

第一原理計算によるナノスケール分子のエネルギー変換と分子スイッチ  
Energy Conversion Process at Nano Scale Molecular Junction and Molecular Switch

中村恒夫

Hisao Nakamura

産業技術総合研究所ナノシステム研究部門

Nanosystem Research Institute (NRI), "RICS", AIST, Central 2, Umezono 1-1-1,  
Tsukuba, Ibaraki 305-8568

ナノ接合系でのエネルギー交換過程は、ナノエレクトロニクスや熱電変換デバイス、表面触媒、ナノ配線加工など、様々な現象・機能の基礎過程の一つである。この過程を理論シミュレーションから理解し、物質材料設計へと繋げていくためには、電気伝導、フォノンによる熱伝導や局所加熱、イオンに働く **current-induced force** などを **atomistic** に計算し、計算モデルを確立していく必要がある。

非平衡グリーン関数(NEGF)を密度汎関数法(DFT)に組み込む NEGF-DFT 法の発展とプログラムの整備が多くของกลุ่มによりなされ、市販コードの普及も併せて多様な分子接合系や分子膜、バルク接合材料に対し電流-電圧(IV)特性計算が手軽におこなわれるようになってきた。今回の研究発表では、第一原理電気伝導計算をもとに、エネルギー交換過程として、長距離伝導特性を持つナノスケール分子の熱起電力と熱電変換性能指数(ZT)計算と、STM 電流による表面吸着分子を利用した分子スイッチのダイナミクスについて、報告をする。

熱電変換では、昨年にナノシステム研究部門の実験研究グループとの共同でその長距離伝導特性を明らかにした、有機金属錯体分子ワイヤーについて、ZT に対する金属依存性や温度・長さ依存性を計算し、長距離伝導特性とフォノンの効果を併せて、熱電変換に対する「分子接合の」量子閉じ込め効果について議論する。

また、分子スイッチについては、銅基板上のメラミン分子の STM 電流によるスイッチングについて、その反応機構を **current-induced force** や非弾性電流の第一原理計算から特定し、得られたパラメータを使ってそのダイナミクスを考える。