

オリゴチオフエンならびにオリゴインの単分子電気伝導における 非弾性散乱

○志津 功将¹、佐藤 徹^{1,2}、田中 一義^{1,3}

¹ 京都大学大学院工学研究科(〒615-8510 京都府京都市西京区京都大学桂)

² 京都大学福井謙一記念研究センター(〒606-8103 京都府京都市左京区高野西開町 34-4)

³ 科学技術振興機構、戦略的創造研究推進事業 (JST-CREST)

【緒言】

電子が単一分子中を流れるとき、電子は分子の固有な振動と相互作用し非弾性散乱を受けると考えられる。非弾性散乱は電気伝導度を低下させ、伝導電子のエネルギーの損失を引き起こし、ジュール熱を発生させる。したがって、非弾性散乱過程を理論的に解析することは、単分子デバイスを構成する分子種の選択にあたって重要な意味を持つ。本研究では、金電極の間にオリゴチオフエン (1~3 量体) およびオリゴイン (1~5 量体) を挟んだ架橋分子ワイヤー系について電気伝導特性における非弾性散乱の影響を解析し、比較した。

【方法】

電極を金原子の半無限次元鎖とし、その表面グリーン関数を tight-binding モデルに基づいて計算した。オリゴチオフエンおよびオリゴインの両末端の水素原子を-S-Au に置き換えた分子について振電相互作用定数を計算した。Hellmann-Feynman の定理を成立させるため、炭素、水素、およびイオウ原子の基底関数系として 6-31G にその一次微分を加えたものを、金原子の基底関数系として LANL2DZ を用いた。得られた振電相互作用定数を、電子輸送を記述できる非平衡グリーン関数法[1]に組み込むことで、架橋分子ワイヤー系の電流-電圧特性ならびに消費電力を計算した。さらに振電相互作用定数の大きさの違いを振電相互作用密度解析[2,3]に基づいて考察した。

【結果】

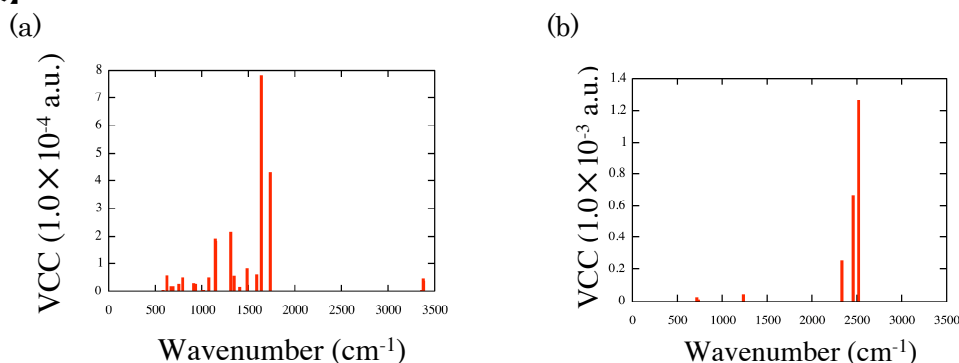


Fig. 1. (a)オリゴチオフエン 3 量体と(b)オリゴイン 5 量体の振電相互作用定数

Fig. 1 にオリゴチオフエン 3 量体とオリゴイン 5 量体のカチオンでの振電相互作用定数を示す。オリゴチオフエンとオリゴインの最も強いピークはそれぞれ、炭素-炭素二重結合の伸縮振動と炭素-炭素三重結合の伸縮振動に対応することが分かった。またオリゴインの振電相互作用定数はオリゴチオフエンのそれよりも 1.5 倍程度大きいことが分かった。これらは振電相互作用密度[2,3]を解析することで全て理解できる。本研究の結果、バイアス電圧が低い領域ではオリゴインの方がエネルギーの損失が小さく、逆にバイアス電圧が高い領域ではオリゴチオフエンの方が消費電力が小さくなることが分かった。電流-電圧特性は当日示す。

参考文献

[1] L. V. Keldysh, *Sov. Phys. JETP*, **20**, 1018 (1965).

[2] T. Sato *et al*, *J. Chem. Phys.* **124**, 024314 (2006).

[3] K. Tokunaga *et al*, *J. Chem. Phys.* **124**, 154303 (2006).