

ヘテロ原子置換が単分子電気伝導に与える影響に関する Lippmann-Schwinger 方程式に基づいた理論研究

(阪大院基礎工¹・阪大 QIQB²・阪大 RCSEC³・阪大 ICS-OTRI⁴・阪大 SRN-OTRI⁵)

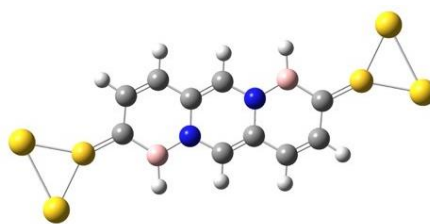
○西田光博¹・甘水君佳¹・岸亮平^{1,2,3,4}・北河康隆^{1,2,3,4,5}

Theoretical Study Using Lippmann-Schwinger Equation: Influence of Heteroatom Substitution on Single-Molecule Electrical Conductance (¹*Graduate School of Engineering Science, Osaka Univ.*, ²*QIQB, Osaka Univ.*, ³*RCSEC, Osaka Univ.*, ⁴*ICS-OTRI, Osaka Univ.*, ⁵*SRN-OTRI, Osaka Univ.*) ○ Mitsuhiro Nishida,¹ Naoka Amamizu,¹ Ryohei Kishi,^{1,2,3,4} Yasutaka Kitagawa^{1,2,3,4,5}

π -conjugated molecules are of great interest for organic electronics due to their interesting electrical properties. By controlling these properties through the heteroatom substitution, it is expected that new materials having properties suitable for specific purposes can be designed. For example, various BN-substituted polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) have been investigated. On the other hand, such heteroatom substitution has been mainly examined for the bulk property rather than the single-molecule conductivity. In addition, in molecular electronics, where single molecules are used as electronic components, electron scattering at the electrode-molecule-electrode junction is important for the electrical conduction. In this study, therefore, the effect of heteroatom substitution in PAHs on single-molecule electrical conduction was investigated based on the Lippmann-Schwinger equation from the perspective of applications in molecular electronics.

Keywords : heteroatom substitution; Lippmann-Schwinger equation; Density Functional Theory; real space grid; single-molecule electrical conduction

π 共役をもつ分子は、興味深い電気的性質を持ち、有機エレクトロニクス分野での応用のために大きな関心をもたれている。これらの分子の特性をヘテロ原子置換により制御することで、目的に応じた物性をもつ新規材料が設計出来ると期待されている。特に、BN 置換された様々な多環芳香族炭化水素(PAHs)が合成され、光物理的特性、酸化還元特性が調べられている¹⁾。一方で、 π 共役分子へのヘテロ原子置換はバルクでの利用を目指して行われることが多く、単分子の電気伝導への影響はあまり調べられていない。加えて、単分子をエレクトロニクス素子として用いる分子エレクトロニクスでは、電極-分子-電極接合における電子散乱が電気伝導の考察で重要となる。そこで、本研究では分子エレクトロニクスへの応用という観点から、PAHs におけるヘテロ原子置換が単分子電気伝導に与える影響を Lippmann-Schwinger 方程式²⁾に基づいて調べた。



1) X. Y. Wang, J. Y. Wang, J. Pei, *Chem. Eur. J.* **2015**, 21, 3528 – 3539.

2) Y. Egami et al., *Phys. Rev. E* **2015**, 92, 033301.