

2E06

単一有機分子の電気伝導に関する理論的研究

産総研・計算科学, JST-CREST

○島崎智実 浅井美博

分子内振動が分子の電気伝導に与える影響が、実験・理論の両面から注目を集めている。今回は、弾性・非弾性電流に対する電荷非平衡分布の影響を研究した。電圧効果を取り入れるために、非平衡グリーン関数 (NEGF) と Hartree-Fock(HF) を組み合わせた NEGF-based HF 法を用い [1]、分子内振動は self-consistent Born 近似によって計算した[2]。低バイアス領域では非弾性電流に対する電圧効果の影響は大きくないが、高バイアスでは大きな影響が現れる。この計算結果について報告する。また、非弾性電流に対して電極の巨視的形狀（曲率）効果と与える影響を理論的に調べた。さらに、非弾性電流スペクトル法のスペクトル線形についても理論的に考察を行った。これらの結果についても報告する。

[1] T. Shimazaki, Y. Xue, M.A. Ratner, and K. Yamashita, *J. Chem. Phys.*, 123, p114708, 2006.

[2] Y. Asai, *Phys. Rev. Lett.*, 93, p246102, 2004; *Phys. Rev. Lett.*, 94, p099901, 2005.

