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Sektion
Fachbereich Physik

Dissertation der Universität Konstanz
Datum der mündlichen Prüfung: 23.10.2013

Referenten: Prof. Dr. Elke Scheer
Prof. Dr. Paul Leiderer

Berichte aus der Physik

Bernd Briechle

**Studium der elektronischen Zustände in Molekülen
mit mechanisch variierbarer Ankopplung**

Shaker Verlag
Aachen 2014

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Konstanz, Univ., Diss., 2013

Copyright Shaker Verlag 2014

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-3197-3

ISSN 0945-0963

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Ever tried. Ever failed. No matter.
Try again. Fail again. Fail better.

SAMUEL BECKETT

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Elektronischer Transport durch makroskopische Leiter	3
2.1.1	Mittlere freie Weglänge	4
2.1.2	Fermiwellenlänge	5
2.1.3	Phasenkohärenzlänge	6
2.2	Elektronischer Transport durch einzelne Atome	8
2.3	Elektronischer Transport durch einzelne Moleküle	11
2.3.1	Tunneln durch eine Barriere beliebiger Form	13
2.3.2	Direktes Tunneln	14
2.3.3	Fowler-Nordheim-Tunneln	15
2.3.4	Resonantes Tunneln	15
2.3.5	Tunneln durch eine Doppelbarriere	21
2.3.6	Aktivierter Transport	24
2.4	Moleküle	25
2.4.1	Chemische Bindungen und Konjugation	25
2.4.2	Schaltermoleküle	27
2.4.3	Ankergruppen	30
2.5	Kontaktierung von Einzelmolekülen	30
2.5.1	Rastertunnelmikroskop	30
2.5.2	Bruchkontakte	31
2.5.3	Elektromigration	32
2.5.4	Rasterkraftmikroskop	34
2.5.5	Aufbringen der Moleküle	35
3	Experimentelles	37
3.1	Probenherstellung	37
3.1.1	Strukturierung der MCBJs	37
3.1.2	Probendesign	40
3.1.3	Herstellung der Flüssigkeitszelle	42
3.2	Messaufbau	45
3.2.1	Bruchmechanik	45
3.2.2	Messelektronik	48

3.2.3	Labview-Programm	50
3.3	Training der Proben	51
3.4	Moleküle	52
4	Auswertung	61
4.1	Erstellen einer Datenbank	61
4.2	Kalibrierung der Proben	63
4.3	Erzeugung von Leitwerthistogrammen	65
4.4	Einteilung der IV-Kennlinien nach ihrer Kurvenform	67
4.4.1	Ein-Ausschalten	68
4.4.2	Ausschalten	68
4.4.3	Knick	68
4.4.4	Sprünge	70
4.4.5	Symmetrische Kurven	70
4.4.6	Asymmetrische Kurven	70
4.5	Anfitten der IV-Kurven	70
4.6	Erzeugung von Transmissionshistogrammen	71
5	Ergebnisse	73
5.1	Leitwerthistogramme	73
5.1.1	Leitwerthistogramme des Moleküls C5F-TSC	76
5.1.2	Leitwerthistogramme des Moleküls C5F-4Py	78
5.1.3	Leitwerthistogramme des Moleküls C5F-MN	79
5.2	Transmissionshistogramme	80
5.2.1	Transmissionshistogramme des Moleküls C5F-TSC	83
5.2.2	Transmissionshistogramme des Moleküls C5F-4Py	85
5.2.3	Transmissionshistogramme des Moleküls C5F-MN	87
5.3	IV-Charakteristiken	88
5.3.1	IV-Charakteristiken des Moleküls C5F-TSC	90
5.3.2	IV-Charakteristiken des Moleküls C5F-4Py	93
5.3.3	IV-Charakteristiken des Moleküls C5F-MN	96
5.3.4	IV-Charakteristiken der Lösungsmittel Toluol und THF/Toluol	97
6	Zusammenfassung und Ausblick	101