

有機ナノ回線の可能性について

○林 浩三(豊橋技科大), 谷林 慧(一関高専, JST-CREST), 関野 秀男(豊橋技科大, JST-CREST)
kozo@theo.tutkie.tut.ac.jp

1.概要

現在, 分子トランジスタ等の分子素子を電氣的に結線するための, 連鎖重合反応を利用して形成されるナノワイヤが提唱されている^[1]. このナノワイヤは実験により伝導性があることが示されているが, 別方向からのアプローチとして, ジアセチレン化合物から形成されるナノワイヤの伝導度を理論的に計算することにより, 導線としての利用可能性を探った. その結果, 重合反応により伝導度が数桁上昇することが確認された.

しかし, 本研究で算定したコヒーレントな伝導は重合体の長さと共に急激に落ちてしまうため, インコヒーレントな伝導などの他の要因も含めて計算する必要があるといえる.

2.方法

伝導度の算定には種々の方法があるが, ここでは, 単分子コヒーレント伝導の理論算定に用いられるグリーン関数法を用いて計算する.

$T(E)$ が加電エネルギー E における透過率であり, ここから伝導度が求められる.

計算対象とするジアセチレン化合物分子は, 実際にはナノワイヤ部分の両側にアルキル鎖が結合している. 今回の計算では, 計算時間の短縮のため, このアルキル鎖との部分を水素原子に置き換えた簡単なモデルで計算を行った. このモデルは, HyperChem という分子モデル作成アプリケーションを利用して作成した. HyperChem で作成された対象分子を座標データとして保存し, Gaussian03(汎関数 RB3PW91/基底 LanL2DZ) の入力として構造最適化を行った.

グリーン関数法での計算に必要なハミルトニアン H , セルフエネルギー Σ の算定は Gaussian03(汎関数 RB3PW91/基底 CEP-31G) で行った.

3.結果・考察

上に示した方法を用いて, 重合前の分子, 重合後の分子の両方について, 重合度が 4, 8, 12, 16 の計 8 パターン計算を行った. 結果を図 1 に示す.

重合前の分子では, 重合度が 8 の時点で伝導度がほぼ 0 となっている. 重合度 12 以上では実際には微小な伝導度があるはずだが, プログラムの出力可能な最小量を下回ったため伝導度 0 となっている.

重合後の分子でも, 重合度が増えるに従って伝導度が低下する. しかし, 重合度 16 でも 1^{-6} 程度の伝導度を持っており, 重合前後では明らかに伝導度が上昇している.

得られた結果を見ると, 重合前後では伝導度の変化が見られ, 重合により伝導度が上昇することがわかる.

本研究が目的としているところは, このナノワイヤが分子素子を電氣的に接合しうるだけの伝導度を持っているかどうか調べる, ということである. 重合度 16 の重合後の分子を見ると, ナノワイヤの端から端までの距離はおよそ 8nm であった. ここで参考として, Au 原子を一本に繋いで作成した Au ワイヤの伝導度は, 1 に近い値をとることが知られている. それと比較して, 10nm に満たない距離で伝導度が 1^{-6} 程度まで下降してしまうのは, 導線としては低い伝導度であり, 実用的とはいえない.

グリーン関数法によって求められる伝導度はコヒーレントな伝導のみであるため, 本研究では考慮しなかったインコヒーレントな伝導機など, 他のメカニズムによる伝導の可能性を含めた, より現実的なシミュレーションが必要である.

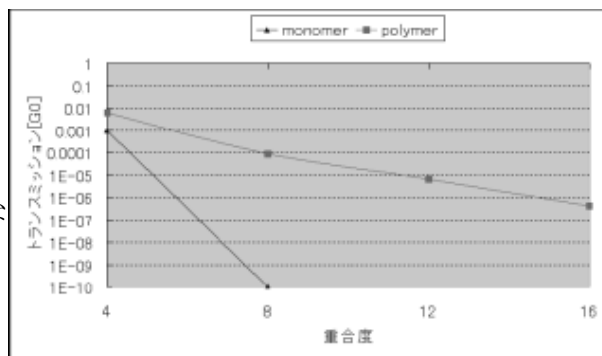


図 1 重合前後での伝導度の変化

参考文献

[1] Y. Okawa and M. Aono, RIKEN Review No. 37(2001) 3-6.