

ナノコンタクト系の過渡ループ電流の研究

東京大学大学院 理学系研究科 穴釜 剛¹

千葉大学理学部 飯塚 秀行, 中山 隆史

研究目的・手法

フラーレン等のループ型の幾何構造を持つ量子系の内部において、ループ状の電流が生じていることが、第一原理電子状態計算等で明らかになっている [1]。しかし、どのような原因で、どのような過程を経てループ電流が生じているかは、未だに明らかにされていない。本研究は、図 1 に示されるような、電極に挟まれたループ型幾何構造を持つナノ系の中に流れる電流のダイナミクスを調べることで、ループ電流の生じる原因と緩和するまでの非平衡過程のダイナミクスを理解することを目的としている。

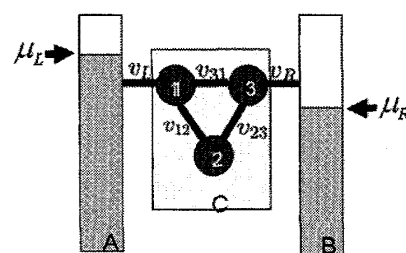


図 1: ループ型幾何構造を持つナノコンタクト系

本研究では、電極に挟まれた単一のエネルギー準位を持つ分子の内部を流れる電流の時間的ダイナミクスを計算するために、石井らが開発した密度行列の時間発展に基づく計算手法 [2] を分子がループ状幾何構造の場合に適用できるように拡張した。電極はほぼ無限に自由度を持つ量子系と考えられるため、全系の密度行列を計算することは不可能である。したがって、左右の電極を異なる化学ポテンシャルを持ったグランドカノニカル分布と置き、密度行列の電極部分をトレースアウトすることで得た着目するナノ系の縮約密度行列を Liouville 方程式にしたがって時間発展²させた。図 1 中の、電極に挟まれた三つの●はそれぞれ 1 準位の分子を表し (以下、サイトと呼ぶ)、 v_{12} , v_{13} , v_{23} はサイト間の electron transfer energy, v_L , v_R は電極とナノ系の間の transfer を表す。本研究では、 $v_{13} = 0.5$ を固定した状態で v_{12} , v_{23} を変化させ、電流のダイナミクスを計算した。

計算結果

定常状態で右回りと左回りのループ電流が流れている場合があるという結果が得られた。以下では、右回りループの詳細についてを述べる。

¹E-mail: anagama@vortex.c.u-tokyo.ac.jp

²孤立系の密度行列が定常状態に落ち着くことは無いが、今回は、開放系の計算なので、定常状態に落ち着く場合がある。

I_{ij} が i サイトから j サイトへの内部電流であり図 1 の各サイト間を左から右に流れる方向を正にとっている。 I_L, I_R が左右の電極との間の電流である。定常状態では $I_{12} = I_{23} < 0$ となっているため、「 $3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ 」の方向へ電流が流れている。また、 $I_{13} = |I_{23}| + I_L$ となっている。これは、「左電極 $\rightarrow 1 \rightarrow 3 \rightarrow$ 右電極」という外部電流の流れと、「 $3 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 3$ 」という右回りループ電流により定常状態が構成されていることを表す。 $I_{12} = I_{23} > 0, I_{13} < 0, I_{12} = |I_{13}| + I_L$ を満たす左回りのループ電流が生じる場合も確認された。定常状態における左回り、右回りのループの生じる原因を探るため、 $(x, y) = (v_{12}/v_{13}, v_{23}/v_{13})$ としてプロットしてみた相図、及び、ループ電流強度比 I_{12}/I_L をプロットしたものが図 3 である。尚、「分岐」とされている点は、ループが見られなかった場合 ($I_{12}, I_{13}, I_{23} > 0, I_L = I_{12} + I_{13}$) である。

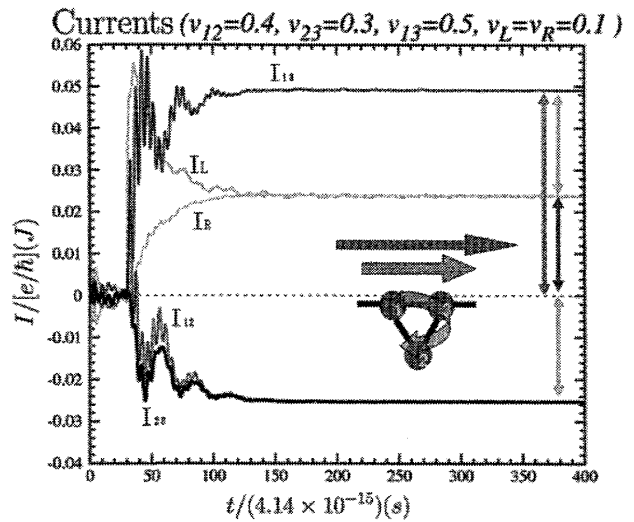


図 2: 右回りループ電流が生じるダイナミクス

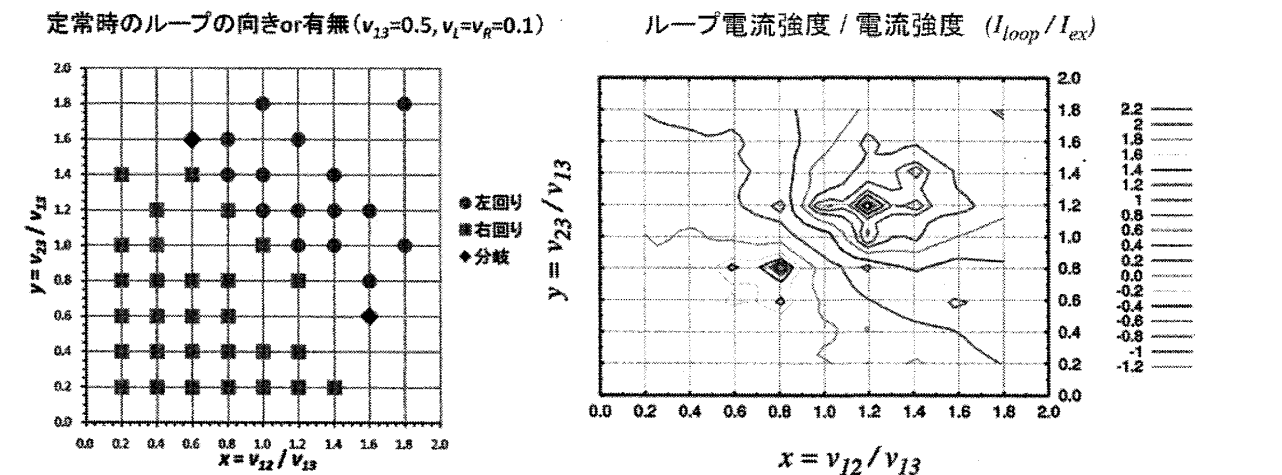


図 3: 電流向きの相図 (左) とループ電流強度比の等高線 (右)

現時点で得られているデータからは、 $v_{12}, v_{23} < v_{13}$ の領域で右回りループが発生し、 $v_{12}, v_{23} > v_{13}$ の領域で左回りループが発生する傾向にある。また、ループ電流の強度比は左回りを正にとってプロットしたところ、極大点と極小点を得られた。また、定常状態の初期条件依存性は見られなかった。現在、ループが生じる原因を解明するため、これらのデータの解析を進めている。

参考文献

- [1] S.Nakanishi et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 126801 (2001).
- [2] H.Ishii et al., e-J. Surf. Sci. Nanotech. **6**, 213 (2008)