

(九大先導研) ○野崎大二郎、ギラード・イヴァン、吉澤一成

【序論】近年、個々の分子にデバイスとしての役割を持たせ、集積回路の実現を目指す分子エレクトロニクスの研究が実験、理論の両面で幅広く展開されている。分子エレクトロニクスの発展のためにはまず、個々の分子デバイスが持つ電流電圧特性や輸送特性などの物性とそれに影響を及ぼす因子との関係を明らかにしなくてはならない。本研究では、それらの中から分子の伝導度が分子長、電子構造、分子の構造にどのように依存するかについて、ランダウアモデルを D'amato-Pastawski モデルで補正したモデルを用いて検討した。

【方法論】本研究では、下図に示すような tight-binding モデルを用いて系を記述した。系は分子領域、電極領域、仮想電子溜めと分子を結ぶ Büttiker プローブからなる。本研究では分子領域固有の性質に着目しているため、電極領域は、Newns-Anderson 法で簡略化した。伝導電子の分子内部での弾性衝突を記述するために Büttiker プローブを導入し、コヒーレントな伝導とインコヒーレントな伝導の記述を可能にしている。尚、本研究では、非バイアス下での平衡状態の伝導の議論に限定している。これらの設定のもと、電気伝導の分子構造依存性、電子構造依存性、分子長依存性について検討した。

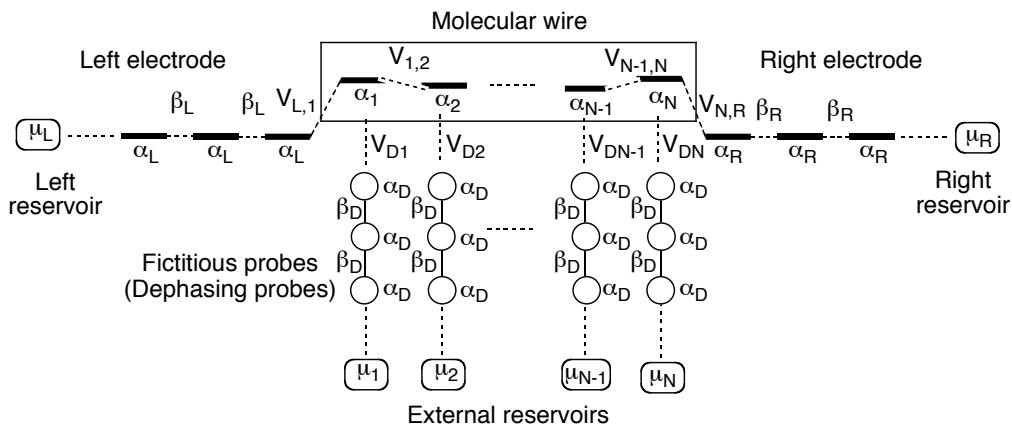


図1 本研究で用いた系の Tight-binding 図

【設定】本研究では、図2に示す(a)ポリアセチレン(但し、炭素が偶数個)、(b)ポリアセチレン(炭素が奇数個)(c)ポリフェニルアセチレンオリゴマーの3つの種類の分子ジャンクションをモデリングし、構造最適化の後に、(1)電子が分子ジャンクションを通り抜けるコヒーレントな透過確率、(2)分子ジャンクションの状態密度、(3)フェルミ

準位より入射された電子のインコヒーレントな散乱も含めた電気伝導の距離依存性について検討した。

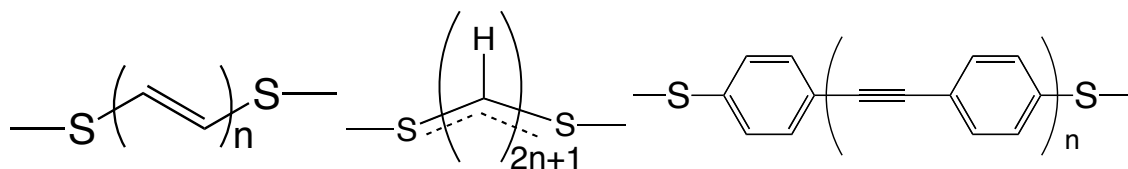


図2 本研究で用いた分子ワイヤー

【結果】図3(a)に、図2(c)からなる分子ジャンクションの(a)入射エネルギーに対するコヒーレント伝導の透過確率のプロットを示す。分子ジャンクションが長くなるにつれ伝導帯と価電帯の間で電子の透過確率が大きく減少し、分子長に対して指数関数的にしていることがわかる。図3(b)に、フェルミ準位を価電帯と伝導体の中央に置いた場合の、フェルミ準位でのインコヒーレント伝導(点線)とコヒーレント伝導(実線)を分子ジャンクションの長さに対してプロットしたものを示す。図3(b)ではインコヒーレント伝導(点線)は摂動の強さを変えていくつかプロットしてある。インコヒーレント伝導はコヒーレント伝導と違った分子長依存性を示し、ある長さになるとコヒーレント伝導を上回る事がわかる。これより分子ジャンクションにおいても、酵素やDNAで起こる光電子移動反応の様に、距離に対して指数関数的に減衰するトンネリング伝導からホッピング伝導へと、伝導機構が遷移する様子を理論的に示すことができた。

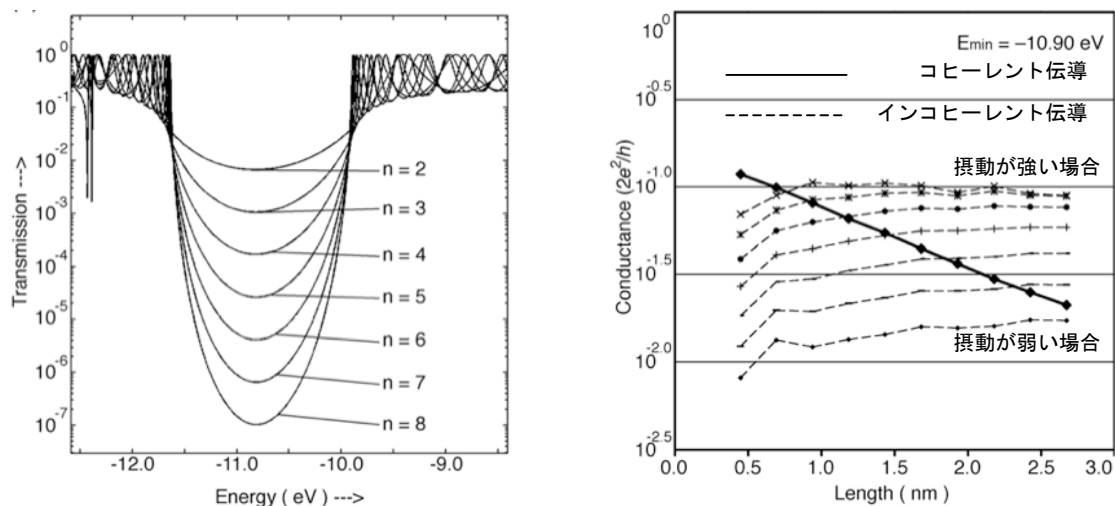


図3 (a)分子ワイヤーのコヒーレント伝導の透過確率と(b)フェルミ準位における、インコヒーレント伝導も包括した電気伝導の分子長依存性

【参考文献】

- (1) J. L. D'amato and H. M. Pastawski, Phys. Rev. B **41**, 7411 (1990).
- (2) H. M. Pastawski, L. E. F. Foa Torres, and E. Medina, Chem. Phys. **281**, 257 (2002).