

単一分子架橋系の整流特性の第一原理計算による研究

First-principles study of rectification properties of a single molecule cross-linking system

神戸大工¹ °古島 弥来¹, 植本 光治¹, 小野 倫也¹

Kobe Univ.¹, °Miku Furushima¹, Mitsuharu Uemoto¹, Tomoya Ono¹

E-mail: furushima@eedept.kobe-u.ac.jp

〔背景〕 単一の分子を電子デバイスの素子として用いる技術、分子エレクトロニクスに近年注目が集まっている[1]。我々は図 1 に示されるような Si₂x₂ 骨格を持つπ共役系分子が電極間に架橋されている系について、整流効果やトランジスタ実現の可能性の研究に取り組んでいる[2]。

Si₂x₂-Bph-Bph 分子 (図 1) の架橋系は電氣的整流効果を示すことが Tsuchihata らによって示された[3]。左右対称な系は理論上整流効果を示さないため、整流性は何らかの非対称性に起因する。

我々は、左右の電極と分子の結合様式の違い (共有結合とファンデルワールス結合など) が電子状態の非対称性を生むことを理論計算により示した[4]。本研究では、電極に電圧を印加したときの伝導特性を密度汎函数理論ベース

の第一原理計算によって求め、整流効果の起源を解明することを目的とした。

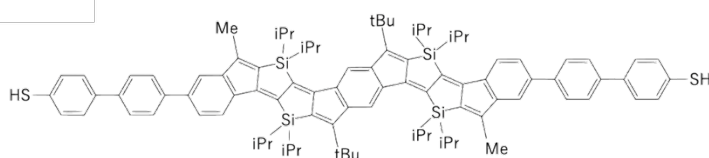


Fig. 1. A chemical formula of Si₂x₂-Bph-Bph molecule.

〔手法〕 Vienna *ab initio* simulation

package により、電極間の分子の左右非対称な準安定架橋構造を 2 種類求めた。次に、実空間差分法[5]によりそれらの電子状態と、電極間の電圧依存伝導特性を計算した。

〔結果〕 求めた 2 種類の準安定架橋構造は図 2 の通りとなった。一方は電極に対して垂直に、もう一方は斜めに架橋している。双方ともに片側で S 原子と Au 電極が共有結合し、もう片側では弱い結合を示した。電極間電圧依存の伝導特性を報告する。

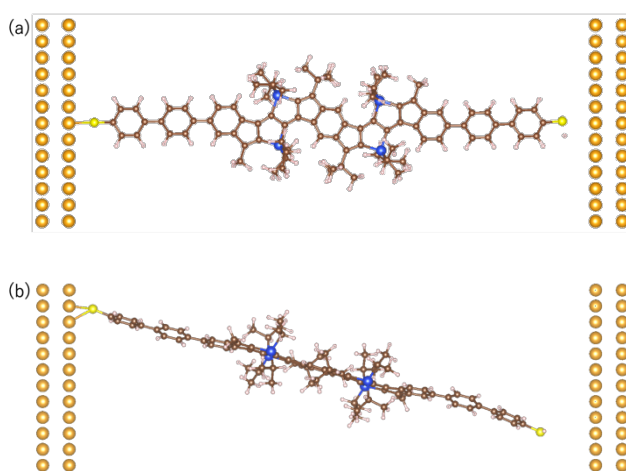


Fig. 2. Two kinds of semi-stable cross-linking system.

(a) A vertical system. (b) A diagonal system.

〔参考文献〕

- [1] Y. Liu, *et al.*, *Chem. Phys. Rev.* **2**, 021303 (2021). (2023).
 [2] D. Yin, *et al.*, *Adv. Electron. Mater.* 2400390 (2024).
 [3] 土畑瑛嗣ら、第 70 回応用物理学会春季学術講演会、上智大学四谷キャンパス、15p-B508-8 (1999).
 [4] 古島弥来ら、第 84 回応用物理学会秋季学術講演会、熊本城ホール、19p-D903-13 (2023).
 [5] T. Ono, K. Hirose, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5016 (1999).

〔謝辞〕 本研究は JST CREST (JPMJCR22B4) の支援を受けたものである。