

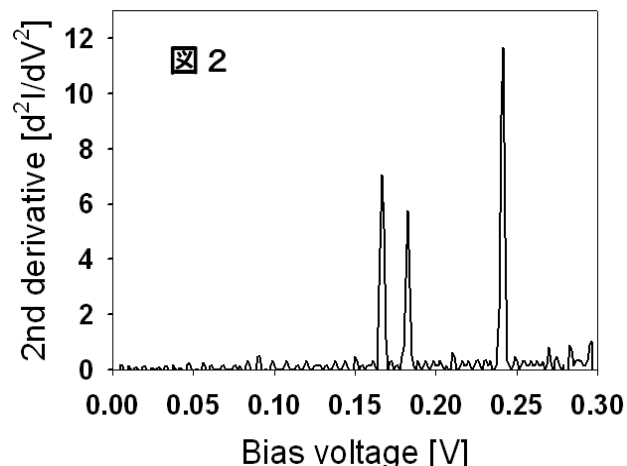
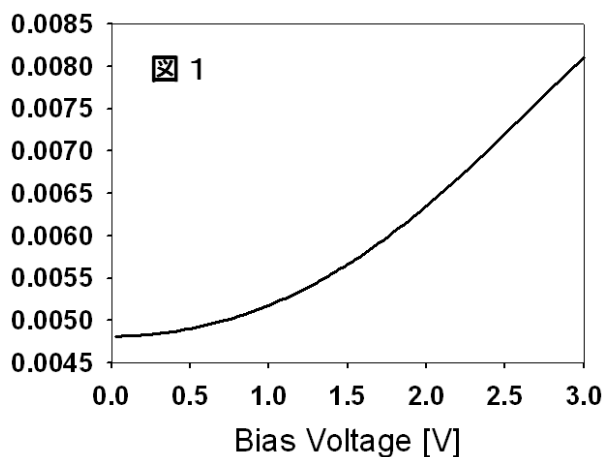
1D1b NEGF-based *ab initio* 法に基づいた単一分子 の非弾性電気伝導に関する理論的研究

産総研・計算科学, JST-CREST

○島崎智実、 浅井美博

t-shimazaki@aist.go.jp

分子内振動が分子の電気伝導に与える影響が、実験・理論の両面から注目を集めている。今回は、弾性・非弾性電流に対する電荷非平衡分布の影響を研究した。電圧効果を取り入れるために、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 [1]、分子内振動は self-consistent Born 近似によって計算した[2]。図 1 に電子・分子内振動結合 λ の電圧依存性の計算結果を示す[3]。電圧依存性の多くは状態密度変化からくる。しかし、低バイアス領域では非弾性電流に対する電圧効果の影響は大きくない (図 2)。高バイアス条件下の詳細および解析結果については当日報告する。



[1] T. Shimazaki, Y. Xue, M.A. Ratner, and K. Yamashita, *J. Chem. Phys.*, 123, p114708, 2006.

[2] Y. Asai, *Phys. Rev. Lett.*, 93, p246102, 2004; *Phys. Rev. Lett.*, 94, p099901, 2005.

[3] N. Sergueev, D. Roubtsov, and H. Guo, *Phys. Rev. Lett.*, 95, p146803, 2005.