

数値シミュレーションによる共役分子接合の電気伝導特性評価： アンカー基及び分子ねじれの効果

Numerical Simulation of Electrical Conduction Properties of Conjugated Molecular Junctions: Effect of Anchoring Groups and Molecular Torsion

大阪府大工¹, 大阪府大 分子エレクトロニックデバイス研²

○寺尾 俊彦¹, 永瀬 隆^{1,2}, 小林 隆史^{1,2}, 内藤 裕義^{1,2}

Osaka Pref. Univ.¹, RIMED² ○T. Terao¹, T. Nagase^{1,2}, T. Kobayashi^{1,2}, H. Naito^{1,2}

E-mail: terao@pe.osakafu-u.ac.jp

1. はじめに 近年、破断接合法の活用によって、金属-単一分子-金属接合からなる単一分子接合の電気伝導度やその分子構造との相関が明らかにされつつある。特に、共役分子のねじれ角 [1] や金属電極へのアンカー基 [2,3] が電気伝導特性を大きく変化させることが明らかにされており、分子接合デバイスの新たな機能性の発現が期待できる。本研究では、典型的な共役分子ワイヤーであるフェニレン分子のアンカー基及びねじれ角の電気伝導特性への影響を数値シミュレーションにより検討し、アンカーとしてシアノ基を導入したターフェニル分子接合において負性抵抗特性が観測されることが分かったので報告する。

2. 方法 単一分子伝導の数値シミュレーションは Atomistix ToolKit (QuantumWise) を用いて行った。ターフェニル分子のパラ位にシアノ基を導入し、金原子で構成された電極ギャップ間に配置させた (図 1)。計算手法には、非平衡グリーン関数 (NEGF: Non-Equilibrium Green's Function) と密度汎関数法 (DFT: Density Functional Theory) に基づく第一原理計算を用いた。各印加電圧に対する電子透過スペクトルを算出し、Landauer-Büttiker の公式からトンネル伝導による電流-電圧 (I - V) 特性を計算した。この際、ターフェニル分子中央のベンゼン環のねじれ角を変化させ、分子ねじれに対する影響を調べた。

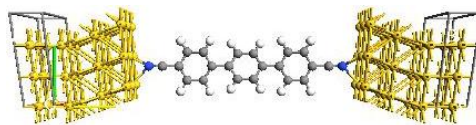


Fig. 1. Structure of Au-terphenyldicyano-Au junction used in the simulation.

3. 結果及び考察 図 2(a)及び 2(b)に、ねじれ角を変化させた際の透過スペクトル及び I - V 特性をそれぞれ示す。アンカーとしてチオール基を導入したターフェニル分子では HOMO を介したホールトンネル伝導が主に観測されるが、強いアクセプタ性を有するシアノ基を導入することで分子軌道がエネルギーシフトし、LUMO を介した電子トンネル伝導が主となることが分かった。図 2(b)より、ねじれ角を安定化構造 (約 30°) から増加させることで、電流が減少するものの負性抵抗が増大することが明らかとなった。これは、図 2(a)に示す様にねじれ角の増加によって LUMO 側の透過率のピークが大幅に変化することに起因しており、透過スペクトルを反映した電子伝導が行われるためであると考えられる。当日は非対称なアンカー基を有する分子接合デバイスの特性についても報告する予定である。

参考文献 [1] L. Venkataraman *et al.*, Nature **442**, 904 (2006). [2] M. Kiguchi *et al.*, Appl. Phys. Lett. **89**, 213104 (2006). [3] W. Hong *et al.*, J. Am. Chem. Soc., **134**, 2292 (2012).

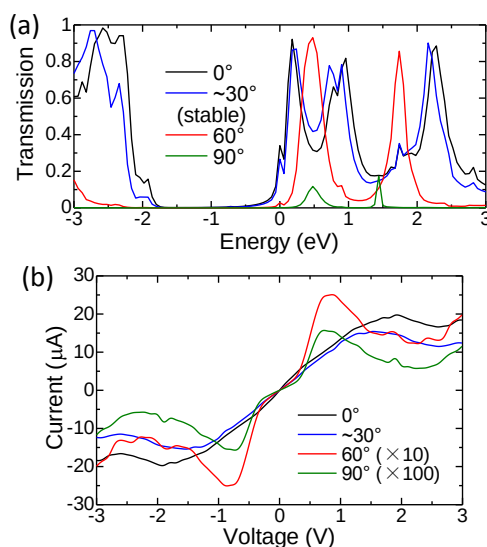


Fig. 2. (a) Transmission spectra and (b) current-voltage characteristics of molecular junctions based on terphenyldicyano with different torsion angles.