

π 共役面の直交を利用した単分子共鳴トンネルダイオード

Single molecular resonant tunneling diode based on orthogonal π-conjugated planes

○大戸達彦¹, Murni Handayani², 田中啓文³, 山田亮¹, 小川琢治², 夢田博一¹
(1,阪大院基礎工 2,阪大院理 3,九工大院)

○T. Ohto¹, M. Handayani², H. Tanaka³, R. Yamada¹, T. Ogawa², and H. Tada¹
(1. Σ -Osaka Univ. 2. Dept. Sci. Osaka Univ. 3. Kyushu Inst.)

E-mail: ohto@molelectronics.jp

Aviram-Ratner による提案[1]以来、分子ダイオードの分子構造とその整流のメカニズムは盛んに研究されてきた。しかし、これまで提案されてきた分子ダイオードは、電極との非対称カップリングやドナー・アクセプター構造を利用してきたが、その整流比は通常は 10 を下回るものであった。本研究では、π 共役面を直交させて分子軌道を分断し、電界によるエネルギーシフトに起因した共鳴効果を利用する分子ダイオードの理論計算と電流・電圧特性の測定を行った。これまでもスペーサーで分断された 2 つの分子軌道による単分子共鳴トンネルダイオードは提唱されていたが[2]、3 つの分子軌道を用いた単分子共鳴トンネルダイオードは初めてである。

図(a)に示す、亜鉛ポルフィリン、イミド、ベンゼンの連結させた分子では、イミドが他の π 共役環と直交するため、図(b)のように 3 つの部位に局在化した分子軌道が生成する。非平衡グリーン関数法を用いた計算により、これらの分子軌道は電界によってエネルギーシフトを起こし、ある電圧で共鳴を起こすことが明らかになった。実際にこの分子の電流・電圧曲線を Mechanically Controllable Break Junction (MCBJ) 法によって測定したところ、図(c)に示すように整流特性が得られ、急峻な電圧の立ち上がりによる高い整流比が得られた。整流比は理論計算で~96、測定で~14 が達成された。理論計算での整流比の過大評価は、密度汎関数法によってポルフィリン部位の軌道をフェルミ準位近く見積もってしまうことに由来すると考えられる。以上の結果は、π 共役の切断を用いることによって高い整流比を持つ分子ダイオードの設計が可能であることを示している。

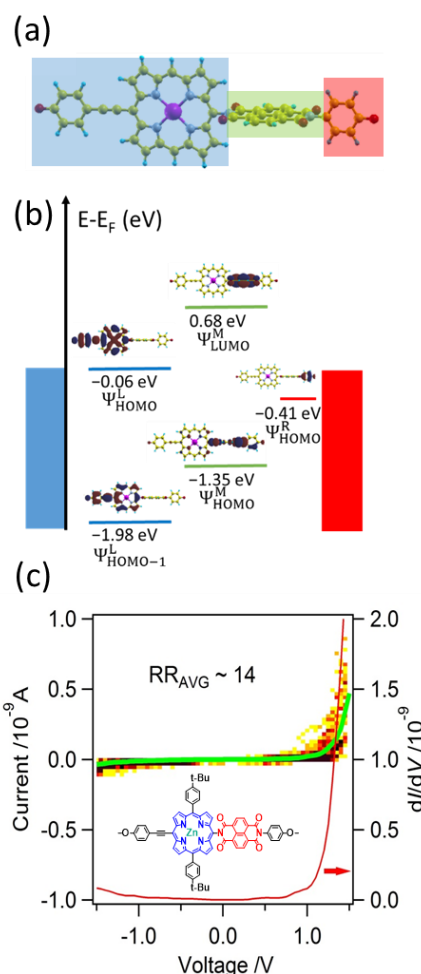


図 (a)ダイオード分子の構造。(b)分子軌道準位のアラインメント。(c)MCBJ 法による電流・電圧測定の結果。

謝辞 この研究は科研費新学術領域研究「分子アーキテクニクス」の助成により行われた。

[1] A. Aviram and M. Ratner, Chem. Phys. Lett. (1974) **29**, 277-283.

[2] M. Perrin et al, J. Phys. Chem. C (2015) **119**, 5697-5702.