

密度汎関数法を用いたラジカル間交換相互作用の計算によるアームチェア型グラフェンナノリボン (AGNRs) の導電性評価

(京大院工) ○篠塚 智仁・西澤 尚平・清水 大貴・松田 建児

Evaluation of electron transport capability of armchair graphene nanoribbons (AGNRs) by calculating exchange interaction between terminally attached radicals (*Graduate School of Engineering, Kyoto University*) Tomohito Shinozuka, Shohei Nishizawa, Daiki Shimizu, Kenji Matsuda

Electron transport capability of single molecular wires can be characterized by decay constant β of intramolecular exchange interaction J between terminally substituted two radicals such as nitronyl nitroxides. In this way, the β values of armchair graphene nanoribbons (AGNRs) with various widths N were estimated by the UDFT method. The calculation revealed that AGNRs with $N = 3k+2$ ($k = 1, 2, 3 \dots$) show much smaller β than the others, which is consistent with the theoretically expected zero band gap of $N = 3k+2$ AGNRs.

Keywords : Molecular electronics; Exchange interaction; Polycyclic aromatic hydrocarbon; Quantum calculation

単分子ワイヤの電子輸送特性は、ワイヤ両端にラジカルを導入した分子におけるラジカル間の交換相互作用 J を用いて評価できる。¹⁾ 具体的には J のワイヤ長に対する片対数プロットの傾きに当たる減衰定数 β が小さいほど電子輸送能が高いとみなせる。本研究ではワイヤとしてアームチェア型グラフェンナノリボン (AGNRs) に着目し、末端にニトロニルニトロキシド (NNs) を置換したモデル分子の J を UDFT 計算によって計算することで β を見積もったところ、ワイヤ幅 $N = 3k+2$ ($k = 1, 2, 3 \dots$) において β が顕著に小さくなった。(Figure 1b) これは強結合近似において $N = 3k+2$ の場合のみ AGNR のバンドギャップがゼロになるという理論予測²⁾と矛盾しない。

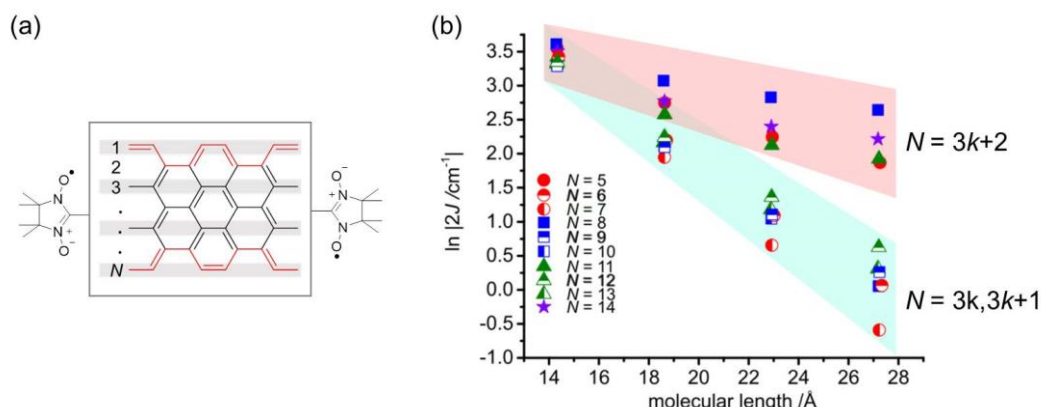


Figure 1. (a) AGNRs bearing NNs with various widths N ($N = 5-14$). (b) Dependence of J values on the molecular length.

1) S. Nishizawa, *et al.*, *J. Phys. Chem. C*, **2013**, 117, 26280.

2) K. Wakabayashi, *et al.*, *Phys. Rev. B*, **1999**, 59, 8272.