

## 局所電気伝導率を用いた分子のコンダクタンス評価方法

○中西 真<sup>1</sup>, 埜崎 寛雄<sup>1</sup>, 瀬波 大土<sup>1</sup>, 立花 明知<sup>1</sup><sup>1</sup>京大院工

nakanishi.makoto.53n@st.kyoto-u.ac.jp

ナノ材料に対してその電気伝導特性を理解するために、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、局所的な解析を行える。

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)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を通じて解析を行う。そして得られた局所電気伝導率テンソルからコンダクタンスを計算する 2 つの方法を提案する。最終的な目的としては、局所的な電気伝導特性の違いが材料全体の電気伝導性にどのように影響を与えるかを定量的に解析する手法を確立することを考えている。

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]。

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

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 $\hat{E}(\vec{r})$ 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、コンダクタンスを計算する。計算するコンダクタンス $G$ には、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 2 種類を提案する。

本研究ではバイアス電圧が一様に $x$ 方向に印加されており、図 1 のように BDT の 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 はデータの一部として 0.5 ~ 4.0[V]のバイアス電圧を印加した際に、各バイアス電圧に対する BDT のコンダクタンスを示したものである。発表では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含めて複数のデータを並べ、比較しながら局所電気伝導率テンソルとコンダクタンスの関係等について議論する。

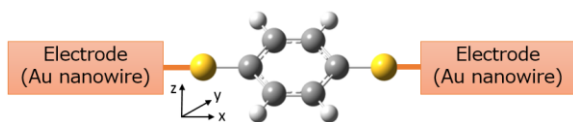


図 1. 計算モデル

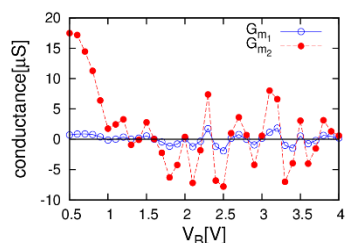


図 2. 0.5 ~ 4.0[V]のバイアス電圧を印加した場合のコンダクタンス

## 参考文献

- [1] A. Tachibana, J. Chem. Phys. **115**, 3497 (2001)  
 [2] A. Tachibana, J. Mol. Structure : TEOCHEM, **943**138 (2010)