

単一分子架橋系の有限温度効果の第一原理計算による研究

First-principles study of finite temperature effect 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]。我々はこれまで、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第一原理研究に取り組んできた[2]。

近年、我々は Si₂x₂ 骨格を持つ分子架橋系において分子軌道を介した共鳴トンネル効果による伝導性が生まれることを明らかにした[3]。これはすなわち、分子軌道の形状や分子軌道準位が重要な知見であるということを示している。

ところで、実デバイスの特性には温度が影響する。しかしながら第一原理計算によって温度の効果を取り込んで伝導特性を予想することは計算コストの観点から困難である。一方で、先述の共鳴トンネル効果の知見に基づけ

ば、分子軌道準位の温度依存性から定性的・半定量的な伝導特性の予想が可能となる。

本研究では密度汎関数法と分子動力学法により分子軌道の温度依存性を計算し、有限温度での分子架橋系の特性予測を試みた。

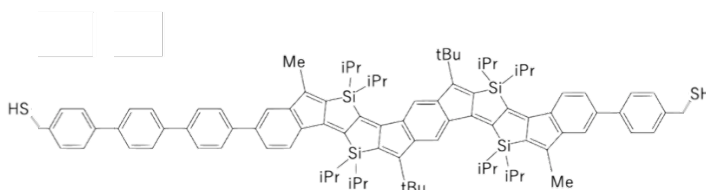


Fig. 1. A chemical formula of Si₂x₂ molecule.

〔手法〕 Vienna *ab initio* simulation package により、9, 30, 50 K の温度条件下で図1の分子の分子動力学計算を実行した。各タイムステップでの分子軌道準位を取得し、エネルギーの揺らぎを解析した。エネルギー準位の揺らぎ、構造、伝導特性の解析結果を当日報告する。

〔参考文献〕

- [1] Y. Liu, *et al.*, *Chem. Phys. Rev.* **2**, 021303 (2021). [3] M. Furushima, *et al.*, *New J. Chem.* **48**, 16008
[2] D. Yin, *et al.*, *Adv. Electron. Mater.* 2400390 (2024).
(2024).

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