

演 題	ヘテロ原子を含むナノグラファイトシートの量子輸送過程	
発 表 者 (所 属)	多田朋史・吉澤一成 (九州大学有機化学基礎研究センター)	
連 絡 先	〒812-8581 福岡県福岡市東区箱崎 6-10-1 九州大学理学部 2 号館 2606 号室	
キ ー ワ ー ド	ランダウアモデル、コンダクタンス、ナノグラファイトシート	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	分子ワイヤーにおいて、分子のどのような部位にリード線を接触させれば効果的な量子輸送が期待できるのかを簡便に予測できる規則を見いだした。この規則をもとに、分子デバイスとして有効な分子ワイヤーを設計することを目的としている。	
環 境	適 応 機 種 名	Fortran 77 搭載機種
	O S 名	Linux
	ソ ー ス 言 語	Fortran 77
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い)	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 未定	具 体 的 方 法

1. 序 ナノテクノロジーにおける単一分子デバイスへの期待は非常に大きく、その量子輸送過程を把握し制御することは、有効なデバイス構築における重要な課題である。本研究ではナノサイズのグラファイト分子と金の導線からなる分子ワイヤー(図1)について、その量子輸送過程をランダウアモデルを用いて記述し、有効な量子輸送に必要な規則を導出する。また、ヘテロ原子を含んだグラファイト分子についても量子輸送過程についての計算を行い、ヘテロ原子の導入がコンダクタンスにどのような効果を及ぼすのかについても検討する。

2. 方法 以下に示すランダウアのコンダクタンスを用いて分子ワイヤーの量子輸送過程を考える[1-3]。

$$g_{ab}^{I} = \frac{2e^2}{h} \frac{(T_{ab}(E))^2}{2} G_{ba}^A(E) G_{ab}^R(E) \rho_{\alpha}(E) \rho_{\alpha'}(E) \quad (1)$$

式(1)は図1に示すような a, b の原子に導線を接触させた場合のコンダクタンスである。 β_T はグラファイト分子と導線との間の移動積分、 $G^{A/R}$ は系の先進(遅延)グリーン関数、 ρ はグラファイト分子と接触している金原子の局所状態密度である。

3. 結論 図1に示すような a, b, c, d, e, f の炭素原子の中から2原子を選び導線と接触させ、コンダクタンスを計算した。いくつかの接続パターンにおいてその透過係数 $T(E)$ を比較したものが図2である。式(1)によれば重要なのはフェルミエネルギー(E_F)における透過係数 $T(E_F)$ であり、それは接続の仕方に大きく依存していることが図2より分かる。透過係数の大小関係をまとめると、以下ようになる。

$$T_{ad} > T_{ac} > T_{ab} \gg T_{ae} = T_{af} \cong 0$$

この関係は式(2)に含まれるグリーン関数から定性的に導くことができ、分子軌道とコンダクタンスの関係を明らかにすることが出来た。それを二つの規則にまとめると次のようになる。(I) HOMO, LUMO において電子密度の高い原子と導線とを接触させた場合、高い量子輸送効果が期待できる。(II) 導線と接触させた2原子の HOMO 係数の積はその2原子の LUMO 係数の積と符号が異ならなければならない [2,3]。ナノグラファイト分子の HOMO と LUMO (図3) から、上記の規則がよく成り立っていることが分かる。この系においては、グラファイトの Zigzag edge に局在化している電子が高い量子輸送効果を担っている。

次に、ヘテロ原子を含んだナノグラファイト分子について計算を行った。その結果、ヘテロ原子は HOMO と LUMO における電子の局在化を促進し、高い量子輸送が期待できるという結果を得た。このような系においても、上記の規則が成り立っていることを確認した。透過係数に関する詳細なデータは当日報告する予定である。

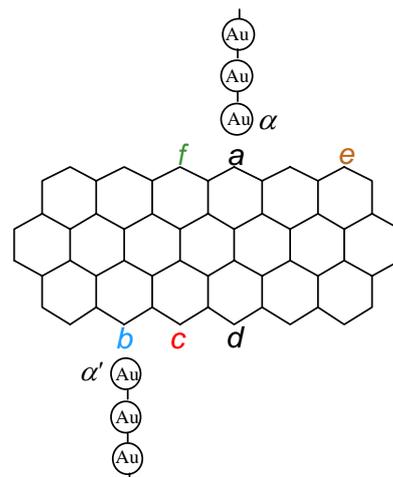


図1 ナノグラファイトシートと金の導線からなる分子ワイヤー。

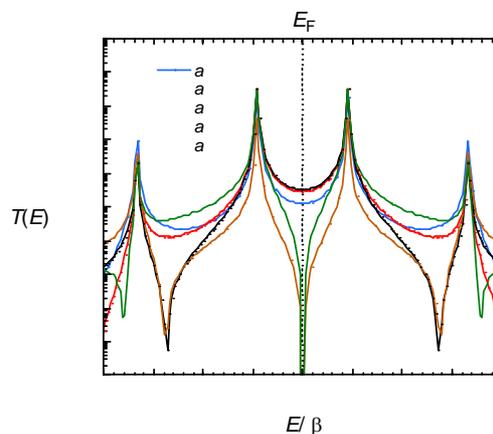


図2 いくつかの接続パターンにおいて得られた透過係数 $T(E)$ 。横軸はエネルギー。

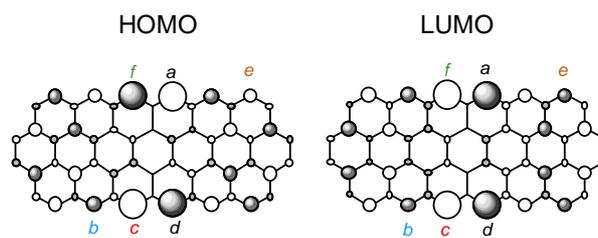


図3 ナノグラファイト分子のHOMOとLUMO

- [1] C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, *J. Phys. C* 4, 916 (1971).
- [2] T. Tada and K. Yoshizawa, *ChemPhysChem*, in press.
- [3] T. Tada and K. Yoshizawa, submitted for publication.