

電圧による軌道変形を用いた単分子ダイオードの整流比の理論予測

Theoretical approach to improve rectification ratio of single-molecule diode based on voltage-dependent deformation of molecular orbitals

¹ 阪大院基礎工

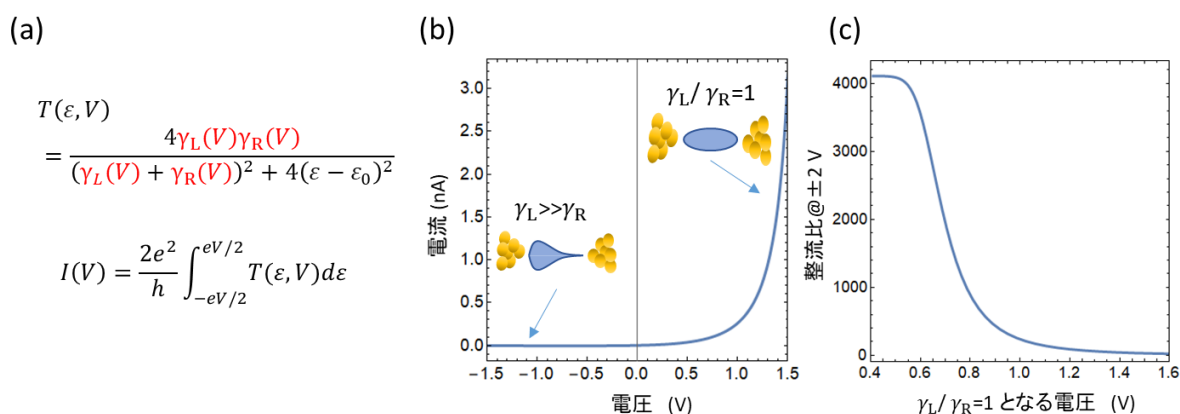
○大戸達彦¹、山田亮¹、茅田博一¹

¹ Σ-Osaka Univ, ○Tatsuhiko Ohto¹, Ryo Yamada¹, and Hirokazu Tada¹

E-mail: ohto@molelectronics.jp

高い整流比を持つ単分子ダイオードの設計のため、整流比の理論的な予測を行った。これまで、単分子の非線形な電流・電圧特性を予測するためのモデルは分子軌道準位 ε_0 の電圧依存性を考慮しており、それによって予測される整流比は数十程度であった[1]。しかし近年、単分子に電圧を印加してエネルギー準位ではなく左右の電極とのカップリング γ_L 、 γ_R 変化させることで整流特性を生み出すことが提唱された [2]。そのような機構に従った単分子ダイオードを理論的に設計するためには、カップリングの電圧依存性を取り込んだ理論モデルの開発が必要である。

本研究では、カップリングの電圧依存性を取り入れたトンネル伝導モデルを開発し、単分子の整流比の予測を行った。このモデルでは図(b)に示すような整流特性が見られ、さらに左右の電極とのカップリング比が1となる電圧を変えることによって整流比は 10^3 のオーダーになりうる。分子の双極子モーメントを大きくし、小さな電圧で軌道変形させることで、整流比を向上させる可能性を見出すことができた。



図：(a)透過関数 T と電流 I の理論式。カップリング γ の電圧依存性を新たに導入した。

(b)電流・電圧曲線。分子軌道（青）分布が対称になると電流が増大する。

(c)左右の電極とのカップリング比が1となる電圧を操作した場合の整流比。

[1] G. Zhang, M. A. Ratner, and M. G. Reuter, *J. Phys. Chem. C* **119** (2015) 6254.

[2] R. Yamada, K. Albrecht, T. Ohto et al., *Nanoscale* **10** (2018) 19818.