

コンピューター計算でみるワイヤー量子化電気伝導

—金属原子の一系列は絶縁体になるか—

研究者名 岡本政邦

系が低次元になるにつれて構造ゆらぎが大きくなることが一般に知られている。金原子鎖は連結度の最も小さい低次元系の 1 つであるので、構造ゆらぎが大きいことが期待される。また、その効果は電気伝導(コンダクタンス)にも反映されるはずである。私は、金原子鎖の構造とコンダクタンスの関係を理論的に解析してみた。

図 1 のモデルの金原子($n+2$)個のクラスターを第一原理計算で構造最適化することにより原子鎖の構造を決めた。原子間の平均距離が $\langle d \rangle = 3.0 \text{ \AA}$ の場合について鎖の構造をみると金ダイマーが形成されることが示された(図 2)。この原子構造を用いジェリウム電極間のコンダクタンスをリカージョン伝達行列(RTM)法で計算した。 $n=4$ の場合について、鎖が伸びるときを調べると(図 3), $\langle d \rangle > 3.0 \text{ \AA}$ で鎖はダイマー構造に変化した。構造変化するあたりで引っ張り力は最大値となった。また同時にコンダクタンスは激減した。一方で比較のために計算した等間隔鎖のコンダクタンスには顕著な減少はみられなかった。ゆえに、引き伸ばされた鎖は有限長であってもダイマー変形による Peierls ギャップの出現のため絶縁体的となることがわかった。

[1] Okamoto, M.; Takayanagi, K. Structure and conductance of a gold atomic chain. Phys. Rev. B **60** (11), 1999. (in press)

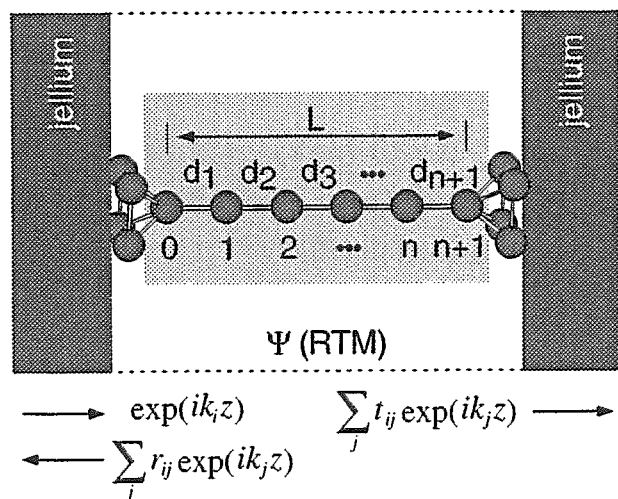


図 1. 本計算に用いた金の n -原子鎖のモデル: 鎖の方向を z -軸とした。 n 個の原子からなる原子鎖をピラミッド型クラスターに両端で接続した。そのピラミッド型クラスターはジェリウム電極に接続した。($n+2$)原子クラスター(黄色で囲まれた部分)を第一原理計算により構造最適化した。入射電子波 $\exp(ik_1z)$ は多重散乱して反射波 $\sum_j r_j \exp(ik_jz)$ と透過波 $\sum_j t_j \exp(ik_jz)$ に分かれる。これらの波動関数は RTM 法を用いて計算した。

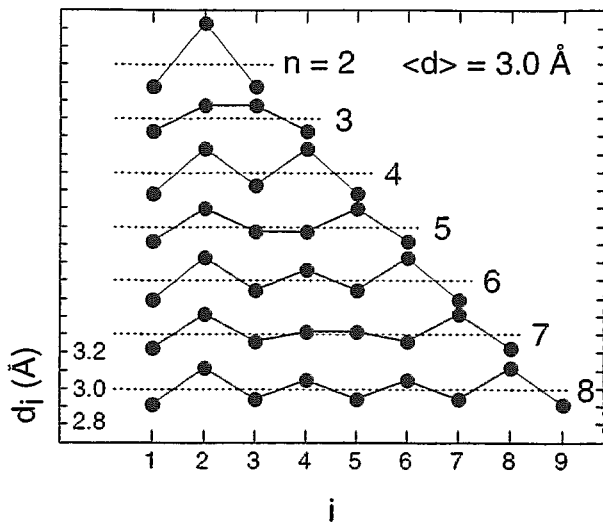


図 2. 構造最適化された金 n -原子鎖のボンド長 d_i : $\langle d \rangle \equiv L/(n+1)$ は平均ボンド長である。金結晶のボンド長 2.88 \AA より少し長い平均ボンド長 $\langle d \rangle = 3.0 \text{ \AA}$ の場合を $n = 8$ まで計算した。温度は絶対零度とした。点線は $d_i = 3.0 \text{ \AA}$ に対応する。 n が偶数の場合、ダイマー形成が顕著になった。

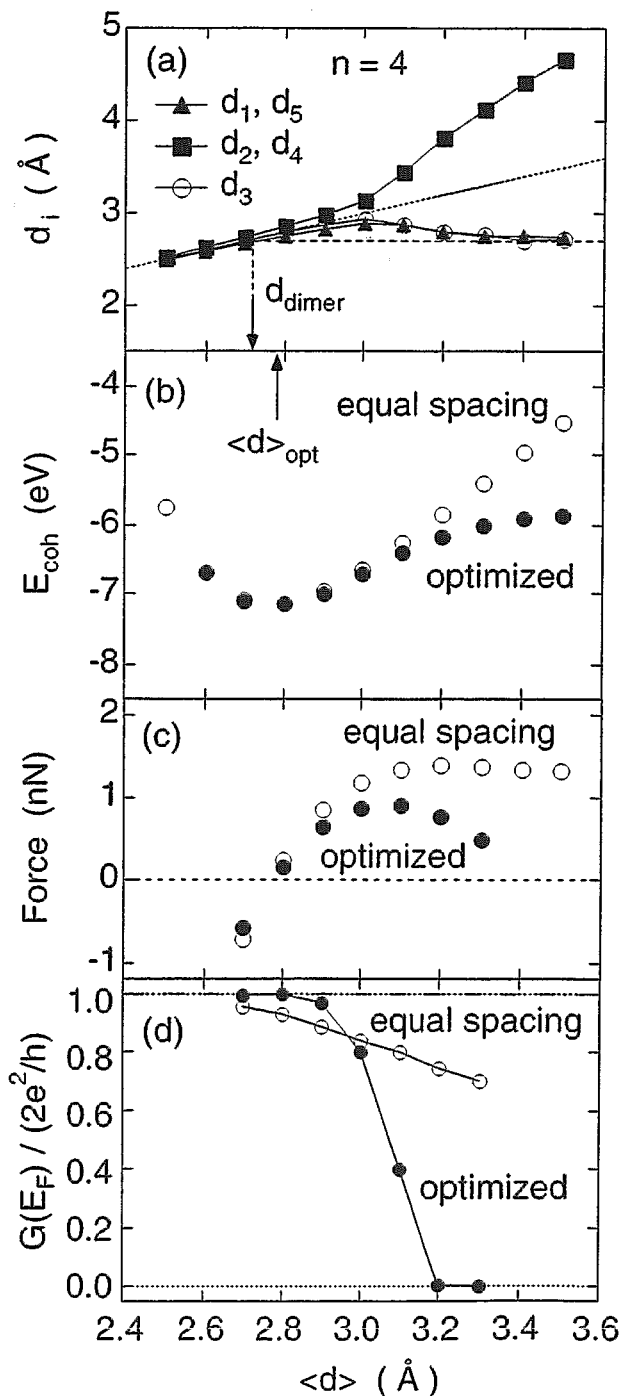


図 3. 金 4-原子鎖 ($n = 4$) の各物性量 (ボンド長, 凝集エネルギー, 引っ張り力, コンダクタンス) : 平均ボンド長 $\langle d \rangle$ の関数として絶対零度で計算した。

- (a) ボンド長 d_i ($i = 1, 2, 3, 4, 5$) : 計算結果は中心対称であり, $d_1 = d_5$ および $d_2 = d_4$ となった。点線は $\langle d \rangle$ に対応する。 $d_{\text{dimer}} = 2.71 \text{ \AA}$ は金 2 原子分子のボンド長である。鎖は $\langle d \rangle > 3.0 \text{ \AA}$ でダイマー構造に転移した。
- (b) 凝集エネルギー E_{coh} : 最適 (optimized) 鎖に加えて, 比較のために等間隔 (equal spacing) 鎖も計算した。最安定ボンド長は, 両者とも $\langle d \rangle_{\text{opt}} = 2.77 \text{ \AA}$ となった。
- (c) 引っ張り力 (Force) : 最適鎖では $\langle d \rangle = 3.0 - 3.1 \text{ \AA}$ あたりで極大値 0.91 nN をとった。
- (d) コンダクタンス $G(E_F)$: 最適鎖では変形に伴う Peierls ギャップ出現のため $\langle d \rangle = 3.1 \text{ \AA}$ あたりでコンダクタンスが激減した。等間隔鎖のコンダクタンスがわずかに減少したのは散乱波の干渉効果によるものである。