

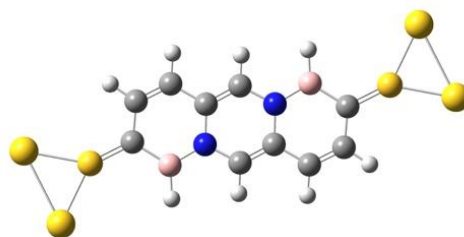
ポリアセンの電流-電圧特性におけるヘテロ原子置換効果に関する理論研究

(阪大基礎工¹・阪大院基礎工²・阪大 QIQB³・阪大 RCSEC⁴・阪大 ICS-OTRI⁵・阪大 SRN-OTRI⁶) ○西田光博¹・甘水君佳²・佐々木 啓介²・津田雅大²・林優太²・本城一樹¹・益田晃希¹・岸亮平^{2,3,4,5}・北河康隆^{2,3,4,5,6}

Theoretical study of heteroatom substitution effect on current-voltage characteristics of polyacenes (¹Faculty of Engineering Science, Osaka Univ., ²Graduate School of Engineering Science, Osaka Univ., ³QIQB, Osaka Univ., ⁴RCSEC, Osaka Univ., ⁵ICS-OTRI, Osaka Univ., ⁶SRN-OTRI, Osaka Univ.) ○Mitsuhiro Nishida,¹ Naoka Amamizu,² Keisuke Sasaki,² Masahiro Tsuda,² Yuta Hayashi,² Kazuki Honjo,¹ Koki Masuda,¹ Ryohei Kishi,^{2,3,4,5} Yasutaka Kitagawa,^{2,3,4,5,6}

π -conjugated molecules have attracted much attention by their interesting optical and electrical properties for applications to organic electronics. By controlling the properties of these molecules via the heteroatom substitution, it is expected that new materials with properties suitable for specific purposes can be designed. In particular, photophysical and redox properties of various BN-substituted polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) have been investigated.¹⁾ In this study, therefore, we investigate the single-molecule conductivity of the heteroatom doped polyacenes from the view point of the application to the molecular electronics. The effect of number and position of heteroatom substitution on the current-voltage characteristics is examined by using the elastic scattering Green's function and density functional theory. The mechanism of the substitution effect on the current-voltage characteristics is discussed based on molecular orbitals. *Keywords* : conductivity; polyacene; heteroatom substitution; elastic scattering Green's function; density functional theories

π 共役をもつ分子は興味深い光学的、電気的性質を持ち、有機エレクトロニクスへの応用のために大きな関心がもたれている。これらの分子の性質をヘテロ原子置換により制御することで、目的に応じた物性をもつ新しい材料が設計出来ると期待されている。特に BN 置換した様々な多環芳香族炭化水素 (PAHs) が合成され、光物理的特性、酸化還元特性が調べられている。そこで、本研究では分子エレクトロニクスへの適用という視点からヘテロ原子をドーピングしたポリアセン (右図) の単分子電気伝導性を調べ、置換するヘテロ原子の個数、位置が電流-電圧特性に与える影響を弾性散乱グリーン関数理論と密度汎関数理論により明らかにした。また、これらの置換様式が電流-電圧特性に影響を与える機構について、分子軌道に基づいて議論した。



Reference:

1) X. Y. Wang, J. Y. Wang, J. Pei, *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 3528 – 3539.