

## 2E16 単一有機分子の電気伝導に関する理論的研究

Theoretical study on the conductivity of single molecules

(産総研・計算科学、JST-CREST) 島崎智実 浅井美博

近年、分子デバイスの実現を目指した研究が盛んに行われている。分子内振動が電流に与える影響は、非弾性効果として実験・理論の両面から注目を集めている。非弾性電流の電子状態計算が行われるようになったが [1, 2]、電子・分子内振動結合定数は電圧がかかっていない状況で見積もられており、分子に加わる電圧効果を含めた非弾性電流計算は未だ行われていない。最近、Serugeev らは電子・分子振動結合定数の電圧依存性を報告した [3]。本研究では、電圧効果を含めた非弾性電流計算を行う。分子中を流れる電流は、ランダウア公式とグリーン関数を用いて ab-initio な量子化学計算に基づいて求めた [4, 5]。また、分子に電圧が加わった場合については、非平衡グリーン関数 (NEGF) と Hartree-Fock (HF) を組み合わせた NEGF-based HF 法を用いた [6]。その詳細について報告する。

- [1] Y. Asai, *Phys. Rev. Lett.*, 93, p246102, 2004; *Phys. Rev. Lett.*, 94, p099901, 2005.
- [2] T. Frederiksen, M. Brandbyge, N. Lorente, and A. Jauho, *Phys. Rev. Lett.*, 94, p256601, 2004.
- [3] N. Sergueev, D. Roubtsov, and H. Guo, *Phys. Rev. Lett.*, 95, p146803, 2005.
- [4] T. Shimazaki and K. Yamashita, *Int. J. Quan. Chem.*, 106, p803, 2006.
- [5] T. Shimazaki, H. Maruyama, Y. Asai, and K. Yamashita, *J. Chem. Phys.*, 123, p16411, 2005.
- [6] T. Shimazaki, Y. Xue, M.A. Ratner, and K. Yamashita, *J. Chem. Phys.*, 123, p114708, 2006.