

分枝型化合物の電気伝導計算

(豊橋技科大院¹、ORLN²) 仙石 康雄¹、谷林 慧¹、宮原 忍¹、 Vincent Meunier²、
関野 秀男¹

【背景と目的】

近年、ナノチューブや DNA などの新規材料の伝導性に対する関心が高まっている。これらの物質は、古くから導体として扱われてきたものではない。最近その伝導性が研究された結果、現在では本来分子が持つ特性を応用したナノデバイスへの発展が期待されている。これまでこのような研究で扱われてきた伝導分子は、直鎖状のものが殆どである。

本研究では、科学的興味から分枝型の化合物に注目した。櫛形ポリマーや星型ポリマー等、枝分かれした構造を持つ分子は数多く存在しており、その中でも、近年注目されている分子として dendrimer がある。Dendrimer は 1 分子に多くの機能を持たせることができるという特異な構造的特徴を持っており、医学・生物学的な利用が期待されている。また、これに加えて枝分子による光捕集機能が知られている。

例えば、コア部分にペリレンを持つナノスター dendrimer (図 1) がある。このコア部分のペリレンは、紫外線による光励起反応において、長い枝葉部分を持たない通常のペリレン分子と比べて約 400 倍の発光強度を示すことが実験で報告されている^[1]。このことから、枝からコアへの電子の移動が予測できる。本研究では、このような分枝型化合物の電気伝導特性を計算し、全く新しい伝導分子の可能性を模索する。

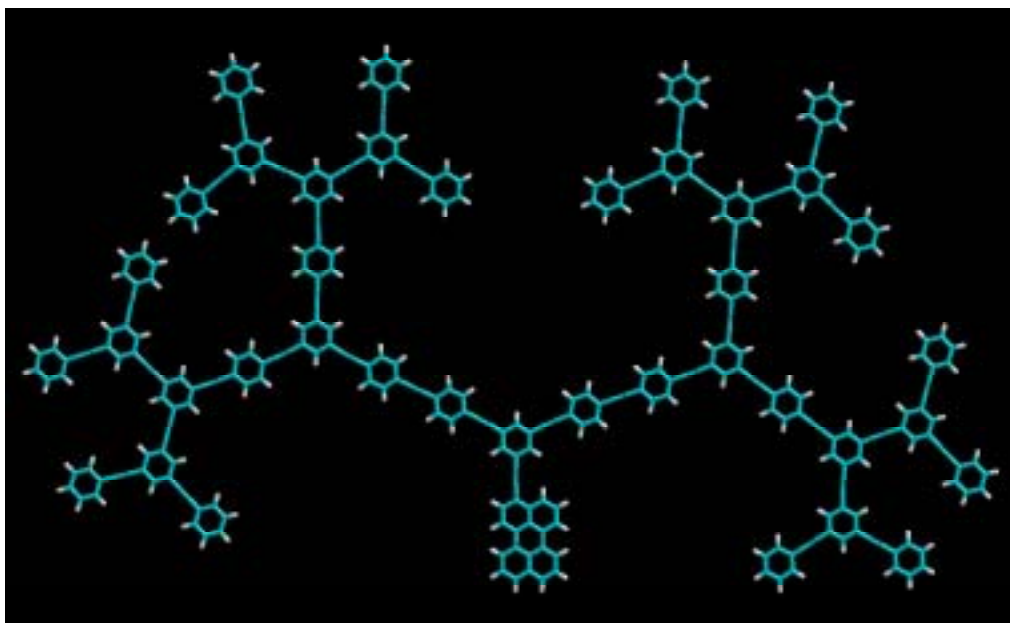


図 1：ナノスター dendrimer

【研究内容】

本研究では、分枝状化合物の例として先に挙げたナノスターデンドリマーに対して、世代毎の枝-コア間または枝-枝間の伝導度の計算を行う。

Conductor と L1(R1)をユニットセルにもつ半無限電極で構成される系 (図 2) の電気伝導特性を、コヒーレント伝導を仮定して Landauer 公式^[2]を用いて求めた。

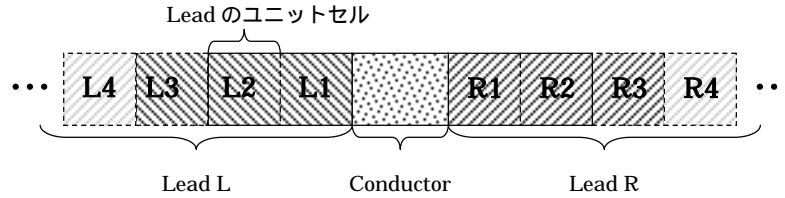


図 2 : 電極に繋がれた導体

透過関数の計算に必要な Conductor の Green 関数^[3]は、図 3 に示す領域のハミルトニアン及び重なり積分より求めた。実際の計算では、Lead L(R)に含まれるユニットセルの数は有限にせざるを得ない。そこで、次の二式を用い Q_c が一定になるまで layer の数 (n_{layer}) を増やした。これにより、実効的に半無限電極と見なしうる Lead に繋がれた Conductor のシミュレーションを行うことができる。

$$D_c(E) = \frac{-1}{\pi} \Im [G_{cc} S_{cc} + \sum_{i_j=1}^{n_{layer}} \sum_k G_{i_j k} S_{k i_j} - n_{layer} D_{left}(E) + \sum_{i_r=1}^{n_{layer}} \sum_k G_{i_r k} S_{k i_r} - n_{layer} D_{right}(E)]$$

$$\int_{-\infty}^{E_F} D_c(E) = Q_c$$

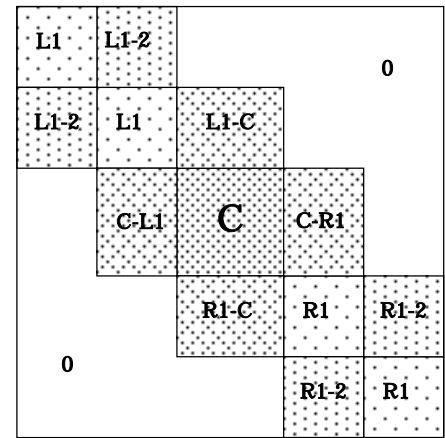


図 3: ハミルトニアン及び重なり積分の領域

計算に必要なハミルトニアン及び重なり積分は、YAcHMOP^[4]プログラムを用いて拡張ヒュッケルレベルで求めた。詳細は当日報告する。

1. Shortreed M. R., Swallen S. F., Shi Z.-Y., Tan W., Xu Z., Moore J. S., Kopelman R., *J. Phys. Chem. B*, 1997, 101, 6318
2. Landauer R., *Philos. Mag.*, 1970, 21, 1397
3. Datta S., *Electronic "Transport in Mesoscopic Systems"*, Cambridge studies in semiconductor physics and microelectronic engineering
4. Hoffmann R., *J. Chem. Phys.*, 1963, 39, 1397