

金電極間単分子架橋の交流応答の理論計算

Theoretical calculation of AC Response of single molecular bridge between Au electrodes

川尻 雄基、平井 大介¹、笹岡 健二²、俵 有央、渡邊 聡

Y. Kawashiri, D. Hirai¹, K. Sasaoka², A. Tawara, S. Watanabe

東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻

Department of Materials Engineering, The University of Tokyo, Hongo Tokyo 113-8656

¹現所属: 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻

¹Present Address: Department of Physics, The University of Tokyo, Hongo Tokyo 113-0033

²現所属: 神戸大学自然科学系先端融合研究環重点研究部

²Present Address: Core Research team, Organization of Advanced Science and Technology, Kobe University, Rokkoudai Kobe 657-8501

半導体素子に代わる次世代電子素子の可能性の一つとして、有機単分子で素子を構成する単分子エレクトロニクスが注目されている。単分子エレクトロニクスの実現に向けてこれまで電極間単分子架橋の直流伝導特性の理論計算と計測が数多くなされてきたが、デバイス応用を考える上で重要な交流応答特性への理解はまだ乏しいのが現状である。単分子架橋系の交流応答特性の実験も最近報告されているが、分子固有の特性を検出するまでには至っていない[1]。そこで本研究では、金属間単分子架橋系の交流応答への基礎的な理解を深めることを目的に、交流応答特性の第一原理計算を行った。

本研究では、密度汎関数法と非平衡グリーン関数法を組み合わせた手法[2]を用いて、1次元鎖でモデル化した金電極間にベンゼンジチオール分子が架橋した系の交流応答特性を計算した。交流回路における電流と電圧の比であるアドミッタンス Y は $\dot{Y} \approx G_{DC} + iE\hbar\omega$ (G_{DC} 、 E 、 ω はそれぞれ直流コンダクタンス、エミッタンス、交流電圧の周波数)と記述できるので、エミッタンスの振る舞いに注目した。図1に、エミッタンスおよび分子と電極表面部分から構成される散乱領域の状態密度の計算結果を示す。この図から、エミッタンスのピークおよびディップが状態密度のピークとよく対応していることがわかる。このような対応関係は、直流コンダクタンスと状態密度の間には見られなかった。

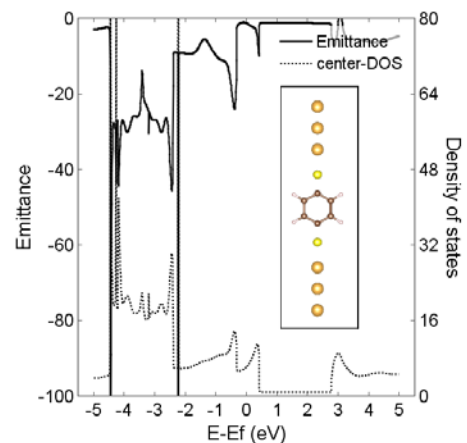


図1 エミッタンス(実線)と散乱領域の状態密度(点線)の入射エネルギー依存性。挿入図は計算モデル。

[1] K. Yamauchi et al., Appl. Phys. Lett. **101**, 253510 (2012)

[2] 平井大介、東京大学大学院工学系研究科博士論文 (2013)