

Conformational and Conductance Fluctuations in Single-Molecule Junctions: A Multiscale Computational Study

김후성, 김용훈¹

¹서울시립대학교 신소재공학과

우리 연구그룹에서는 분자 소자에서의 소자 구조와 전도도 간의 상관관계를 알아보기 위해서 분자동역학 전산모사와 전자밀도범함수이론 계산 및 전하수송성 계산을 자동으로 수행할 수 있는 소프트웨어를 개발하고 이를 적용해 다양한 나노소자를 연구하고 있다. 본 발표에서는 hexanedithiolate 단일 분자가 Au(111) 전극 사이에서 다양한 S-Au 접점 구조를 가지고 구성된 소자 모델에서 열적 진동이 소자 전도도에 끼치는 효과를 통계적으로 분석하여 단분자 소자 실험에서 제기된 여러 개의 conductance peak의 측정에 대한 논란에 대해 이론적인 규명을 시도할 것이다.