

単分子スイッチング素子の設計に向けたパドルホイール型二核錯体の単分子電気伝導性に関する理論研究

(阪大院基礎工¹・阪大基礎工²・阪大 QIQB³・阪大 RCSEC⁴・阪大 CSRN⁵・阪大 ICS⁶)
 ○甘水 君佳¹・佐々木 啓介²・長 奎吾¹・上村 泰吾¹・林 優太²・津田 雅大²・岸
 亮平^{1,3,4}・北河 康隆^{1,3,4,5}・中野 雅由^{1,3,4,5,6}

Theoretical study on single-molecule electron conductivity of paddle-wheel type binuclear complexes for design of single-molecule switching devices (¹Graduate School of Engineering Science, Osaka Univ., ²Department of Engineering Science, Osaka Univ., ³QIQB, Osaka Univ., ⁴RCSEC, Osaka Univ., ⁵CSRN, Osaka Univ., ⁶ICS, Osaka Univ.) ○Naoka Amamizu,¹ Keisuke Sasaki,² Keigo Cho,¹ Taigo Kamimura,¹ Yuta Hayashi,² Masahiro Tsuda,² Ryohei Kishi,^{1,3,4} Yasutaka Kitagawa,^{1,3,4,5} Masayoshi Nakano^{1,3,4,5,6}

The difference in the electron conductivities between antiferromagnetic (AFM) and ferromagnetic (FM) states on the paddlewheel-type binuclear complexes is investigated to obtain a design guideline for single-molecule switches by using the elastic scattering Green's function method and density functional theory. When the metal ions are Cr(II)s, the calculated conductivities of the FM states are higher than those of the AFM states, because the orbital interaction between the complex and electrodes are stronger on the FM states in comparison with on the AFM states. This result indicates a possibility of the molecular switch based on the spin state of the Cr(II) ions. It is also found that introduction of the substituents on the ligands changes the conductivity.

Keywords :Molecular Electronics, Paddle-Wheel Type Metal Complex, Single-Molecule Switch, Elastic Scattering Green's Function, Density Functional Theory

集積回路の微細加工技術の発展により、現在では 10 nm スケールのトランジスタが作成されている¹⁾。一方で微細化の限界が予測されたことから、素子としての機能を有する単分子の設計・合成を行う分子エレクトロニクスと呼ばれる分野の研究が盛んに行われている。当グループでは Extended Metal Atom Chains (EMACs) と呼ばれる金属錯体に注目し、一部の系では金属イオンのスピン状態を磁場などにより変化させることで電流の on/off をスイッチングできる可能性があることを明らかにしている²⁾。本研究では EMACs の最小モデルとしてベンゼート架橋二核金属錯体(Fig.1)に着目し、その伝導性、分子構造、電子状態の相関を密度汎関数理論 (DFT)法と弾性散乱グリーン関数(ESGF)法に基づき計算した。計算結果の詳細は当日報告する。

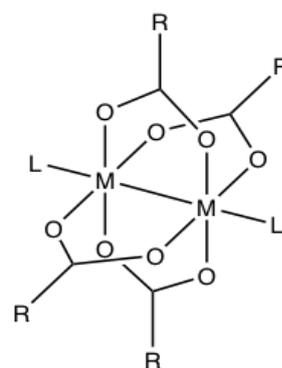


Fig.1 モデル分子の基本骨格

1) Mark T. Bohr et al. *IEEE computer society*, **37**, 20 (2017).

2) Y. Kitagawa et al., *molecules*, **24**, 1956 (2019).