

電子テンション密度を用いた局所電気伝導特性の解析

Analysis of local electric conductive properties by electronic tension density

○瀬波 大土¹、埜崎 寛雄¹、市川 和秀¹、立花 明知¹(1. 京大院工)○Masato Senami¹, Hiroo Nozaki¹, Kazuhide Ichikawa¹, Akitomo Tachibana¹ (1.Kyoto Univ.)

E-mail: senami@me.kyoto-u.ac.jp

ナノ材料に対する理論的計算においては、量子効果を取り入れる必要がある。ここで、場の量子論である QED(quantum electrodynamics) では、Maxwell 方程式と矛盾しない量子状態を得る事ができるだけでなく、物理量は空間の各点各点における密度量として定義されるため、ローレンツ力などの各種物理量を局所的に取り扱う事ができる。よって、電気伝導に対する理論的研究は、QED を通じて行う必要がある。このような観点から、我々はこれまで、QED に原子核場を Schrödinger 場として追加した Rigged QED [1-3] を用いてナノ材料の物性解析を行ってきた。具体的な成果として、局所電気伝導率テンソルや局所誘電率、分極率を用い、局所的な電流密度の分布を通じた電流の局所依存性の解明や、電気伝導率テンソルを通じてのコンダクタンスの導出といった、電気伝導特性に関する物性解析を挙げられる。

本研究では、ベンゼンジチオール (BDT) を計算対象とし、電子の伝導におけるドライビングフォースである Lorentz 力を局所的な密度力として研究する。平衡状態にある電流を仮定すると、Lorentz 力による電子の加速は、電子テンション密度という Rigged QED に由来する密度量によって空間各点各点で打ち消される事が理論的に予言されている。図 1 に、1.00[V] のバイアス電圧を印加した際の電子テンション密度の差分 (a) と Lorentz 力密度の差分 (b) を示す。これらは、BDT の全原子核がのる平面における結果を示している。図中において、矢印の色と向きは、それぞれ電子テンション密度と Lorentz 力密度の差分の大きさとその方向に対応している。この結果から、特に計算が比較的正確と考えられる原子核の近傍などの領域において、電子テンション密度の差分と Lorentz 力密度の差分が打ち消しあうような傾向を有している事を確認できる。これらの結果から、定常電流の存在時にも、電子テンション密度と Lorentz 力密度の打ち消しあいを数値的に確認できた。

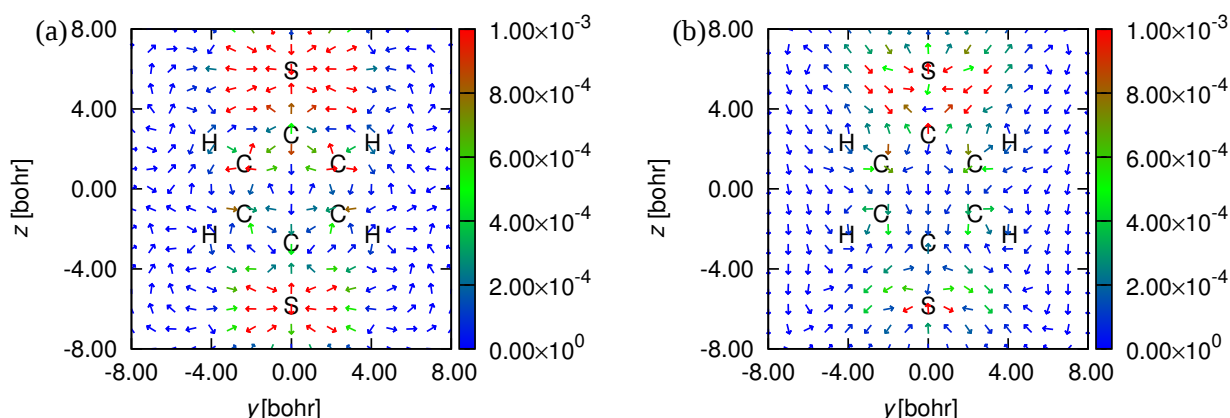


図 1: 1.0[V] のバイアス電圧を印加した場合における BDT の電子テンション密度 (a) と Lorentz 力密度 (b).

[1] A. Tachibana: in *Fundamental World of Quantum Chemistry, A Tribute to the Memory of Per-Olov Löwdin*, ed. E. J. Brändas and E. S. Kryachko (Kluwer Academic, Dordrecht, 2003) Vol. 2, p. 211.

[2] A. Tachibana: *J. Mol. Model.* **11** (2005) 301.

[3] A. Tachibana: *J. Mol. Struct.: THEOCHEM* **943** (2010) 138.