

単一分子架橋系の交流応答特性の NEGF-DFT 計算

NEGF - DFT calculation for the property of AC response of single molecular bridging system

東大工 °川尻 雄基, 平井 大介¹, 笹岡 健二², 俵 有央, 渡邊 聡

¹現所属: 東大理 ²現所属: 神戸大自然科学系先端融合研究環

Dept. Eng., Univ. Tokyo °Yuki Kawashiri, Daisuke Hirai¹, Kenji Sasaoka², Arihiro Tawara, Satoshi Watanabe

¹Present Address: Dept. Phys., Univ. Tokyo ²Present Adress: Kobe Univ.

E-mail: kawasiri@cello.t.u-tokyo.ac.jp

半導体素子に代わる次世代電子素子の可能性の一つとして、有機単分子で素子を構成する単分子エレクトロニクスが注目されている。単分子エレクトロニクスの可能性を探索するため、これまで電極間単分子架橋の直流伝導特性の研究が数多くなされてきた。しかし、デバイスへの応用を考える上で重要なナノスケール伝導における交流応答特性の理解はまだ乏しい。単分子架橋系の交流応答特性の実験 [1] も近年報告されているが、架橋分子固有の特性を検出するには至っていない。そこで、本研究では、金属電極間分子架橋系の交流伝導特性を第一原理計算で明らかにし、その基礎的な理解を深め、応用の可能性を探ることを目的とする。

本研究では、Wide - Band Limit 近似の下で密度汎関数法 (DFT) と非平衡グリーン関数法 (NEGF) を組み合わせた NEGF - DFT 計算 [2] によって、1次元鎖でモデル化した金電極間にベンゼンジチオール分子を架橋させた系の交流応答特性を解析した。交流電圧を印加した回路において、電流と電圧の比を表すアドミッタンス

Y は線形応答近似の下で $Y \simeq G_{DC} + iE\hbar\omega$ (G_{DC} , E , ω はそれぞれ直流コンダクタンス, エミッタンス, 交流電圧の周波数) と記述することができる。そこで、エミッタンスの振る舞いに注目して解析を行った。

図に、エミッタンスおよび分子と電極表面部分から構成される散乱領域の状態密度の計算結果を示す。この図から、状態密度のピークとエミッタンスのピーク (図(a)), ディップ (図(b)) がよく対応していることが分かる。一方で、密接な関係があると思われる直流コンダクタンスとエミッタンスの間にはこのような直接的な対応関係は見られなかった。より詳しい解析から状態密度とエミッタンスの対応関係は、系の伝導度から理解できることが明らかになった。

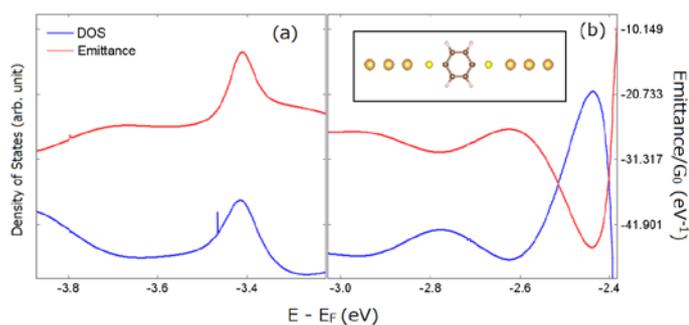


図 エミッタンス(赤)と散乱領域の状態密度(青線)の入射エネルギー依存性。挿入図は計算モデル。

[1] K. Yamauchi et al., Appl. Phys. Lett. **101**, 253510 (2012).

[2] D. Hirai et al., J. Appl. Phys. **115**, 174321 (2014).