

## グラフ理論を用いたヘテロ原子含 $\pi$ 共役単分子接合における伝導挙動の解明

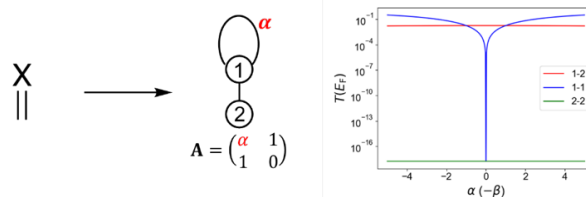
(九大先導研) ○岡澤 一樹・辻 雄太・吉澤 一成

Elucidation of Conduction Behaviors for Heteroatom-Containing  $\pi$ -Conjugated Single-Molecular Junctions by Using the Graph Theory (*Institute for Materials Chemistry and Engineering, Kyushu University*) ○Kazuki Okazawa, Yuta Tsuji, Kazunari Yoshizawa

One of the unique electron transport properties in single-molecule junctions is the interference between transport electrons, called quantum interference (QI), which is caused by the wave-particle duality of electrons. There are two types of QI: one is the constructive QI, which occurs when the electron phases are the same, and the other one is the destructive QI, which occurs when the electron phases are opposite. Whether the constructive or the destructive QI occurs depends on which atoms in the molecule are connected with the electrodes on the junction. To predict whether the destructive QI occurs or not for a specific connection mode in the junction, graph-theoretic path-counting approaches have been proposed. However, this method cannot be applied to molecules containing heteroatoms. In this study, we have extended the theory based on the Hückel method and the Sachs formula.

**Keywords :** Graph Theory; Single-Molecular Junction; Quantum Interference

$\pi$  共役分子を用いた単分子接合では、電子の波動性に由来する量子論的な影響が非常に顕著であり、特異な伝導特性が観測される。単分子接合における特異な伝導特性は、フロンティア軌道論やグラフ理論に基づいたアプローチによって予測可能である<sup>[1]</sup>。辻らは交互炭化水素からなる単分子接合において、2つの電極が接続された炭素原子間の経路の歩数を数えることで伝導特性を予測する方法をグラフ理論に基づいて示した<sup>[2]</sup>。しかし、この方法はヘテロ原子を含んだ分子には適用することができない。そこで我々は、交互炭化水素中の1つの炭素原子をヘテロ原子に置換した単分子接合における伝導特性の解明をグラフ理論に基づいて行った。また、グラフ理論に基づく予測の妥当性を検証するため、非平衡 Green 関数法を用いていくつかの分子について実際に伝導度の計算を行った。これらの詳細については当日発表する。



**Figure 1.** Hetero-containing ethylene derivative with its molecular graph representation and adjacency matrix (left); Transmission probabilities for the three connection modes are plotted as a function of the Coulomb integral of the hetero atom X (right).

### 参考文献

- [1] K. Yoshizawa, T. Tada, A. Staykov, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 9406–9413.
- [2] Y. Tsuji, E. Estrada, R. Movassagh, R. Hoffmann, *Chem. Rev.* **2018**, *118*, 4887–4911.