

## 局所的物理量を用いた分子の電気伝導特性の評価方法

(京大院工) ○中西 真, 埜崎 寛雄, 瀬波 大土, 立花 明知

### Computational methods of conductive property of molecules by local physical quantity

(Kyoto Univ.) ○Makoto Nakanishi, Hiroo Nozaki, Masato Senami, Akitomo Tachibana

ナノ材料に対してその電気伝導特性を理解するためには、局所的な解析を行う必要がある。場の理論である QED において物理量は場の量 (密度量) として扱うことができるため、局所的な解析を行うことができる。

本研究では Rigged QED[1]に基づく局所電気伝導率テンソルを用いて電気伝導現象に対する解析を行う。計算対象にはベンゼンジチオール (BDT) やカーボン鎖モデルを選択し、非平衡グリーン関数法に基づいたシミュレーションによって得られた波束に対して、場の量子論に基づいた関係式に従って必要な物理量を計算する。そして得られた局所電気伝導率テンソルや局所電流密度から導かれる、コンダクタンスを模した物理量を 2 種類提案し、これらを Landauer 公式に基づくコンダクタンスの評価と比較しながら、新たに定義したこの物理量の特徴について議論する。最初の量子力学に基づく波束の計算には OpenMX[4]を用い、その後の局所物理量の計算には QEDynamics[5]を用いる。

Rigged QED における局所電気伝導率テンソル演算子 $\hat{\sigma}$ は、次のように定義されている[2][3]。

$$\begin{aligned} \hat{j}(\vec{r}) &= \hat{\sigma}_{ext}(\vec{r})\hat{D}(\vec{r}) \\ &= \hat{\sigma}_{ext}(\vec{r})\hat{\mathcal{E}}(\vec{r})\hat{E}(\vec{r}) \\ &= \hat{\sigma}_{int}(\vec{r})\hat{E}(\vec{r}) \end{aligned}$$

ここで、 $\hat{j}(\vec{r})$  は電流密度演算子であり、 $\hat{D}(\vec{r})$  は外部電場演算子、 $\hat{E}(\vec{r})$  は電場演算子である。このとき $\hat{\mathcal{E}}(\vec{r})$  は  $\vec{r}$  における局所誘電率テンソル演算子である。上式に存在する物理量それぞれに対して状態ベクトルを用いて期待値をとると、局所電気伝導率テンソルは次式のように近似することが出来る。

$$\langle \hat{j}(\vec{r}) \rangle = \langle \hat{\sigma}_{ext}(\vec{r}) \rangle \langle \hat{D}(\vec{r}) \rangle$$

そして、有限差分法を用いてこの  $\langle \hat{\sigma}_{ext}(\vec{r}) \rangle$  の  $xx$ 成分を計算し、コンダクタンスの計算に用いる。ここで、提案する 2 つのコンダクタンスを模した量は、共に電流  $I$  とバイアス電圧  $V_B$  によって表現される  $G = I/V_B$  の関係式を出発点としている。1 つ目は計算対象の系における局所電気伝導率テンソルの平均値を、 $\langle \hat{\sigma}_{ext}(\vec{r}) \rangle$  の関係式から導出し、これに注目してコンダクタンスを表現した (方法 1)。2 つ目は計算対象の系において、その中心から対称な領域を考え、その領域の両端に流れる電流に注目して  $G = I/V_B$  の関係からコンダクタンスを表現した (方法 2)。

本研究ではバイアス電圧が一様に  $x$  方向に印加されているものとする。例として BDT においては図 1 のように S 原子と一次元 Au ナノワイヤ電極が  $x$  軸方向に結合していると仮定する。

図2はデータの一例として0.1~4.0[V]のバイアス電圧を印加した際の、各バイアス電圧に対するコンダクタンスの変化を示したものである。提案する2つのコンダクタンスと、一般にコンダクタンスの計算に用いられる Landauer の公式を元にしたものを示しており、それらの比較ができる。カーボン鎖モデルでは全体的に見ても提案するコンダクタンスと Landauer 公式によるコンダクタンスは定性的に同じ傾向を示している。BDTにおいては、その構造の複雑さのためか、バイアス電圧が低い場合にのみ同様の変化の仕方を見せている。

今後の展望として、他にも複数の分子に対してシミュレーションを行いながら、局所密度量を用いた計算の実用性について研究する予定である。

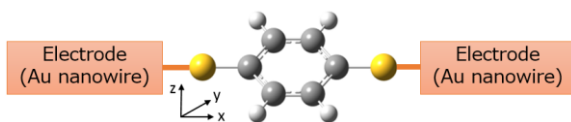


図1. 計算モデル (BDT の例)

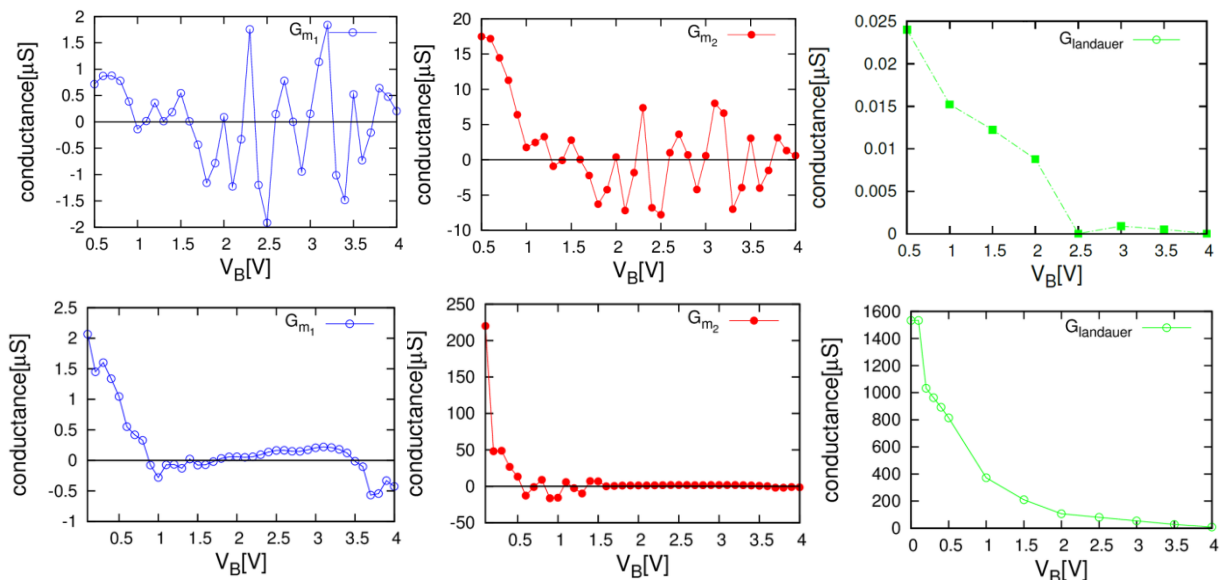


図2. 各種コンダクタンスのバイアス電圧依存性。上段が BDT、下段がカーボンチェーン。それぞれ左から順に、方法1、方法2、Landauer 公式によって計算されたもの。

#### 参考文献

- [1] A. Tachibana, J. Chem. Phys. **115**, 3497 (2001).
- [2] A. Tachibana, J. Mol. Struct. : TEOCHEM **943**, 138 (2010).
- [3] M. Senami, Y. Ikeda, and A. Tachibana, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 010103.
- [4] T. Ozaki, K. Nishio, and H. Kino, Phys. Rev. B **81** 035116 (2010); T. Ozaki, Phys. Rev. B **67** 115108 (2003).
- [5] QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa, and A. Tachibana  
(URL: <http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>).