

4P117

## 低分子の電気伝導特性に関する理論的研究

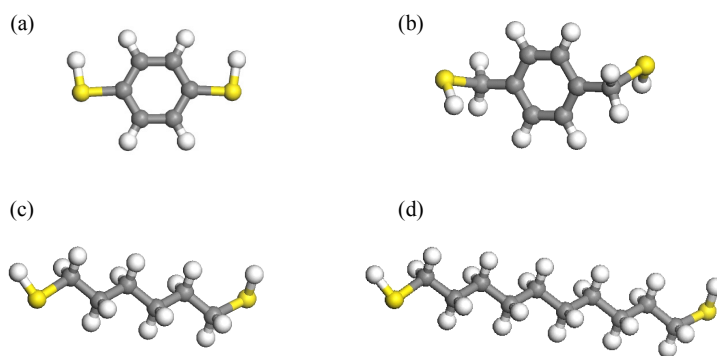
(豊橋技術科学大学<sup>1</sup>、プエルトリコ大学<sup>2</sup>)

○浜田勝光<sup>1</sup>、福岡昭一<sup>1</sup>、干場靖浩<sup>1</sup>、前田躍<sup>1</sup>、塚本貴志<sup>1</sup>、Ishikawa Yasuyuki<sup>2</sup>、栗田典之<sup>1</sup>

### 【はじめに】

現在様々な電子機器に利用されている半導体素子の更なる微細化、高密度集積化には、限界が見え始めている。そこで、ナノサイズの単一分子を構成要素とし、それらを組み合わせ、ナノサイズの電子デバイスを作成する研究が進められている。電子デバイスを作る際、その構成要素の電気伝導特性を前もって把握することは重要なことである。

走査トンネル分光法を用いた実験[1,2]により、Fig. 1 に示すベンゼンジチール(BDT)、ベンゼンジメタンチオール(BDMT)、ヘキサンジチオール(HDT)、及びオクタンジチオール(ODT)などの単一分子の電気伝導特性が解析された。一方、分子中の電気伝導は、非平衡な状態で起こる現象であり、その機構及び特性を理論的に扱うことは難しい。特に、低分子やDNA 二重鎖程度のサイズの系、いわゆるメゾスコピック系においては、電気伝導に量子力学的な特性が現れ、オームの法則のような古典的な理論が局所的には成立しなくなる。このようなメゾスコピック系において、電気伝導に関する物理量を求める新たな理論として量子輸送理論が提唱されている[3]。本研究では、金電極間に挟んだ低分子の安定構造と電子状態を、密度汎関数 (DFT) 法により計算し、その結果を基に、量子輸送理論を用いて、低分子の電気伝導特性を解析した。



**Fig. 1 (a) Benzendithiol (BDT), (b) benzendimethanethiol (BDMT), (c) hexanedithiol (HDT) and (d) octanedithiol (ODT). Their electrical conductivities were measured by experiments [1,2].**

### 【低分子と金電極の安定構造】

まず、Fig. 1 に示す 4 種類の低分子の構造を、DFT 法を用いて真空中で最適化した。その際、DFT 法の汎関数には GGA の PBE、基底関数には DNP を用いた。金電極のモデルとして、Au(111)表面の構造から 44 個の金原子を切り出した構造を用い、Fig. 2 に示すように低

分子の両端に接続した。低分子と電極間の最適な距離を決めるため、電極間距離を  $0.2 \text{ \AA}$  刻みで変化させ、その距離を固定し、低分子とその両端に結合した 2 個の Au 原子の構造のみを最適化し、それらの最適化構造のエネルギーを比較し、最安定な電極間距離と低分子の構造を決定した。Fig. 2(a) に示す BDT に関しては、Au 電極間の距離が  $14.0 \text{ \AA}$  の時、電極と BDT の結合が最大になる。

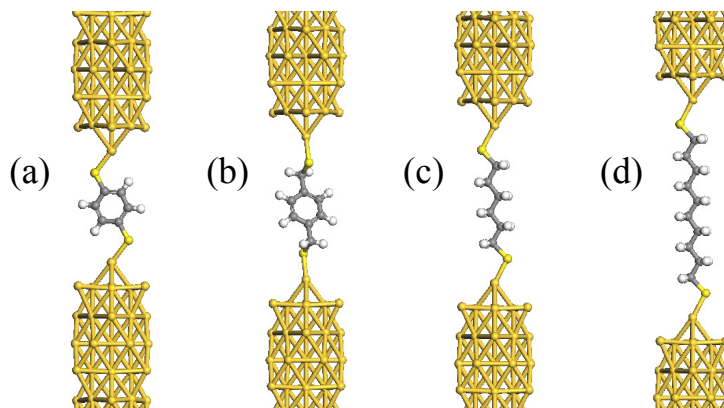


Fig. 2 Structures of (a) BDT, (b) BDMT, (c) HDT and (d) ODT + Au electrodes

### 【低分子の電子状態と電気伝導特性】

Fig. 2(a) の BDT+Au-electrode の最適化構造に対し DFT 計算を実行し、得られたハミルトニアンを基に、非平衡 Green 関数を作成[4]し、金電極で挟んだ低分子の電気伝導特性を解析した。Figs. 3、4 に、電子の透過関数、及び電流-電圧曲線を示す。Au 電極のフェルミレベルは、 $-2.4 \text{ eV}$  であり、この近傍で透過率が大きく減少している。また、 $2 \text{ V}$  の電圧での電流値は、約  $0.07 \text{ nA}$  であり、BDT の電気伝導性は低いことが明らかになった。Fig. 1 に示す低分子の電気伝導特性は、当日のポスターにて発表する。

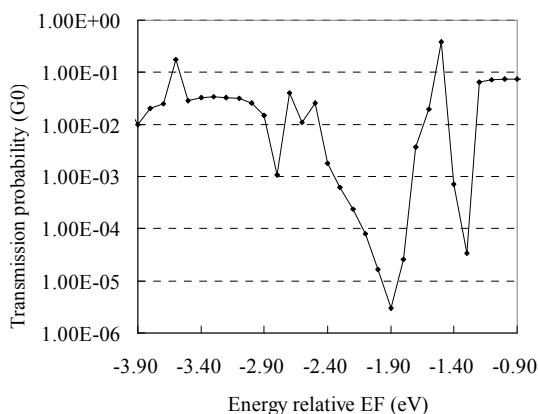


Fig. 3 Transmission probability for BDT

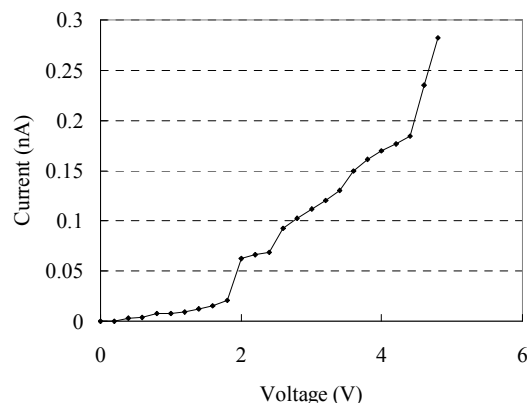


Fig. 4 I-V curve for BDT

### 【参考文献】

- [1] X. Xiao, et al. *Nano Letters*, **2004**, 4, 267. [2] S. Y. Jang, et al. *Nano Letters*, **2006**, 6, 2362.  
 [3] M. Büttiker, et al. *Phys.Rev.* **1985**, B31, 6207. [4] V. Meunier, et al. *J. Chem. Phys.* **2005**, 123, 024705.