

光・電気・磁気機能性分子有機分子の分子軌道計算

Theoretical calculation of photo-, electro-, and magneto-functional organic systems

京都大学 大学院工学研究科 合成・生物化学専攻 松田 建児

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、有限長さのグラフェンナノリボンの電子輸送特性をラジカル間交換相互作用の視点から評価した。

グラフェンの部分構造であるアームチェア型グラフェンナノリボン (AGNRs) はその幅  $N$  が  $N = 3n-1$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) の場合に、 $N = 3n, 3n+1$  の場合と比較して顕著に小さなバンドギャップを示すと予測されている。本研究では AGNRs の単分子コンダクタンスの分子長依存性を評価することを目的とした。具体的には、電子の長距離輸送特性の指標となる  $G$  のワイヤ長  $l$  に対する減衰定数  $\beta_G$  の大きさが、両端に置換したスピン局在ラジカル間にはたらく交換相互作用  $J$  の減衰定数  $\beta_J$  と相関することに着目した。エッジ状態の影響をペリ縮環によって抑制したモデル分子 (図 1b) の両端にニトロニルニトロキシド (NN) を導入した系について、 $J$  のワイヤ長  $l$  に対する減衰定数  $\beta_J$  を非制限 DFT 法 (UB3LYP/6-31G\*) によって評価した。その結果、ワイヤ幅  $N = 3n, 3n+1$  のときに比べて  $N = 3n-1$  において  $\beta_J$  が顕著に小さくなった (図 1c)。この関係は先述した AGNRs のバンドギャップの規則性と一致する結果であり、AGNRs のバンド構造に由来する導電性の評価ができた。

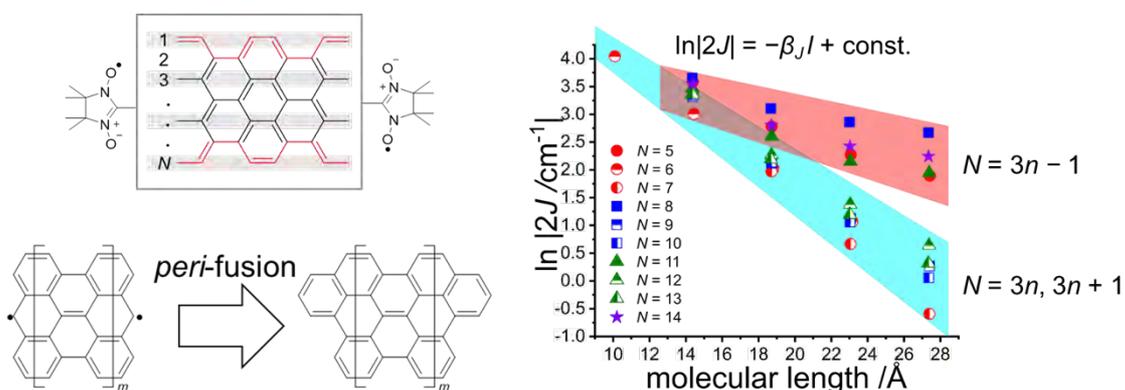


図1. (a) AGNRs の幅  $N$  の定義と両端に置換するニトロニルニトロキシド (NN) (b) エッジ由来のスピンを打ち消すペリ縮環 ( $N = 7$  の系を例示) (c) NN 間交換相互作用  $J$  の分子長依存性

発表論文 (謝辞あり)

T. Shinozuka, S. Nishizawa, D. Shimizu, K. Matsuda "Evaluation of electron transport capability of armchair graphene nanoribbons (AGNRs) by calculating exchange interaction between terminally attached radicals" *Chem. Phys. Lett.* **2021**, 780, 138923.