

2E05

局所電気伝導に関する電子テンション密度を用いた物性解析

(*京大院工) ○埜崎寛雄*, 瀬波大土*, 市川和秀*, 立花明知*

Analysis of local electric conductive properties by electronic tension density

(*Kyoto Univ.) ○Hiroo Nozaki*, Masato Senami*, Kazuhide Ichikawa*, Akitomo Tachibana*

Introduction

電気伝導現象を正しく記述するには, Maxwell 方程式と無矛盾な量子状態を得なければならない. ポテンシャルに基づき量子状態を計算する量子力学では正しく取り扱うことはできず, 光も量子化された場の理論である QED(quantum electrodynamics) によって正しく電気伝導現象を取り扱う事ができる.

QED においては, 量子力学と異なり物理量は空間各点における場の量として扱えるため, Lorentz 力などの各種物理量を局所的に取り扱える. このため我々は, QED 理論に対して原子核を Schrödinger 場として追加した Rigged QED [1] に基づき, 電気伝導に対する理論的研究を行ってきた. Rigged QED は, 電子テンション密度というベクトル量がていぎされ, この電子テンション密度を用いる事で, 電気伝導の理論における緩和時間の項のような現象論的パラメータを用いることなく, 物理的に正しく統一的に電気伝導の現象を取り扱える. また我々は, 局所電気伝導率と言った局所的な電気伝導特性に関する研究も行っており, 本発表では, これと Lorentz 力および電子テンション密度との関連を明らかにする事を目標として研究を行う.

Theory

これまでの電子テンション密度を用いた研究によって, 原子間で電子テンション密度が 0 となる点を化学結合を代表する点とした際, その点における電子ストレステンソル密度の固有値から化学結合の性質などを明らかにする事 [2] が示された. また同様に, 従来物理的に意味を有する形での定義がなされてこなかった分子内原子の境界面に対し, 電子テンション密度のセパトリクスによって定義を行いうること [3] も示された. この研究では, 分子内原子の境界面とすることの妥当性や, その面によって定義される結合次数と力の定数の関連が議論されている.

電子テンション密度演算子 $\hat{\tau}_e(x)$ は, 下に示す電子の運動量密度演算子 $\hat{\Pi}_e(x)$ に対する時間微分の方程式に現われる.

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\Pi}_e(x) = \hat{L}_e(x) + \hat{\tau}_e(x). \quad (1)$$

この $\hat{\tau}_e(x)$ は, 電子の 4 成分 Dirac 場演算子 $\hat{\psi}(x)$ によって, 次のように表される.

$$\hat{\tau}_e^{\Pi k}(x) = \frac{i\hbar c}{2} \partial_t \left[\hat{\psi}(x) \gamma^l \hat{D}_k(x) \hat{\psi}(x) + h.c. \right]. \quad (2)$$

$\hat{L}_e(x)$ は Lorentz 力密度演算子であり, 電場 $\hat{E}(x)$, 電子密度演算子 $\hat{\rho}_e(x)$, 電子電流密度演算子 $\vec{j}_e(x)$ と磁場 $\hat{B}(x)$ の演算子によって $\hat{L}_e(x) = \hat{E}(x) \hat{\rho}_e(x) + \frac{1}{c} \vec{j}_e(x) \times \hat{B}(x)$ と定義されている.

電子の運動量密度演算子の式に対して定常状態での期待値を取ると,

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Pi}_e(x) \right\rangle = 0 = \left\langle \hat{L}_e(x) \right\rangle + \left\langle \hat{\tau}_e^{\Pi}(x) \right\rangle = \vec{L}_e(x) + \vec{\tau}_e^{\Pi}(x). \quad (3)$$

電子テンション密度 $\vec{\tau}_e^{\Pi}(x)$ が, Lorentz 力 $\vec{L}_e(x)$ と互いに打ち消しあっている事を確認できる. これに対して, 電気伝導理論における電子の運動方程式は, 次のように表される.

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = 0 = \left(\vec{E} + \frac{\vec{p}}{c} \times \vec{H} \right) - \frac{\vec{p}}{\tau} \quad (4)$$

\vec{p} は電子の運動量, 右辺の括弧内部は電子に加わる Lorentz 力を表している. 緩和時間 τ を含む項は, Lorentz 力が伝導電子に与える無制限な加速に対抗し定常な電流を与えるよう現象論的に導入される項である. この事は, 電気伝導の理論において, 定常電流を表すための現象論的な緩和時間の項を, 物理的に明らかな起源を有する電子テンション密度によって理論的に正しく取り扱える事を示している.

電気伝導におけるテンション密度として、外部電場の変化によって生じるローレンツ力と打ち消しあう成分が重要となるので、外部電場の変化によって生じる Lorentz 力の差分 $\Delta\hat{L}(x)$ を考える。 $\Delta\hat{L}(x)$ は、電流 $\hat{j}_e(x)$ と $\hat{B}(x)$ からなる項を無視すれば、 $\Delta\hat{L}(x) = \Delta(\hat{E}(x)\hat{\rho}_e(x))$ であり、内部電場 $\hat{E}(x)$ と外部電場 $\hat{D}(x)$ と分極率 $\hat{P}(x)$ の関係式 $\hat{E}(x) = \hat{D}(x) - 4\pi\hat{P}(x)$ を用いる事で、

$$\Delta\hat{L}(x) = \Delta\hat{D}(x)(\hat{\rho}_{e0}(x) + \Delta\hat{\rho}_e(x)) - 4\pi\left[\hat{P}_0(x)\Delta\hat{\rho}_e(x) + \Delta\hat{P}(x)\hat{\rho}_{e0}(x) + \Delta\hat{P}(x)\Delta\hat{\rho}_e(x)\right] \quad (5)$$

を得る。局所誘電率テンソル $\hat{\epsilon}(x)$ は $\hat{\epsilon}(x)\hat{E}(x) = \hat{D}(x)$ と与えられるから、

$$\Delta\hat{L}(x) = \hat{\epsilon}(x)^{-1}\Delta\hat{D}(x)(\hat{\rho}_{e0}(x) + \Delta\hat{\rho}_e(x)) - 4\pi\hat{P}_0(x)\Delta\hat{\rho}_e(x). \quad (6)$$

上式において、Lorentz 力が局所誘電率テンソルと関係する形で表されている。

ただし、現状では正しい QED の量子状態を得る事はできないため、本研究では量子力学での非平衡グリーン関数法の考え方に基づいた電気伝導のシミュレーション [4] を行い、局所的な電気伝導の解析手法の確立を目指し、その利点を示す。非平衡グリーン関数に拠る計算を通じてでも、局所的な電気伝導特性や、ローレンツ力と拮抗する電子テンション密度による散逸の起源の解明など、電気伝導に関する物理を明らかにすることができる。

Results

本研究では、図 1 に構造を示すベンゼンジチオール (BDT, Benzenedithiol) を対象として、電子テンション密度を用いて局所電気伝導特性の計算を行う。図 2 と図 3 に、 z 方向に対して 0.5[V] のバイアス電圧を印加することによって生じた BDT の電子テンション密度 $\Delta\hat{\tau}_e(x)$ と Lorentz 力密度 $\Delta\hat{L}(x)$ の変化分を式 (5) に基づいて示す。

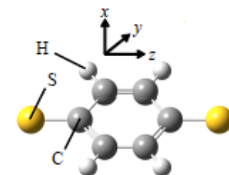


図 1 ベンゼンジチオール

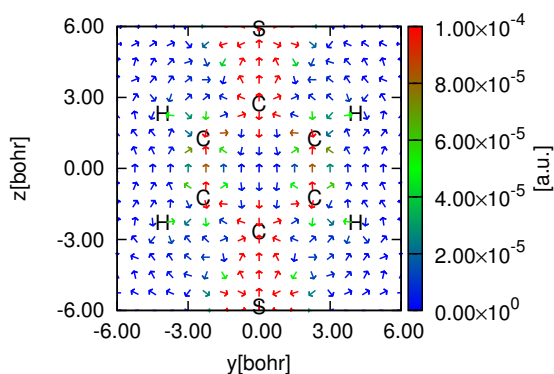


図 2 $V=0.5[V]$ の電子テンション密度 $\tau_e^S(\vec{r})$

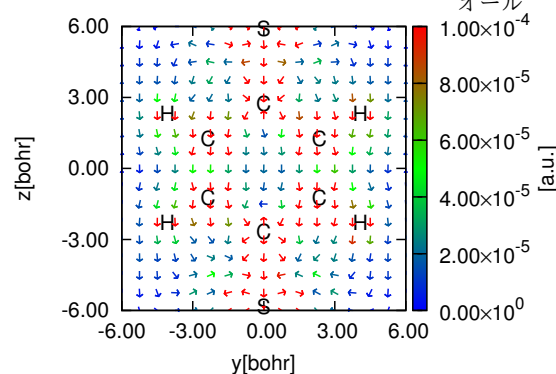


図 3 $V=0.5[V]$ の Lorentz 力密度 $L_e(\vec{r})$

この結果から、電子テンション密度と Lorentz 力密度が互いに打ち消しあう様な傾向を有している事を確認する事ができる。

Conclusion

このように、従来緩和項としてとらえられてきた、Lorentz 力に拮抗して定常電流をもたらす力の正体を理論的に明らかに取り扱える事が示された。

本発表では、電子テンション密度といった局所的な量などを用いて議論するだけでなく、局所的なある領域が、全体的な電気伝導特性にどのような寄与をするか定量的に議論するため、コンダクタンスなどのマクロな量も用いる。

参考文献

- [1] A. Tachibana, J. Mol. Struct. :THEOCHEM **943**, 138 (2010).
- [2] K. Ichikawa, H. Nozaki, N. Komazawa, A. Tachibana, AIP ADVANCES **2**, 042195 (2012).
- [3] H. Nozaki, Y. Ikeda, K. Ichikawa, A. Tachibana, J. Compt. Chem, **36**, 1240, (2015).
- [4] Y. Ikeda, M. Senami, A. Tachibana, AIP ADVANCES **2**, 042168, (2012).