

電気伝導中におけるローレンツ力密度とテンション密度の 関係についての理論的研究

¹京大院工

○築島千馬¹, 瀬波大士¹

Theoretical study of the relation between the Lorentz force density and the tension density on electric conduction

○Kazuma Tsukishima¹, Masato Senami¹

¹Department of Micro Engineering, Kyoto University, Japan

【Abstract】 In a steady state of electric conduction, the Lorentz force as driving force should be canceled out with counter force. In quantum mechanics, scatterings are considered to be the origin of electrical resistance. However, in a practical calculation, scatterings are too difficult, and hence phenomenological parameter, relaxation time, is used. In quantum field theory, the tension density is shown to be the counter force to the Lorentz force density. In our previous work, the balance between the tension density and the Lorentz force density has been confirmed in numerical computation. In the work, nonlinear dependence of dielectric response to electric field has not been included and the balance was studied for only one value of bias voltage. In this work, we improve the treatment of dielectric response and study the balance at several bias voltage in detail.

【序】

電気伝導現象において、ローレンツ力は電子のドライビングフォースでありそれに拮抗する力が存在し、電流が一定である定常状態ではこれらの力が打ち消しあい加速と減速が釣り合わなくてはならない。この拮抗する力は量子力学の教科書において散乱に由来する力であると説明されており、現実の計算においては現象論的である緩和時間によってパラメータ化されている。それに対して Rigged QED[1]においては理論的にテンション密度がローレンツ力と釣り合う力であることが示されている。先行研究[2]にてこれらの力が実際に釣り合っていることを数値的に示した。

量子的電気伝導現象では誘電応答が電場に非線形に依存しうることが知られている。先行研究ではローレンツ力密度の評価において電場に対する線形項としての局所誘電率を用いていた。本研究では誘電応答の非線形な電場依存性を取り入れた計算を行い、ローレンツ力密度とテンション密度の釣り合いをより詳細に確認する。

【理論・計算方法】

Rigged QED において電子の運動量演算子の時間発展式は以下のように与えられる。

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

ここで $\hat{\Pi}_e$ は電子の運動量密度演算子、 \hat{L}_e はローレンツ力密度演算子、 $\hat{\tau}_e^{\Pi}$ は電子テンション密度演算子である。

$$\hat{L}_e(x) = \hat{E}(x)\hat{\rho}(x) + \frac{1}{c}\hat{j}(x) \times \hat{B}(x),$$

$$\hat{\tau}_e^{\Pi k} = \frac{i\hbar c}{2} \partial_l [\hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^l \hat{D}_k(x) \hat{\psi}(x) + h.c.] .$$

テンション密度演算子に関して、計算では非相対論極限をとり $\hat{\tau}_e^S$ として求めている。ここで S は対称であることを意味する。時間発展式に対して期待値を取ることで定常

状態において以下の式が成り立つ。

$$0 = \langle \hat{\mathbf{t}}^S(x) \rangle + \langle \hat{\mathbf{L}}(x) \rangle = \boldsymbol{\tau}^S(x) + \mathbf{L}(x) .$$

ここで $\langle \rangle$ に挟まれた量は期待値を意味し、以降期待値に関して最右辺の $\boldsymbol{\tau}^S$, \mathbf{L} のようにハットを省略する。バイアス電圧の変化に対するローレンツ力密度の変分を $\Delta\mathbf{L}$ とすると、磁場の項を無視して外部電場と内部電場の関係式より以下のように誘電率 ϵ を含む形で表される。

$$\Delta\mathbf{L}(x) = \epsilon^{-1}(\Delta\mathbf{D}(x)\rho_0(x) + \mathbf{D}_0(x)\Delta\rho(x) + \Delta\mathbf{D}(x)\Delta\rho(x)) .$$

添え字の 0 は変化前の値であることを意味する。 $\Delta\mathbf{D}(x)$, $\Delta\rho(x)$ はそれぞれ外部電場と電荷密度の変化分である。

電気伝導計算に関して、我々が開発しているプログラムパッケージ QEDynamics[3] を使用し、非平衡グリーン関数法に基づき計算する。電極には金原子を仮定し、グリーン関数のパラメータなどの計算条件は先行研究[4]と同様に設定した。

誘電率の取り扱いに関して、先行研究ではゼロバイアス時の値を用いてローレンツ力密度の値を計算しているが、本研究では印加するバイアス電圧が図 1 中の z 軸方向の 1 方向のみであることから分極率密度を差分法により求める。そして $\epsilon^{-1} = 1 - 4\pi\alpha$ の関係式からローレンツ力密度の計算を行う。

$$\alpha_{iz}(x) = \frac{\Delta P^i(x; V_B + \delta V) - \Delta P^i(x; V_B - \delta V)}{2\Delta D_z(x)} .$$

ここで α_{iz} は z 軸方向に印加したバイアス電圧下での分極率密度であり、計算上バイアス電圧と外部電場は線形な関係として取り扱う。

【結果・考察】

図 1 と図 2 にベンゼンジチオールにおけるローレンツ力密度の変分 $\Delta\mathbf{L}$ の分布図を 0.8V から 0.9V、0.9V から 1.0V の変化に対して示した。

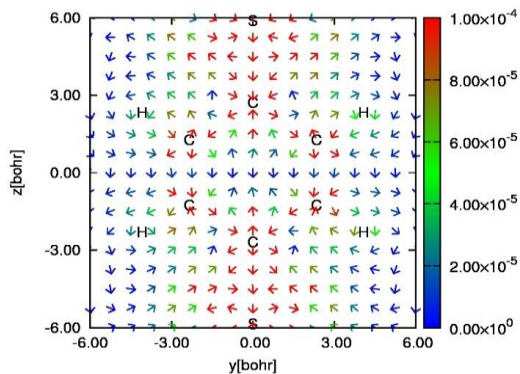


Fig.1. The distribution of the variation of the Lorentz force density from 0.8V to 0.9V.

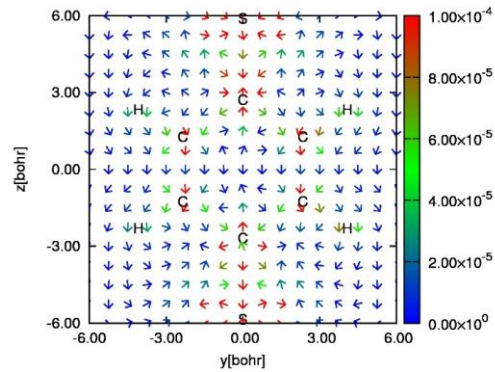


Fig.2. The distribution of the variation of the Lorentz force density from 0.9V to 1.0V.

非線形な誘電応答の電場依存性による、 $\Delta\mathbf{L}$ が電場依存性を示している。このことにより先行研究では 0V から 0.5V への変化においてのみ釣り合いを確認していたが、本研究では各バイアスにおける誘電率の値を用いてより詳細に確認することができる。

【参考文献】

- [1] A. Tachibana, J. Mol. Modeling **11** 301 (2005).
- [2] H. Nozaki, M. Senami, K. Ichikawa, and A. Tachibana, Jpn. J. Appl. Phys. **55** 08PE01 (2016).
- [3] QEDynamics, M. Senami, K. Ichikawa, A. Tachibana [http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/]
- [4] Y. Ikeda, M. Senami, A. Tachibana, AIP Advances **2**, 042168 (2012), and references therein.