

# 第一原理電子状態計算の基礎と応用

密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算の基礎と応用に関して講義を行う。固体における物質の凝集機構と電子状態から議論を始め、現実物質の物理・化学的性質の包括的な理解の枠組みを与える密度汎関数理論と線形応答理論の基本概念及びその定式化を解説する。また、密度汎関数理論の応用として、構造の安定性、反応座標解析、磁気特性、光との相互作用、内殻励起現象等に関して応用事例と共に議論する。第一原理計算プログラムOpenMXのチュートリアルも実施する。

## 講義スケジュール:

2021年9月開講 8回×80分

9月 3日(金)	第1回	13:00-14:20,	第2回	14:35-15:55,	実習	16:10-17:10
9月10日(金)	第3回	13:00-14:20,	第4回	14:35-15:55,	実習	16:10-17:10
9月17日(金)	第5回	13:00-14:20,	第6回	14:35-15:55,	実習	16:10-17:10
9月24日(金)	<b>第7回</b>	<b>13:00-14:20,</b>	第8回	14:35-15:55,	実習	16:10-17:00

# 講義7

---

- 拡散/バリスティック伝導
- バリスティック伝導の実験例
- 非平衡グリーン関数法の特徴
- 散乱問題からの定式化
- 量子化コンダクタンス
- 一次元鎖のモデル
- 三次元系への拡張とDFT-NEGF法
- トンネル磁気抵抗素子:  $\text{Fe}|\text{MgO}|\text{Fe}$
- グラフェンナノリボンの伝導特性

# 講義7の目的

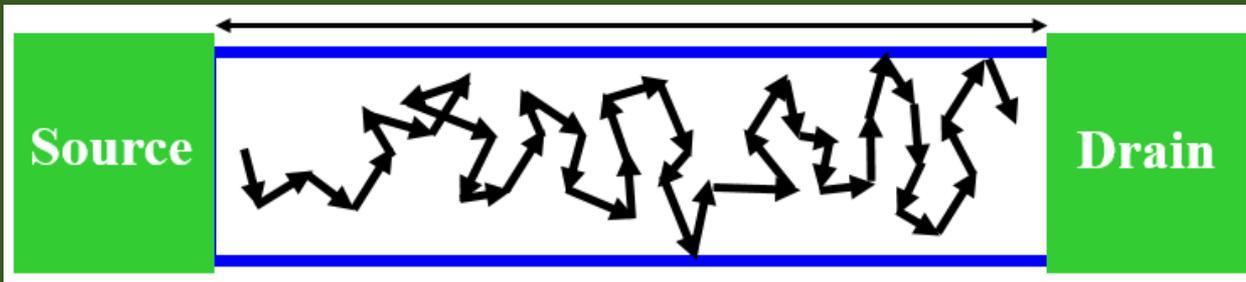
---

- 電子デバイスの極小化に伴い、電子伝導の経路長は10nm以下となりつつある。その伝導特性はバリスティック伝導により特徴づけられ、非平衡グリーン関数法が有効な手段となる。
- 本講義では非平衡グリーン関数法を散乱問題の立場から定式化し、理論の枠組みとDFT法との融合方法を理解する。
- また応用計算の解析事例を通して、伝導特性を理解するための手続きを学ぶ。

# 拡散/バリステック伝導

拡散領域:

ソース-ドレイン長  $L$



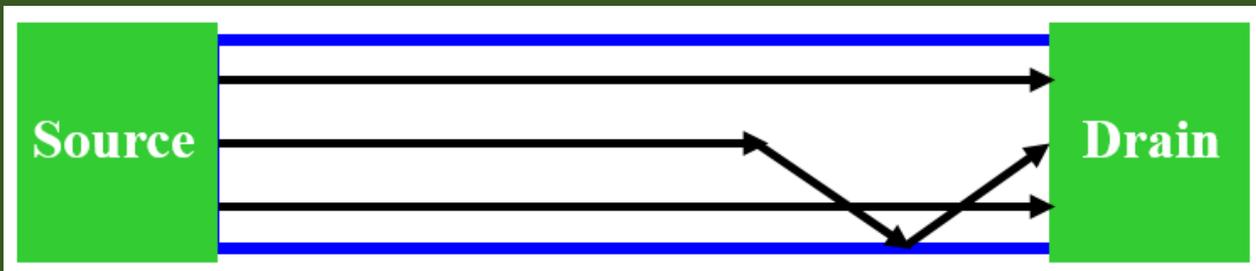
不純物、欠陥、粒界、電子間相互作用、電子-フォノン相互作用

平均自由工程  
 $\lambda$  (単結晶Si  
 $\sim 20\text{nm}$ )

$$\lambda \ll L$$

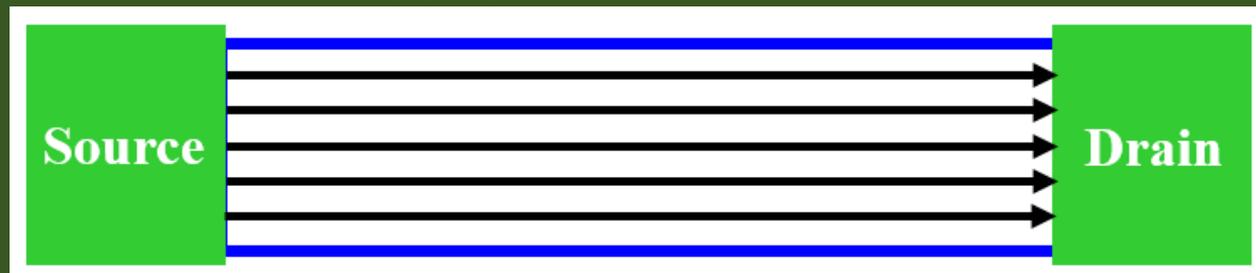
Mobility is  
important.

準バリステック領域:



$$L \sim \lambda$$

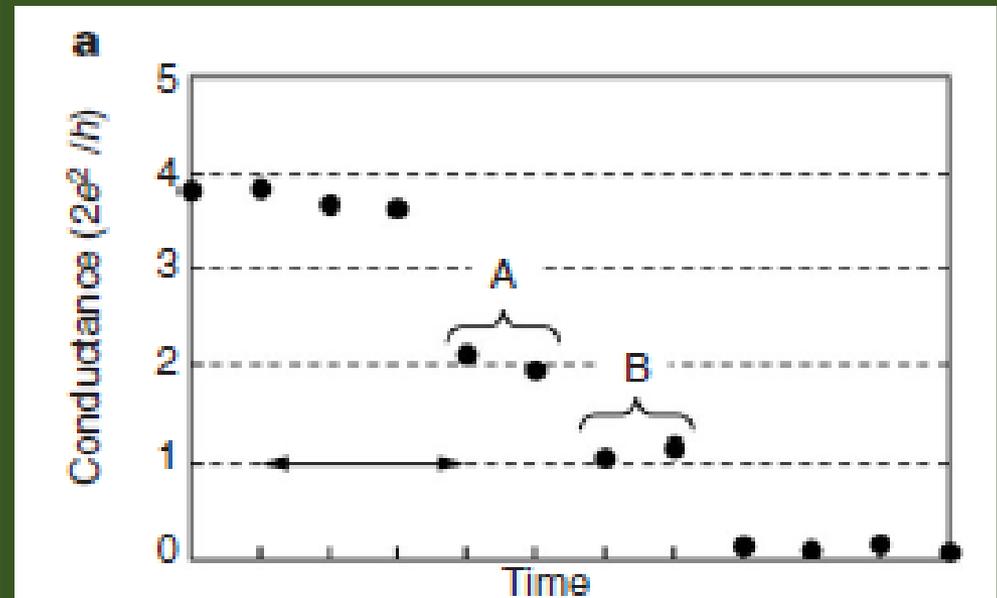
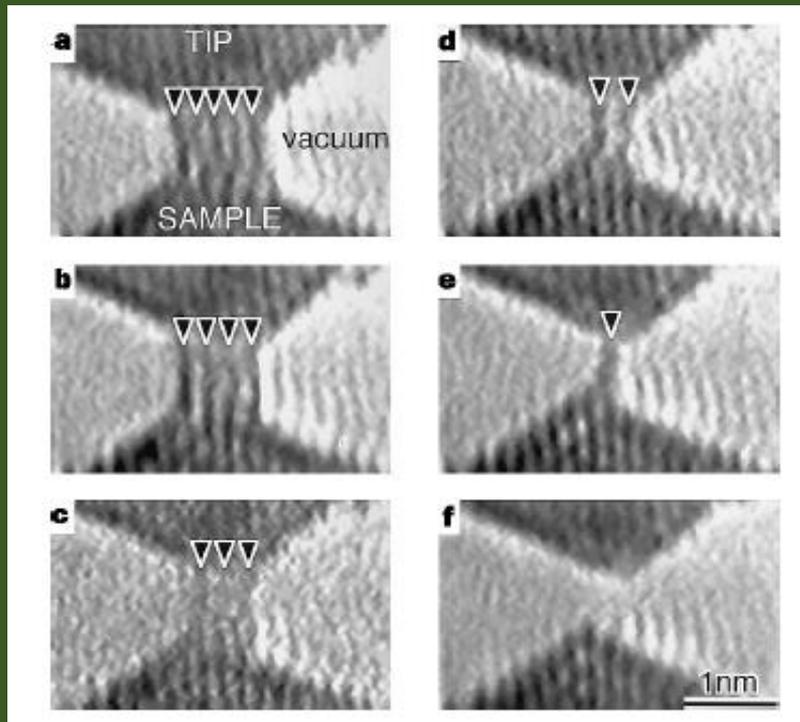
バリステック領域:



$$L < \lambda$$

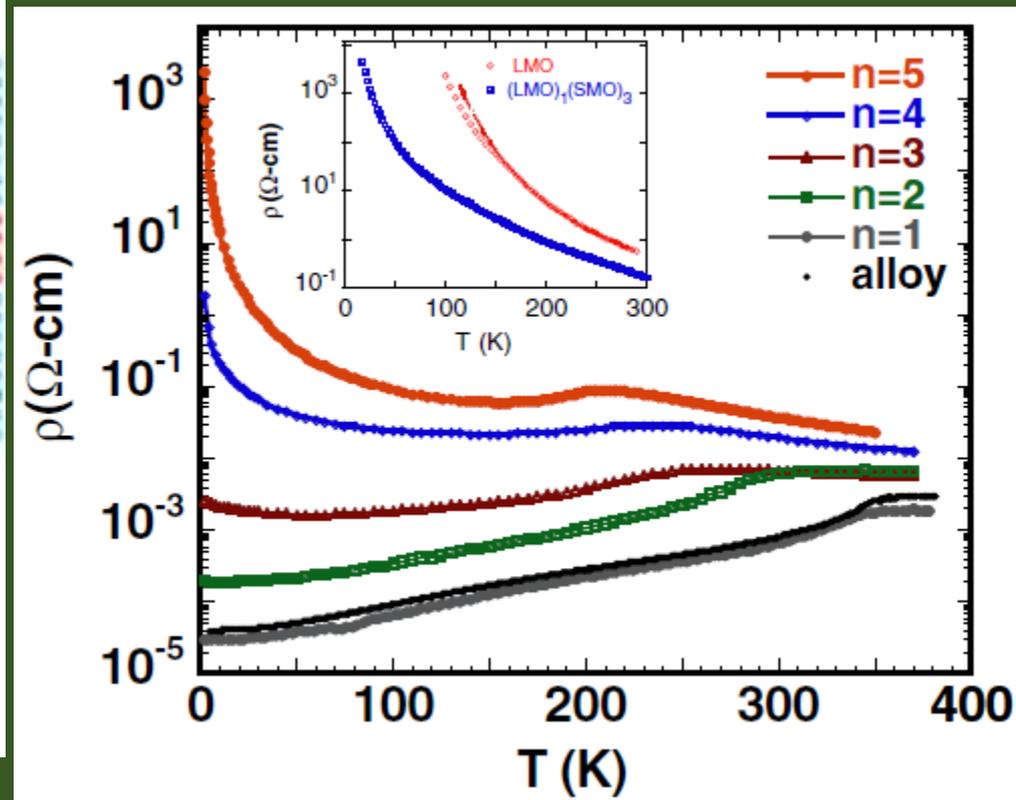
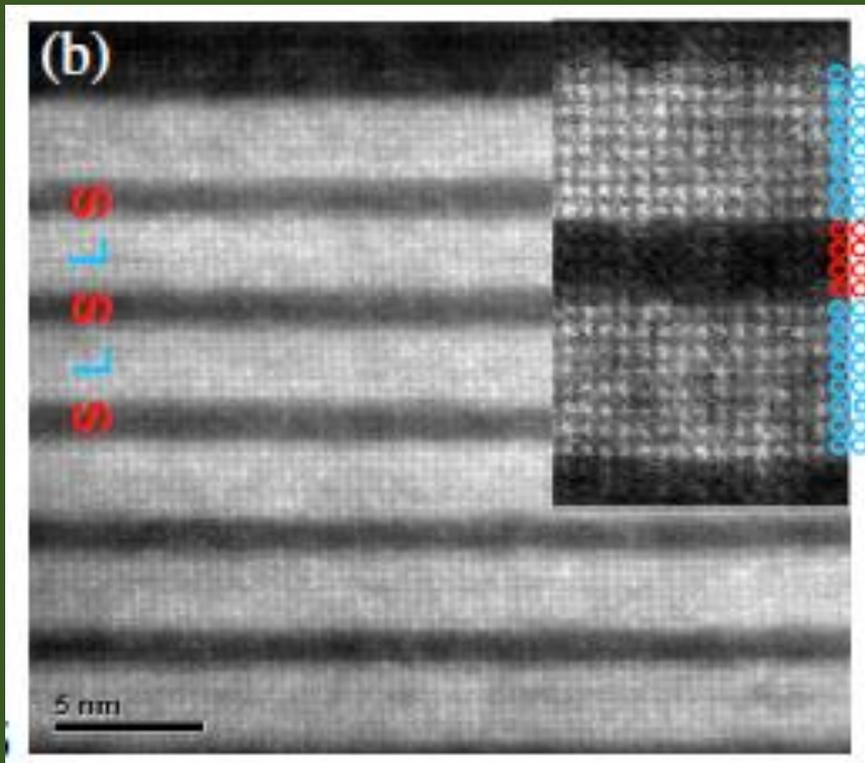
# 金ナノワイヤにおける量子化コンダクタンス

二つの金ナノ構造体を接触させた後、少しずつ引っ張ることで橋掛けしているナノワイヤの直径が細くなっていく。構造の変化と共にコンダクタンスは階段上の変化を見せる。



# $(\text{LaMnO}_3)_{2n}/(\text{SrMnO}_3)_n$ 超格子の伝導特性

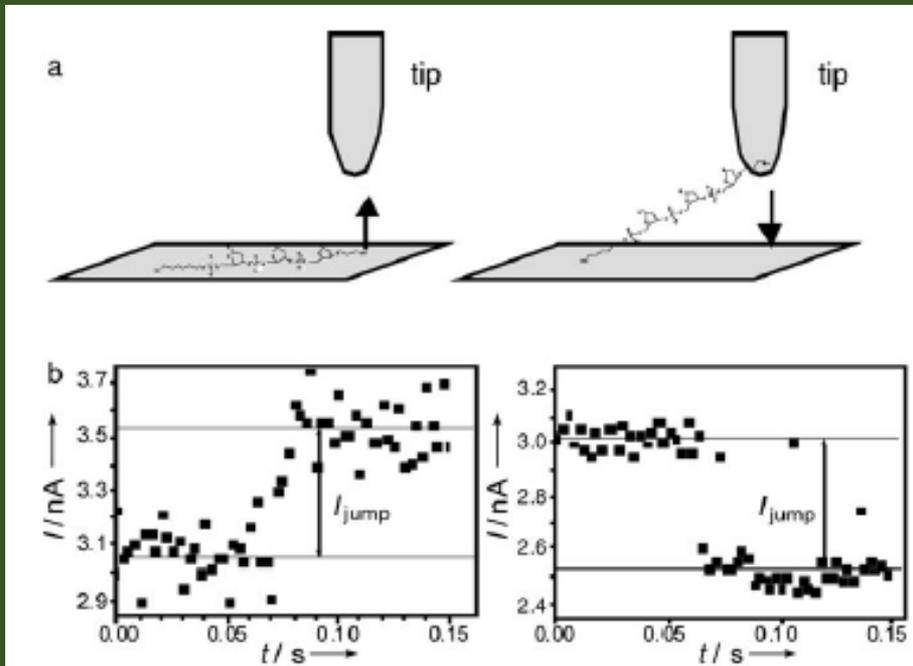
超格子構造の積層数を変化させると金属から絶縁体へ転移する。  
 $n < 3$  金属  $3 \leq n$  絶縁体



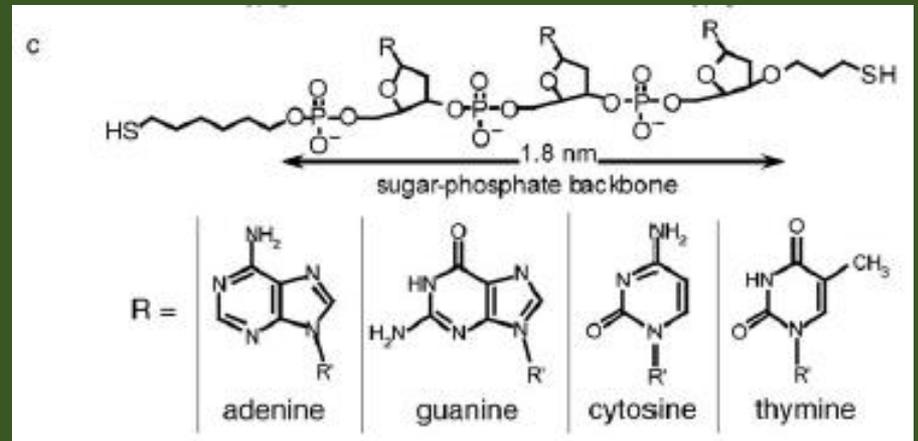
# 一重螺旋構造のDNA分子の伝導

吸着

離脱



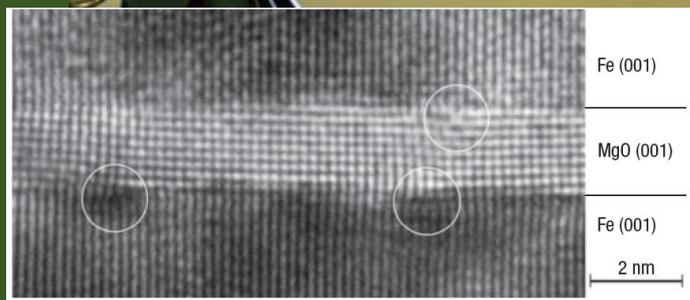
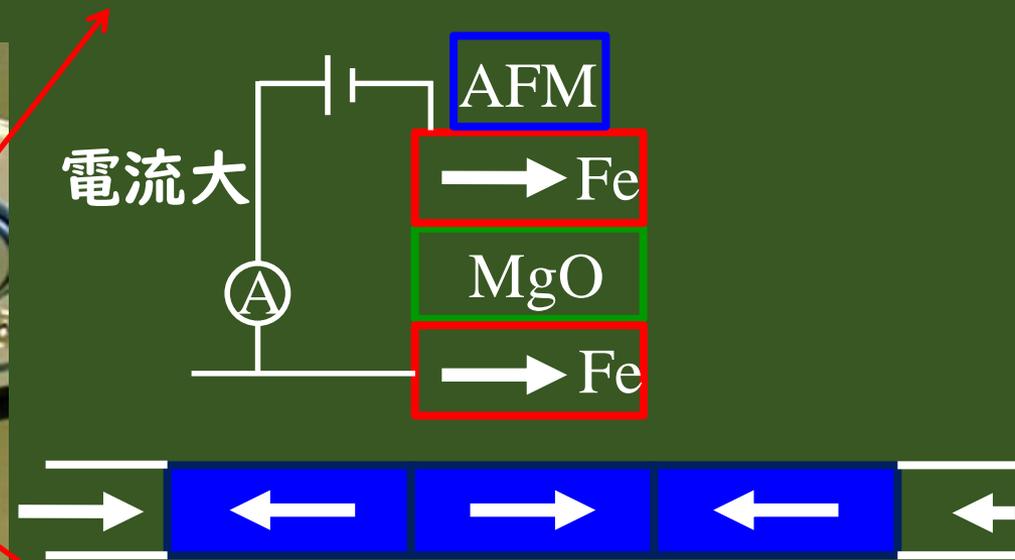
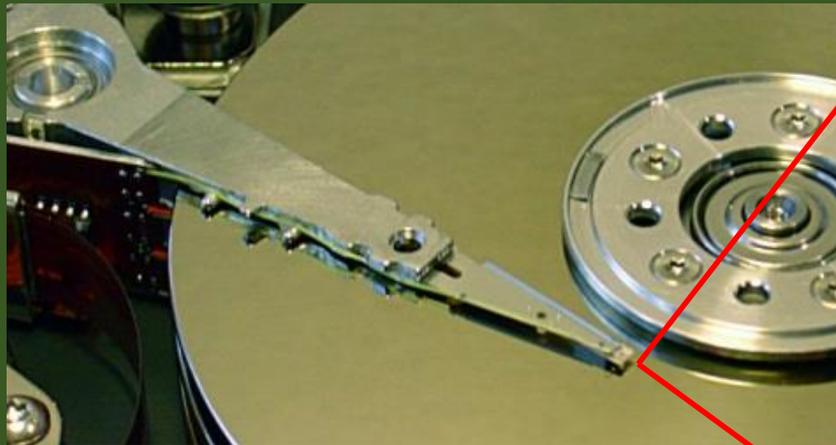
## 一重螺旋DNA分子構造



分子が金電極に吸着及び離脱する過程で電流にジャンプが現れる。

# トンネル磁気抵抗効果(TMR)の応用

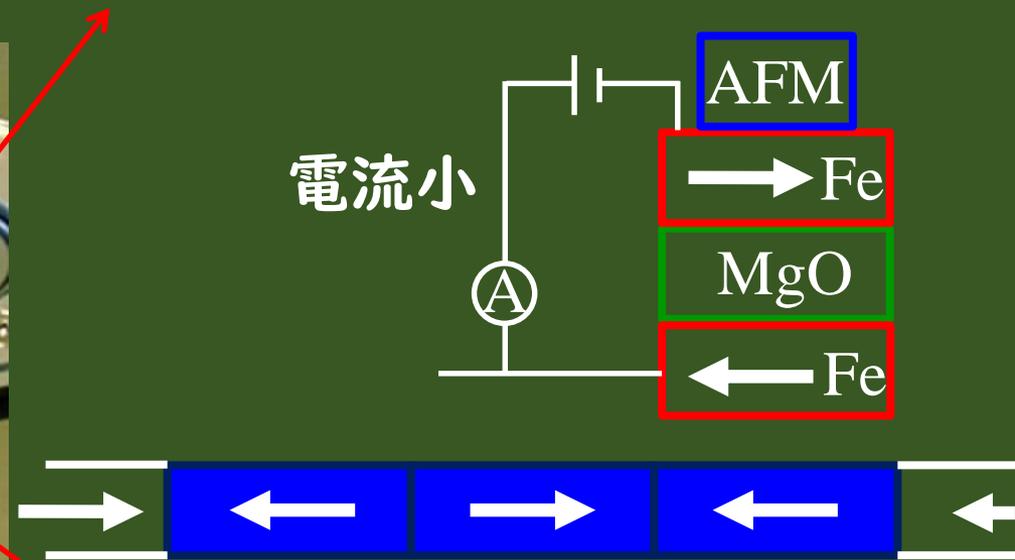
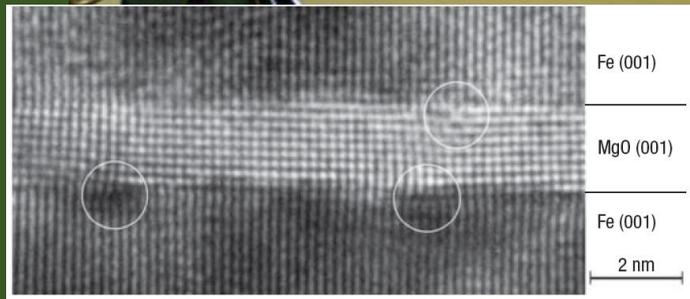
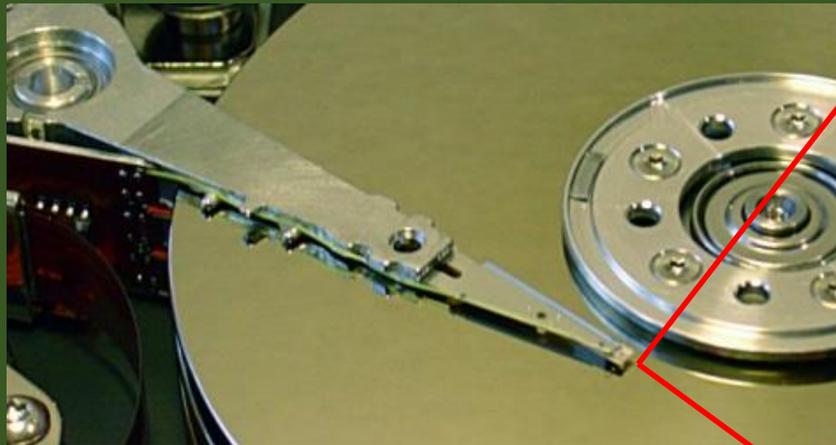
ハードディスクの再生ヘッドはトンネル磁気抵抗効果(TMR)に基づいたものが実用化されている。トンネル電流はデバイス中の二つの強磁性領域の相対的なスピン方向に依存しており、電流を測定することでハードディスクの各領域の磁化方向を知ることができる。



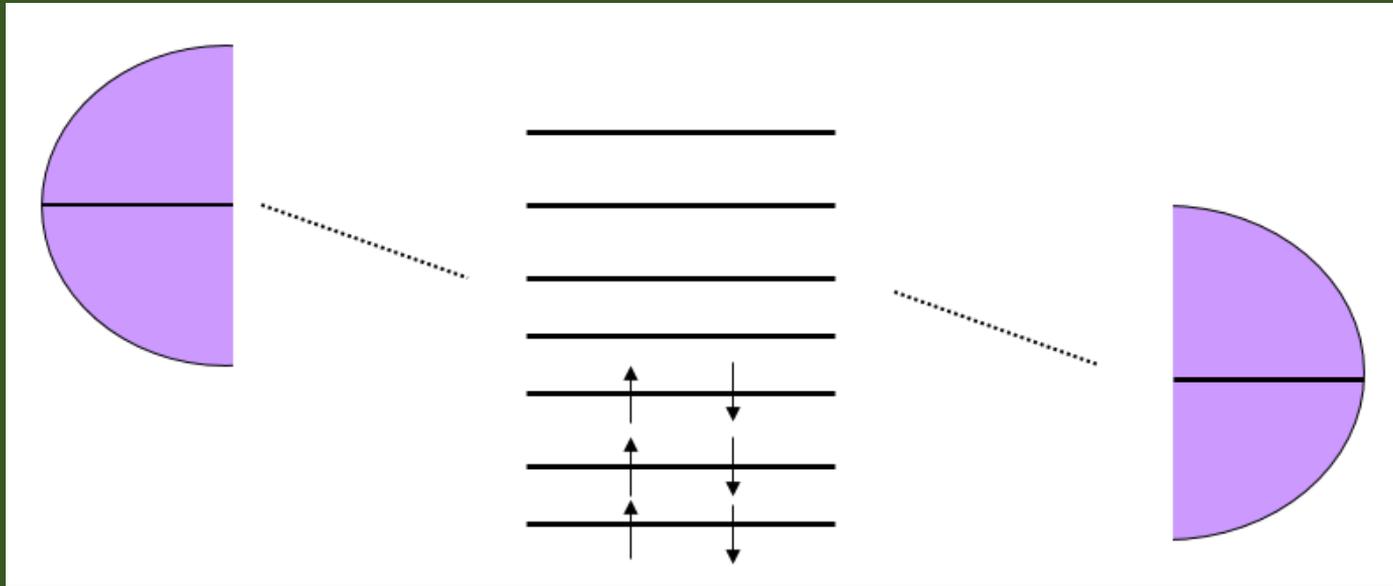
S. Yuasa et al., Nature Materials 3, 868 (2004).

# トンネル磁気抵抗効果(TMR)の応用

ハードディスクの再生ヘッドはトンネル磁気抵抗効果(TMR)に基づいたものが実用化されている。トンネル電流はデバイス中の二つの強磁性領域の相対的なスピン方向に依存しており、電流を測定することでハードディスクの各領域の磁化方向を知ることができる。



# 異なる化学ポテンシャルを持った二つの 大きな電子浴に接続した系



## 問題設定

1. 左と右の電子浴は無限に大きな系で異なる化学ポテンシャルのもとで熱的平衡状態にある。
2. この大きな電子浴が小さな中心部分に接続している。
3. 全系は非平衡定常状態にある。つまり電子が一方から他方に定常的に流れている。

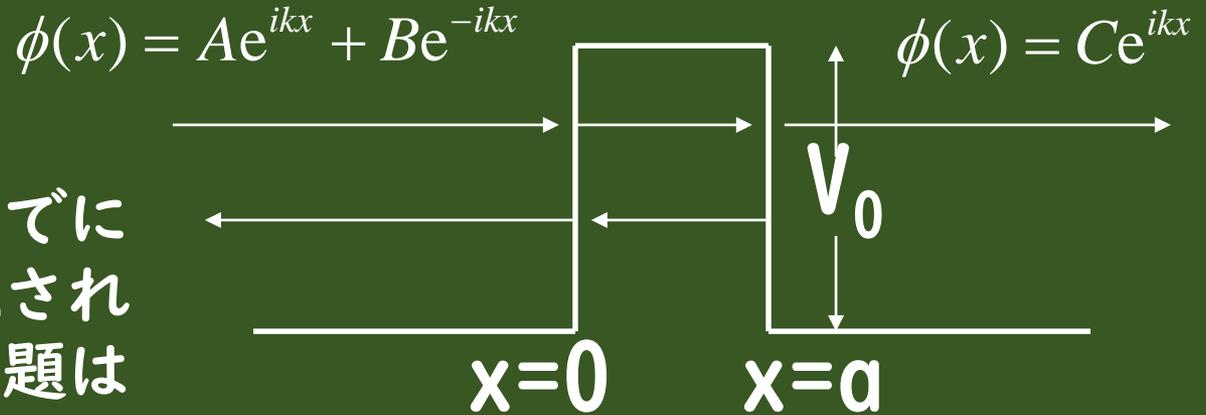
# 非平衡グリーン関数法の特徴

---

1. 電極とデバイス領域が同じ理論的枠組みで取り扱うことが可能。
2. ソース・ドレイン有限バイアス下でデバイス領域の電子状態を第一原理手法(DFT, HFなど)と組み合わせて自己無撞着に決定することが出来る。
3. 電子格子間相互作用と量子力学的な電子間相互がほぼ同じ枠組みで取り扱える可能性がある(現在、発展の段階にある)。
4. 本質的に基底関数の局在性に基づいた手法のため、大規模な系の取り扱いが可能。

# 一次元の散乱問題

領域  $x=0$  から  $x=a$  までに壁に平面波が散乱される一次元の散乱問題は解析的に解ける。



$$V_0 < \varepsilon$$

反射率

$$\left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left\{ 1 + \frac{4\varepsilon(\varepsilon - V_0)}{V_0^2 \sin(\kappa a)} \right\}^{-1}$$

透過率

$$\left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left\{ 1 + \frac{V_0^2 \sin(\kappa a)}{4\varepsilon(\varepsilon - V_0)} \right\}^{-1}$$

$$\varepsilon < V_0 \text{ (トンネル効果)}$$

$$\left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left\{ 1 + \frac{V_0^2 \sinh(\alpha a)}{4\varepsilon(V_0 - \varepsilon)} \right\}^{-1}$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2$$

# 擬一次元の散乱問題の一般化



$$\begin{pmatrix} H_1 & \tau_1 & 0 \\ \tau_1^\dagger & H_d & \tau_2^\dagger \\ 0 & \tau_2 & H_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_d\rangle \\ |\psi_2\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_d\rangle \\ |\psi_2\rangle \end{pmatrix}$$

(1) 接続していないリード1の領域の波動関数は分かっていると仮定する。

$$H_1 |\phi_{1,n}\rangle = E |\phi_{1,n}\rangle$$

(3) step2で仮定した波動関数を系全体のシュレディンガー方程式に代入し、整理すると次式が得られる。

系全体の波動関数は $\phi$ で書ける。

(2) 1次元問題のアナロジーから系全体の波動関数を以下の様に書けると仮定する。

$$\begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_d\rangle \\ |\psi_2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\phi_{1,n}\rangle + |\chi_1\rangle \\ |\chi_d\rangle \\ |\chi_2\rangle \end{pmatrix}$$

$$|\psi_1\rangle = (1 + g_1 \tau_1 G_d \tau_1^\dagger) |\phi_{1,n}\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = g_2 \tau_2 G_d \tau_1^\dagger |\phi_{1,n}\rangle$$

$$|\psi_d\rangle = G_d \tau_1^\dagger |\phi_{1,n}\rangle$$

# デバイス(散乱体)領域の電子密度

リード1からの入射波がもたらすデバイス領域の波動関数を用いて電子密度を求める。

$$|\psi_{d,n}^{(1)}\rangle = G_d \tau_1^\dagger |\phi_{1,n}\rangle$$

全ての寄与をフェルミ分布関数を考慮し、足し上げる。

$$\begin{aligned}\rho^{(1)} &= \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_n f(E, \mu_1) \delta(E - E_n) |\psi_{d,n}^{(1)}\rangle \langle \psi_{d,n}^{(1)}| \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_n f(E, \mu_1) \delta(E - E_n) G_d \tau_1^\dagger |\phi_{1,n}\rangle \langle \phi_{1,n}| \tau_1 G_d^\dagger \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E, \mu_1) G_d \tau_1^\dagger \left( \sum_n \delta(E - E_n) |\phi_{1,n}\rangle \langle \phi_{1,n}| \right) \tau_1 G_d^\dagger \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E, \mu_1) G_d \tau_1^\dagger \frac{a_1}{2\pi} \tau_1 G_d^\dagger \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E, \mu_1) G_d \Gamma_1 G_d^\dagger \quad \Gamma_1 = \tau_1^\dagger a_1 \tau_1\end{aligned}$$

各リードからの寄与及びスピン多重度を考慮すると次式が得られる。

$$\rho = \frac{2}{2\pi} \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E, \mu_i) G_d \Gamma_i G_d^\dagger$$

密度への寄与は化学ポテンシャルによって異なる。

# 確率密度の流れ #1

非平衡定常状態においてデバイス領域の確率密度は保存していると考えられる。時間依存シュレディンガー方程式を用いて確率密度の流れを求める。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_d\rangle \\ |\psi_2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_1 & \tau_1 & 0 \\ \tau_1^\dagger & H_d & \tau_2^\dagger \\ 0 & \tau_2 & H_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_d\rangle \\ |\psi_2\rangle \end{pmatrix}$$

デバイス領域の確率密度和の時間変化

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi_d | \Psi_d \rangle &= \frac{\partial \langle \Psi_d |}{\partial t} | \Psi_d \rangle + \langle \Psi_d | \frac{\partial | \Psi_d \rangle}{\partial t} \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ \left( \langle \Psi_2 | \tau_2 + \langle \Psi_d | H_d + \langle \Psi_1 | \tau_1 \right) | \Psi_d \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle \Psi_d | \left( \tau_1^\dagger | \Psi_1 \rangle + H_d | \Psi_d \rangle + \tau_2^\dagger | \Psi_2 \rangle \right) \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ \left( \langle \Psi_1 | \tau_1 | \Psi_d \rangle - \langle \Psi_d | \tau_1^\dagger | \Psi_1 \rangle \right) + \left( \langle \Psi_2 | \tau_2 | \Psi_d \rangle - \langle \Psi_d | \tau_2^\dagger | \Psi_2 \rangle \right) \right] \end{aligned}$$

各項は各リードkからの電流の寄与だと考えられる。

$$i_k = -\frac{ie}{\hbar} \left( \langle \psi_k | \tau_k | \psi_d \rangle - \langle \psi_d | \tau_k^\dagger | \psi_k \rangle \right)$$

また定常状態を考えているから

$$\sum_k i_k = 0$$

## 確率密度の流れ #2

$$i_k = -\frac{ie}{\hbar} \left( \langle \psi_k | \tau_k | \psi_d \rangle - \langle \psi_d | \tau_k^\dagger | \psi_k \rangle \right)$$

ここでの確率密度はリードkからデバイスの向きを正とする。



- $i_1$  リード1からデバイスへの確率密度の流れの逆 ←
- $i_2$  リード2からデバイスへの確率密度の流れの逆 →

定常状態ではリード1からデバイスに流入する電流( $i_1$ )とデバイスからリード2への電流( $-i_2$ )が等しい。確率密度の流れと電流の向きは逆であることに注意。

$$\dot{i}_1 = -\dot{i}_2$$

# 電流の表式 #1

$\psi_d$  and  $\psi_2$  は孤立リードの波動関数  $\phi_1$  を用いて書き直すことができる。

$$|\psi_d\rangle = G_d \tau_1^\dagger |\phi_{1n}\rangle \quad |\psi_2\rangle = g_2 \tau_2 G_d \tau_1^\dagger |\phi_{1n}\rangle$$

この時、リード1からリード2への電流は書き換えられる。

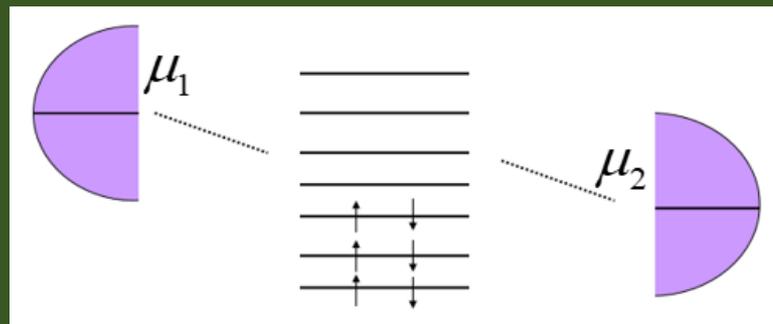
$$\begin{aligned} i_{1 \rightarrow 2} &= -\frac{ie}{\hbar} \left( \langle \psi_2 | \tau_2 | \psi_d \rangle - \langle \psi_d | \tau_2^\dagger | \psi_2 \rangle \right) \\ &= -\frac{ie}{\hbar} \left( \langle \phi_{1n} | \tau_1 G_d^\dagger \tau_2^\dagger g_2^\dagger \tau_2 G_d \tau_1^\dagger | \phi_{1n} \rangle - \langle \phi_{1n} | \tau_1 G_d^\dagger \tau_2^\dagger g_2 \tau_2 G_d \tau_1^\dagger | \phi_{1n} \rangle \right) \\ &= -\frac{ie}{\hbar} \langle \phi_{1n} | \tau_1 G_d^\dagger \tau_2^\dagger (g_2^\dagger - g_2) \tau_2 G_d \tau_1^\dagger | \phi_{1n} \rangle \quad a_2 = -i(g_2^\dagger - g_2) \\ &= \frac{e}{\hbar} \langle \phi_{1n} | \tau_1 G_d^\dagger \Gamma_2 G_d \tau_1^\dagger | \phi_{1n} \rangle \quad \Gamma_2 = \tau_2^\dagger a_2 \tau_2 \end{aligned}$$

## 電流の表式 #2

リード1の全ての状態の寄与を加えて、リード1からリード2への電流が得られる。

$$\begin{aligned} I_{1 \rightarrow 2} &= 2 \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E, \mu_1) \sum_n \delta(E - E_n) \langle \phi_{1n} | \tau_1 G_d^\dagger \Gamma_2 G_d \tau_1^\dagger | \phi_{1n} \rangle \\ &= \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E, \mu_1) \text{Tr} (G_d^\dagger \Gamma_2 G_d \Gamma_2) \end{aligned}$$

各リードからの寄与を足し合わせ、全電流の表式が得られる。



$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE (f(E, \mu_1) - f(E, \mu_2)) \text{Tr} (G_d^\dagger \Gamma_2 G_d \Gamma_2) \leftarrow \text{透過率}$$

# 散乱問題からの定式化：まとめ

系全体の波動関数は入射波で表現できる。

$$|\psi_1\rangle = (1 + g_1 \tau_1 G_d \tau_1^\dagger) |\phi_{1,n}\rangle$$

$$|\psi_d\rangle = G_d \tau_1^\dagger |\phi_{1,n}\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = g_2 \tau_2 G_d \tau_1^\dagger |\phi_{1,n}\rangle$$

デバイスの電子密度は各リードからの入射波の寄与の総和

$$\rho = \frac{2}{2\pi} \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E, \mu_i) G_d \Gamma_i G_d^\dagger$$

非平衡  
グリーン関数

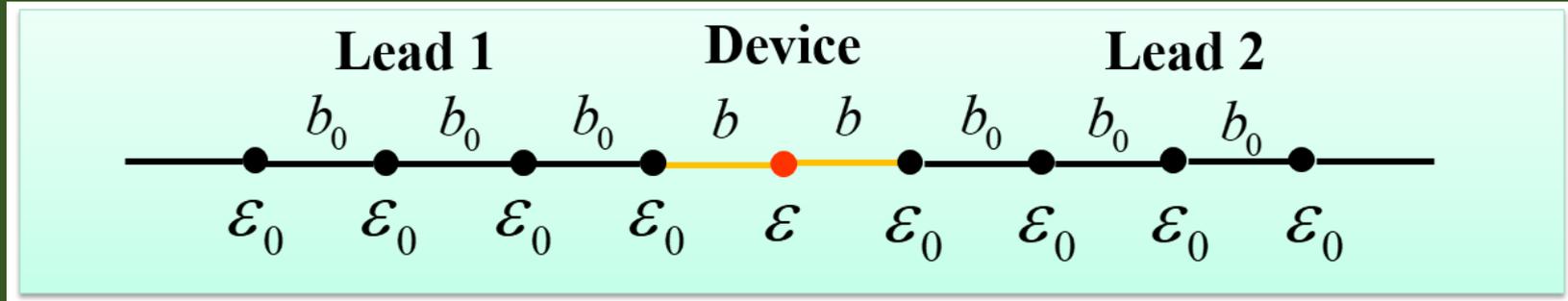
電流は確率密度の流れを考慮し、次式で与えられる。 Landauerの公式

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE (f(E, \mu_1) - f(E, \mu_2)) \text{Tr}(G_d^\dagger \Gamma_2 G_d \Gamma_2)$$

透過率

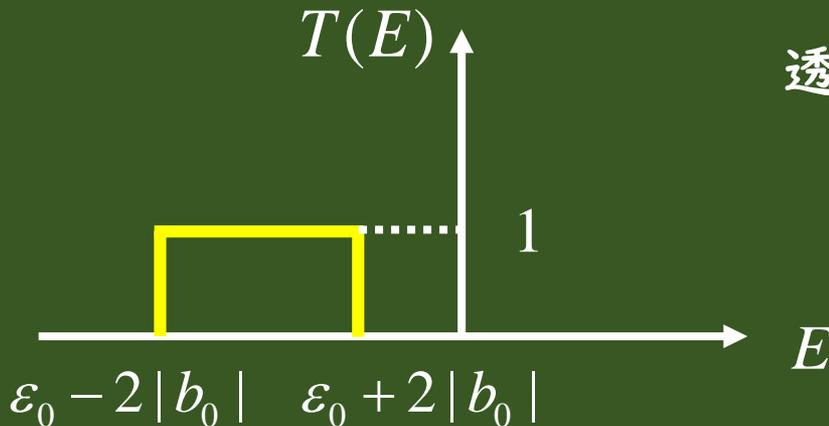
# 一次元鎖のモデル

一次元鎖のモデルは解析的に取り扱うことが可能である。



表面グリーン関数  $g_1(Z) = g_2(Z) = \frac{Z - \varepsilon_0 - \sqrt{(Z - \varepsilon_0)^2 - 4b_0^2}}{2b_0^2}$

自己エネルギー  $\Sigma_1(Z) = \Sigma_2(Z) = \frac{b^2}{2b_0^2} \left( Z - \varepsilon_0 - \sqrt{(Z - \varepsilon_0)^2 - 4b_0^2} \right)$



透過率

$$T(E) = \text{Tr}(G_d^\dagger \Gamma_2 G_d \Gamma_1) = 1$$

$$\varepsilon_0 - 2|b_0| < E < \varepsilon_0 + 2|b_0|$$

$$T(E) = 0 \quad \text{Otherwise}$$

# 量子化コンダクタンス

Landauerの公式

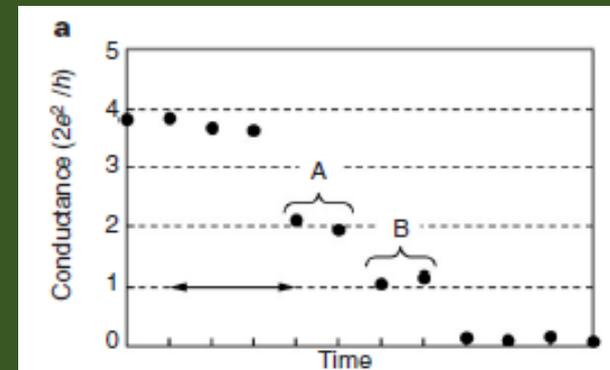
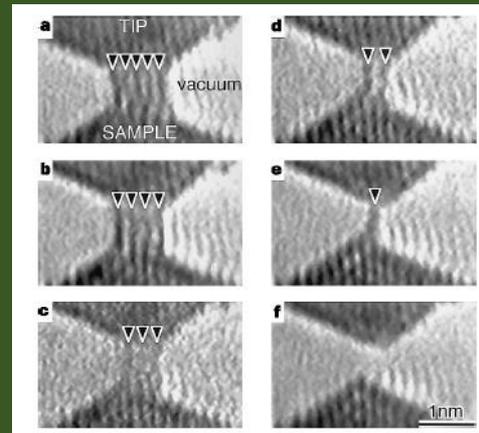
$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE (f(E, \mu_1) - f(E, \mu_2)) T(E)$$

低バイアス下でテイラー展開すれば、次式が得られる。

$$I \simeq V \left( T(\mu) \frac{2e^2}{h} \right) \quad G = T(\mu) G_0$$

これより、量子化コンダクタンスの表式が得られる。

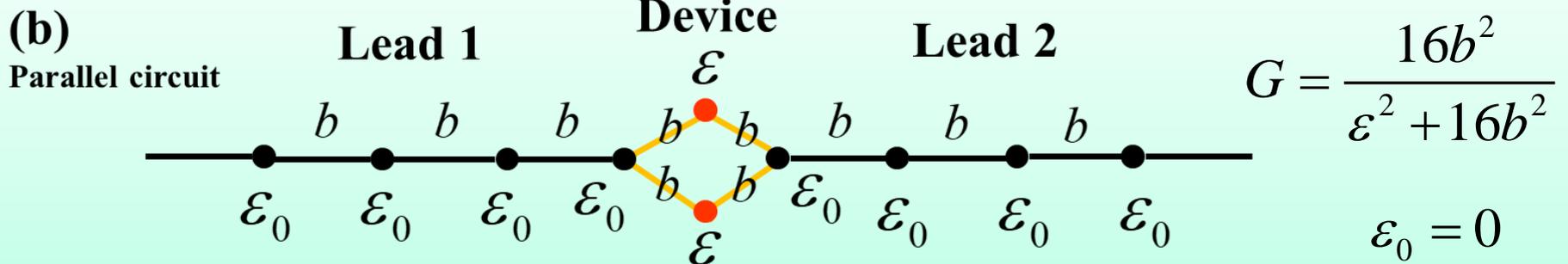
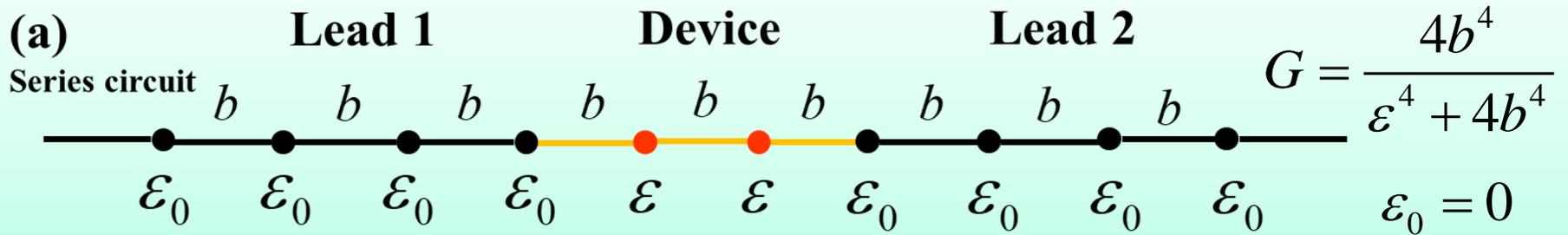
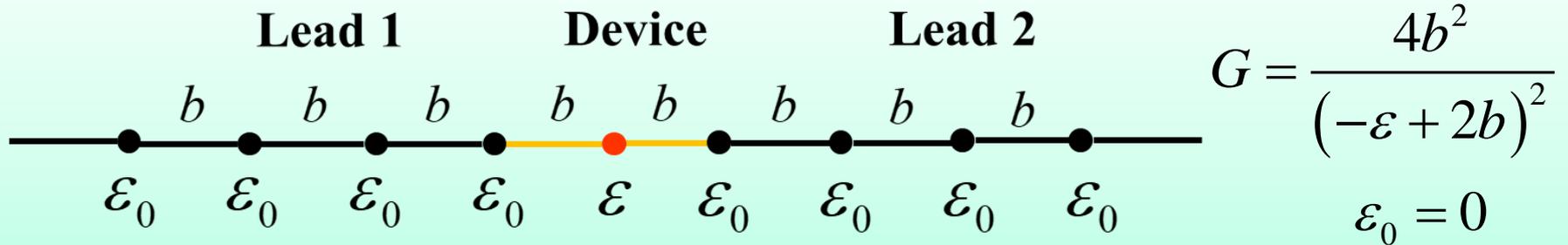
$$G_0 = \frac{2e^2}{h}$$



Takayanagi et al.,  
Nature **395**, 780 (1998).

# 一次元鎖の直列回路と並列回路

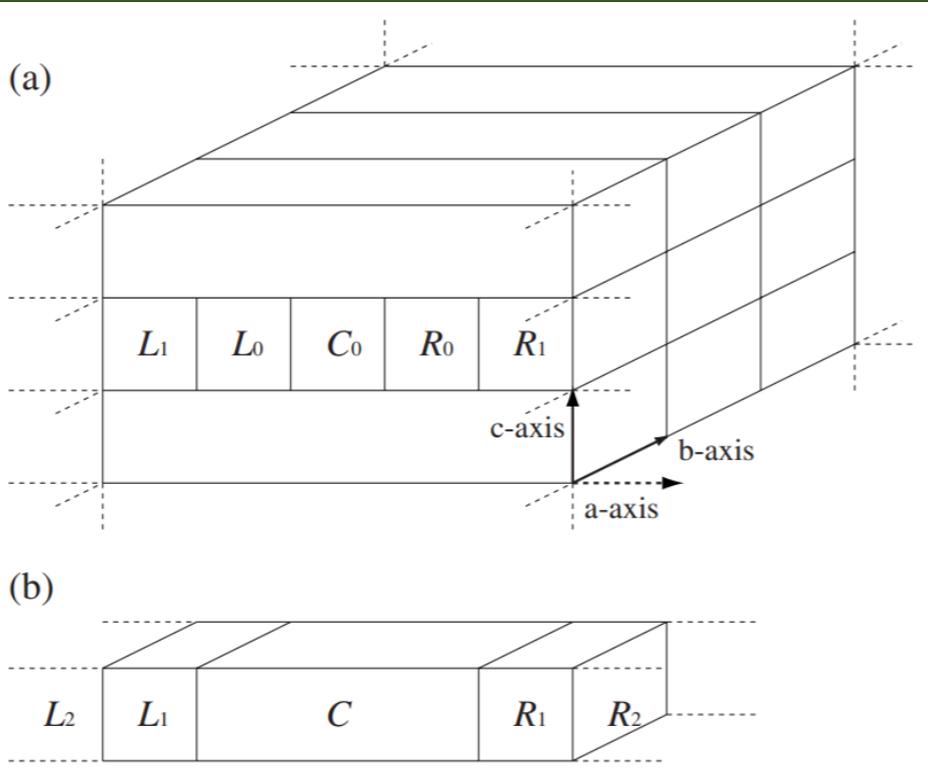
直列回路と並列回路のコンダクタンス $G$ は解析的に計算できる。  
オームの法則は成り立っていない。



# 三次元への拡張

bc面内には周期性を仮定、a軸方向には周期性を仮定しない。

したがってbc面ではBloch波動関数となる。



$$\psi_{\sigma\nu}^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \sum_{i\alpha} c_{\sigma\nu,i\alpha}^{(\mathbf{k})} \phi_{i\alpha}(\mathbf{r} - \tau_i - \mathbf{R}_n),$$

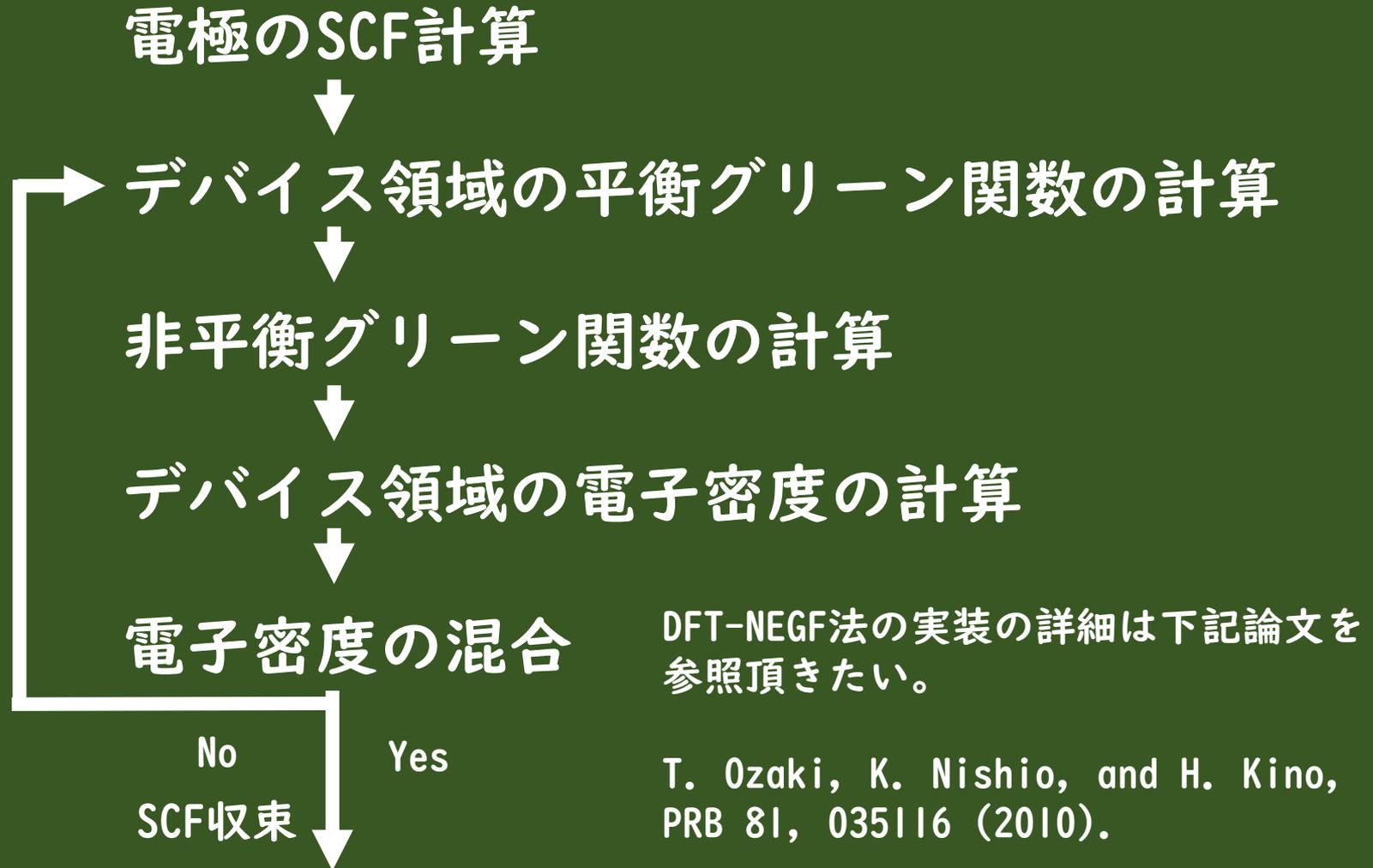
一次元問題に還元される。

$$H_{\sigma}^{(\mathbf{k})} c_{\sigma\nu}^{(\mathbf{k})} = \varepsilon_{\sigma\nu}^{(\mathbf{k})} S^{(\mathbf{k})} c_{\sigma\nu}^{(\mathbf{k})},$$

ハミルトニアンはブロック帯行列

$$H_{\sigma}^{(\mathbf{k})} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & 0 \\ \ddots & H_{\sigma,L_1}^{(\mathbf{k})} & H_{\sigma,L_1 C}^{(\mathbf{k})} & & \\ & H_{\sigma,CL_1}^{(\mathbf{k})} & H_{\sigma,C}^{(\mathbf{k})} & H_{\sigma,CR_1}^{(\mathbf{k})} & \\ & & H_{\sigma,R_1 C}^{(\mathbf{k})} & H_{\sigma,R_1}^{(\mathbf{k})} & \ddots \\ 0 & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

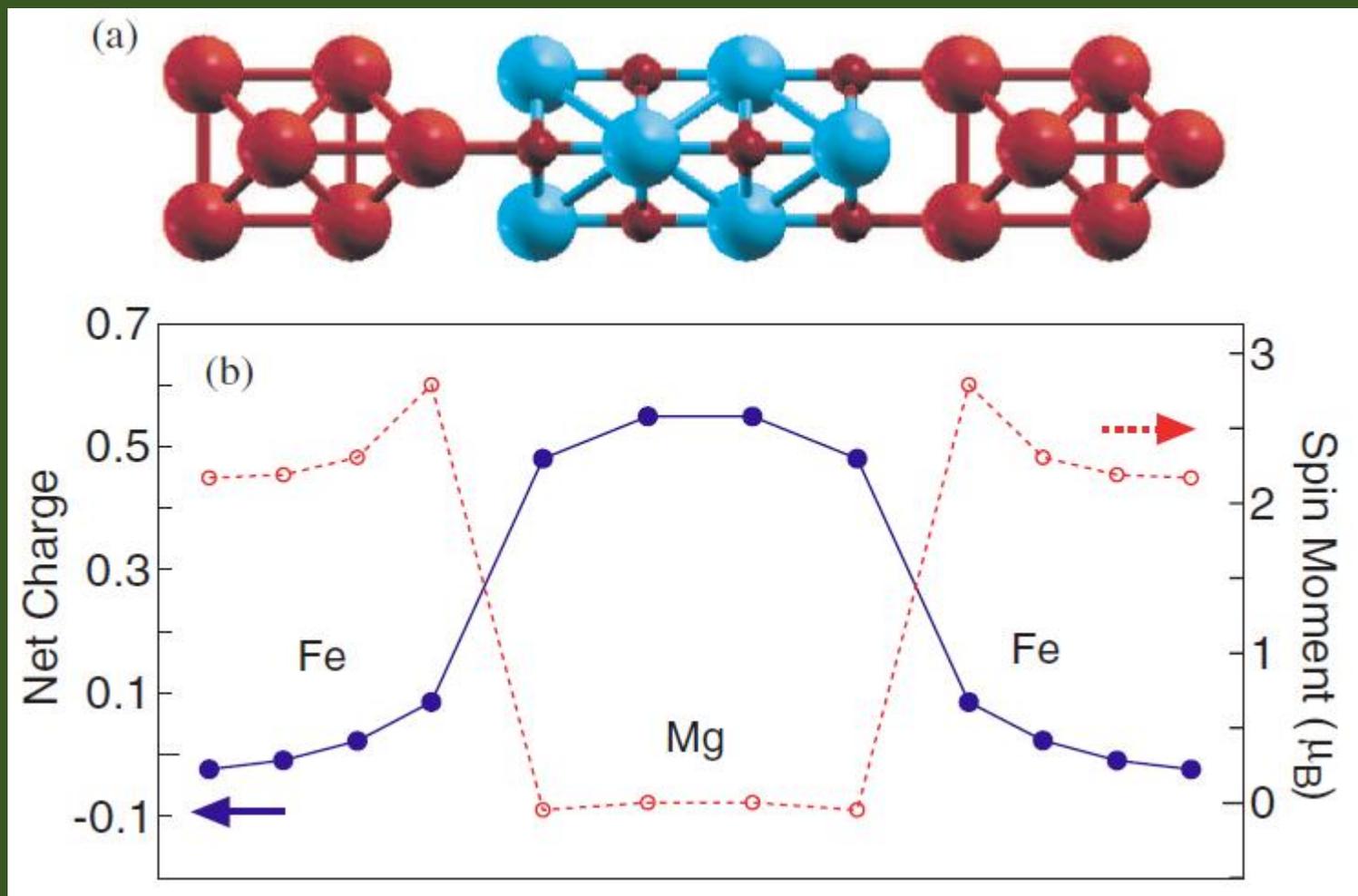
# DFT-NEGF法の実装



透過率の計算、電流の計算、固有チャネルの計算

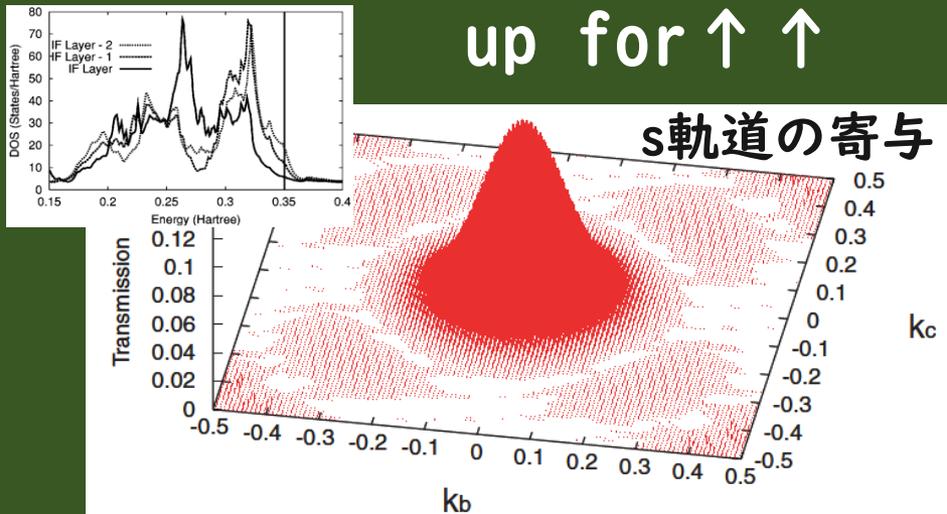
# Fe|MgO|Fe (トンネル磁気抵抗素子)

Fe|MgOの界面において電荷移動と鉄原子の磁気モーメントの増大が見られる。



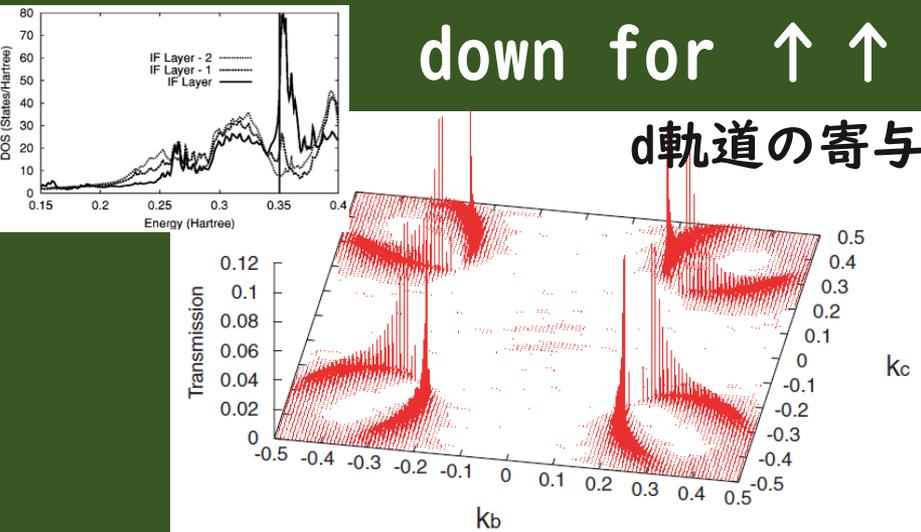
# 透過率のk-依存性 (Fe | MgO | Fe)

up for ↑ ↑

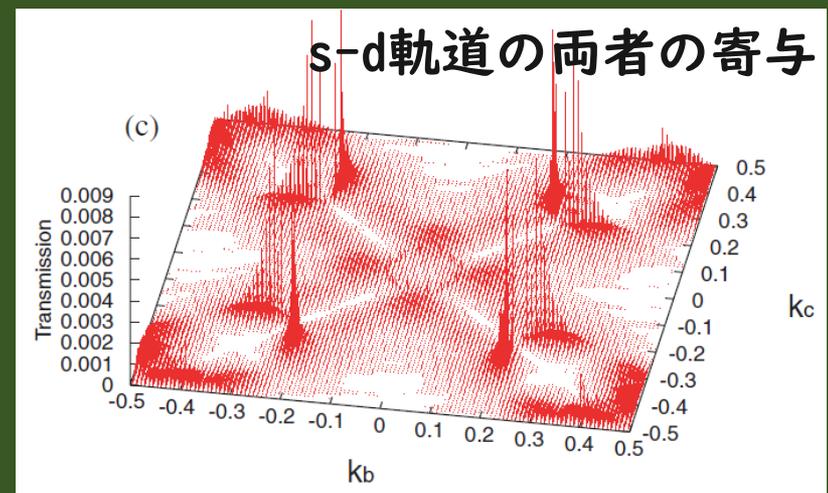


- 平行スピン配列の場合にはupスピンはs軌道を介して、downスピンはd軌道を介してトンネル電流が生じている。これは局所状態密度からも分かる。
- 反平行スピン配列の場合にはsからd軌道、もしくはdからs軌道を介してトンネル電流が生じる。

down for ↑ ↑

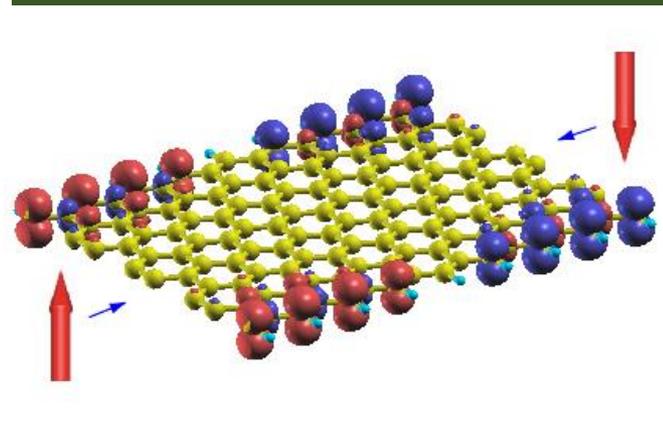
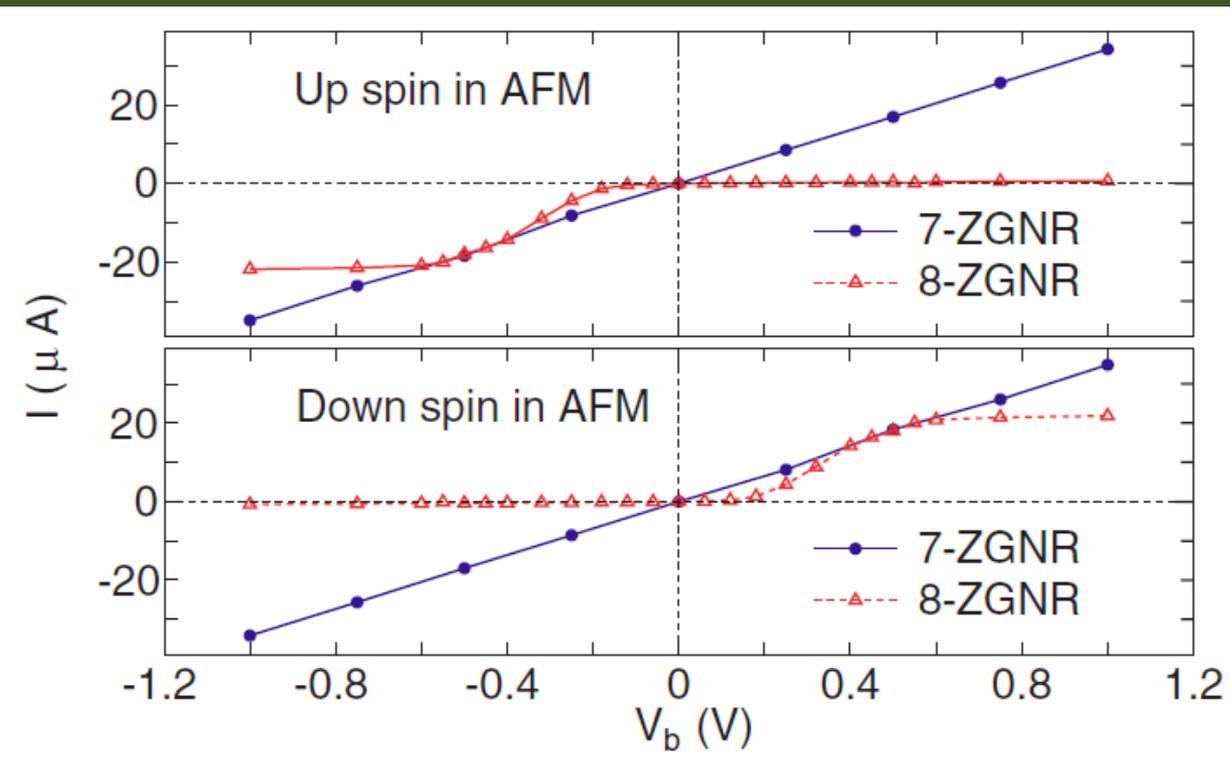


up for ↑ ↓



# グラフェンナノリボン磁壁による二重スピンフィルタ効果

Rectification ratio at 0.4V: 44.3

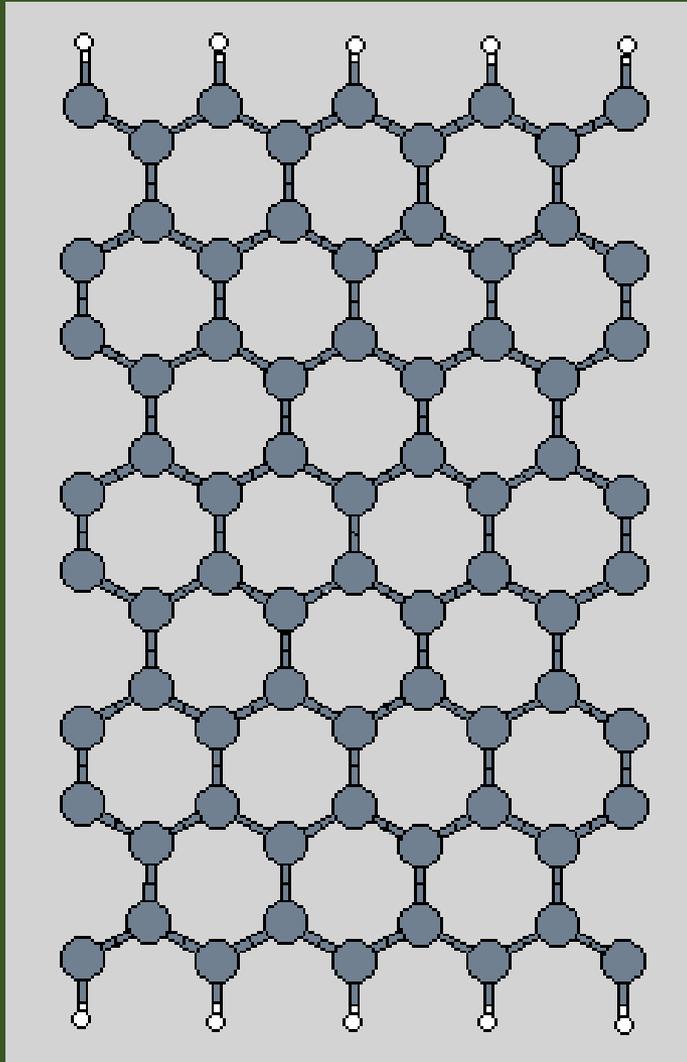


PRB 81, 075422 (2010).

Upスピンは右から左に  
Downスピンは左から右に透過できる。  
→ **二重(dual)スピンフィルタ効果**

The same result is obtained for 6-ZGNR and 10-ZGNR.

# n-ZGNRの構造



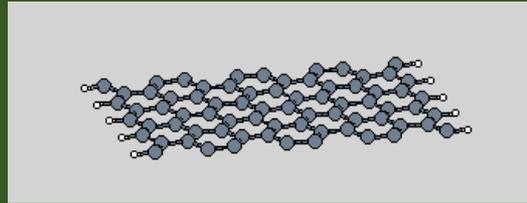
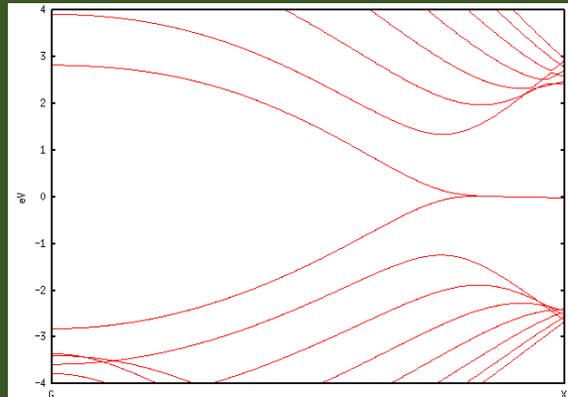
1  
2  
3  
4  
5  
6  
7  
8

n:  
サブ格子内の  
炭素原子数

左図の場合は  
8-ZGNRとする。

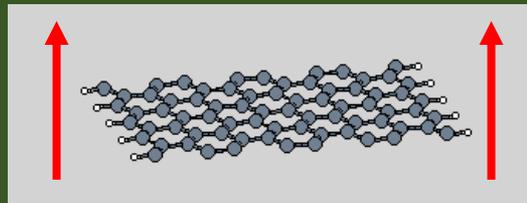
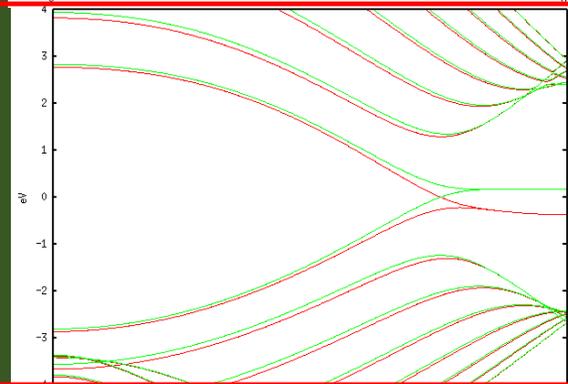
Zigzag端は水素終端

# 8-ZGNRのバンド構造

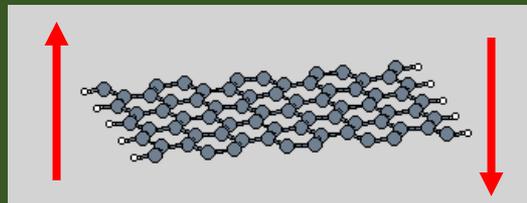
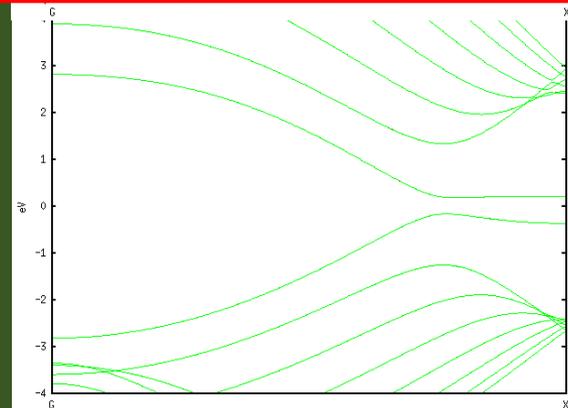


meV/unit cell

52.7



5.7



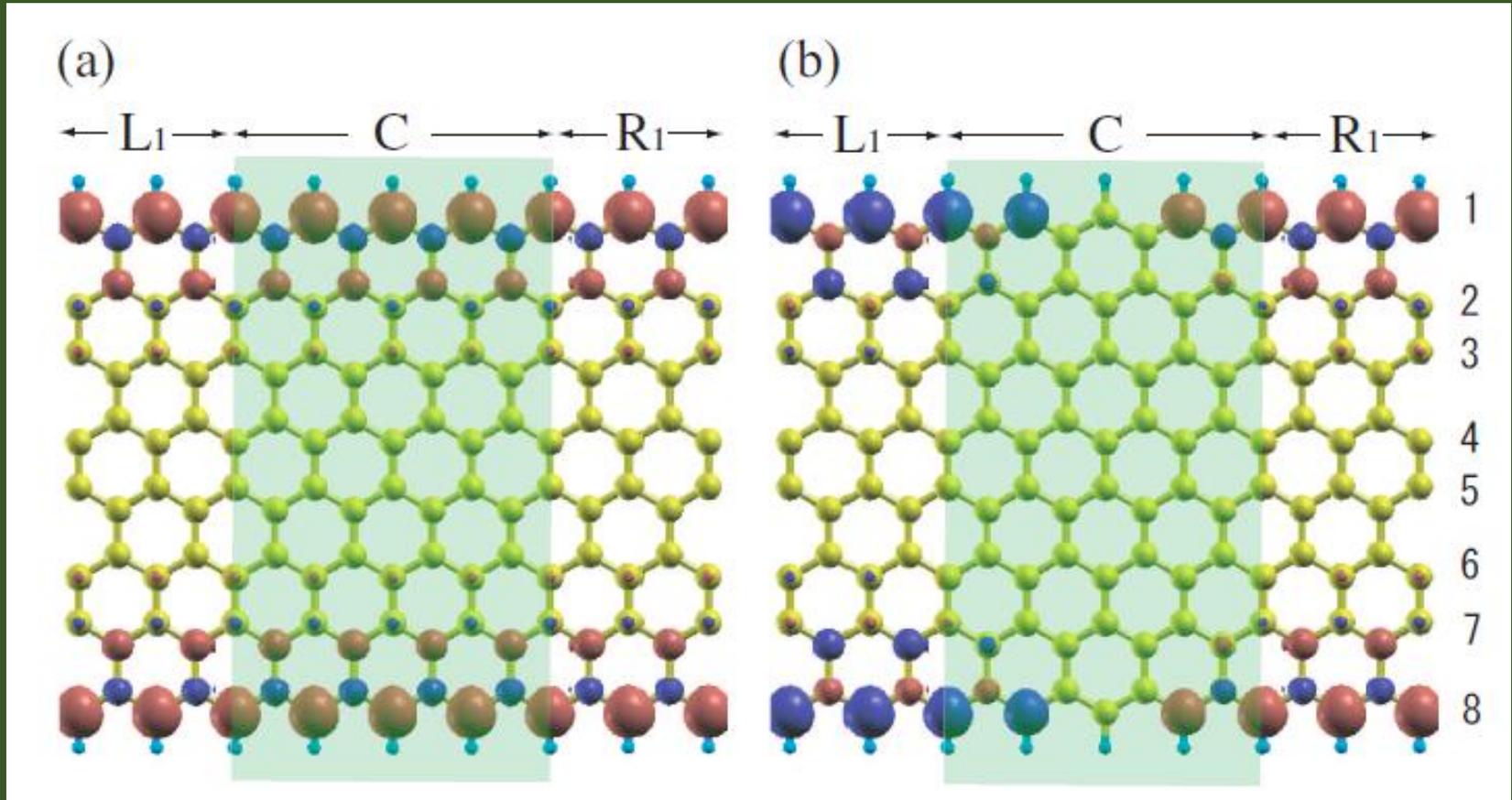
0

奇数の場合にも類似した結果となる

# グラフェンナノリボンの磁壁

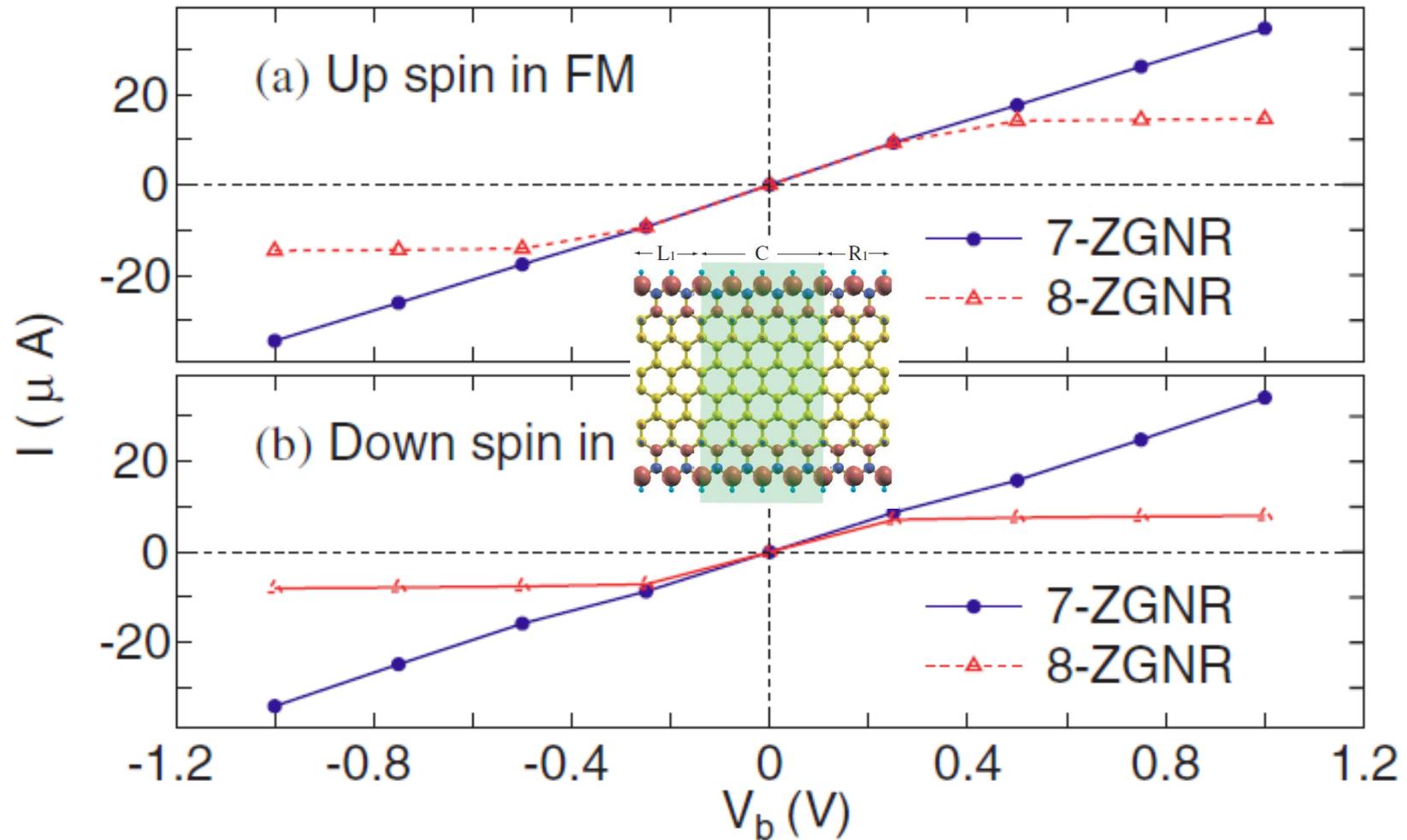
強磁性

反強磁性



ジグザクグラフェンナノリボンの端は自発的に磁気分極する。磁壁を導入すれば右図となる。

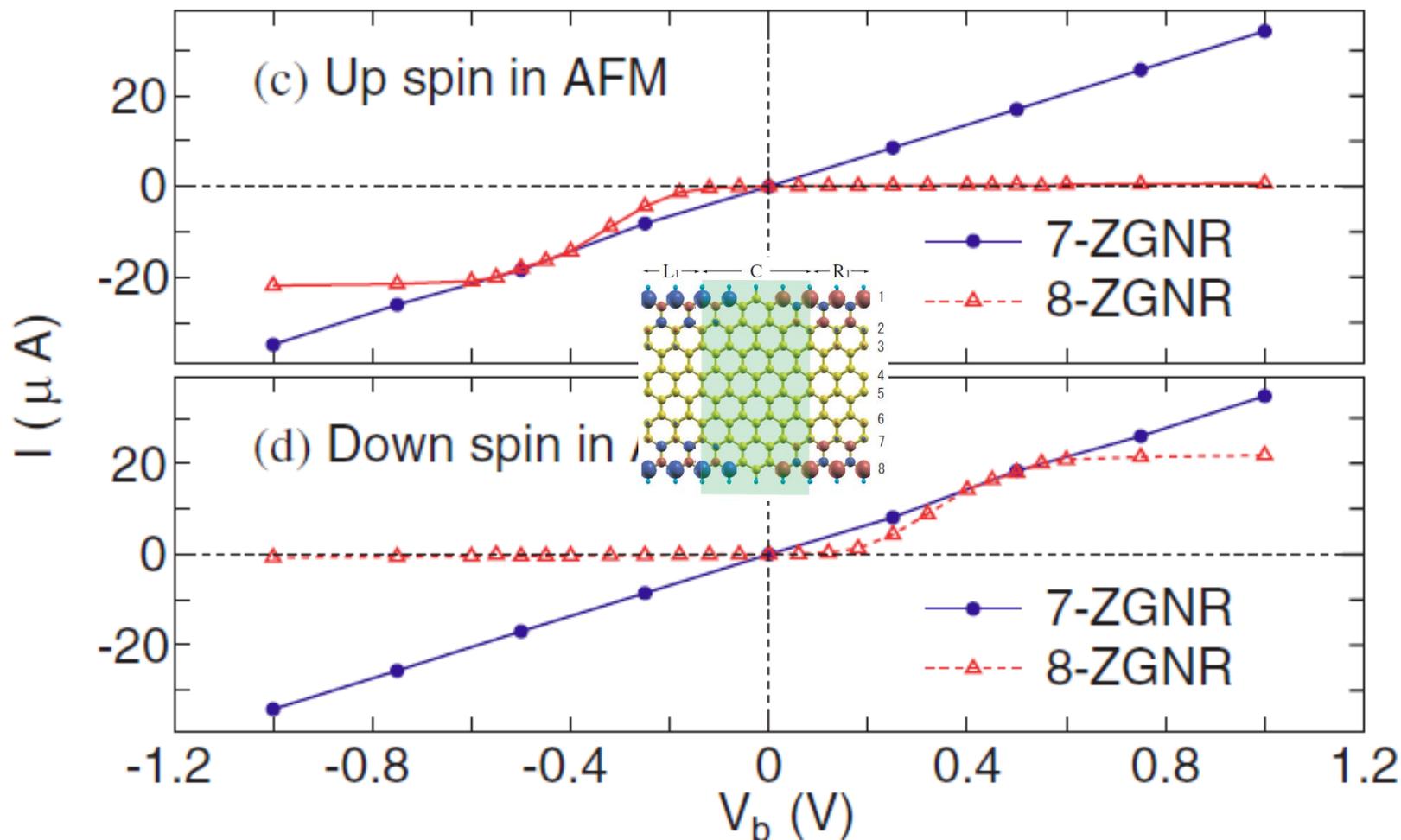
# 磁壁なし(FM)におけるI-V



7-ZGNR: 線形依存

8-ZGNR:  $V_b = |0.4| \text{V}$ 付近で飽和

# 磁壁あり (AFM) における I-V

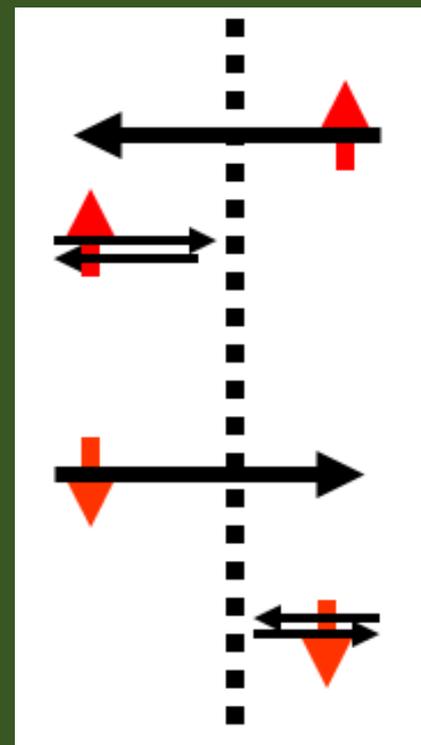
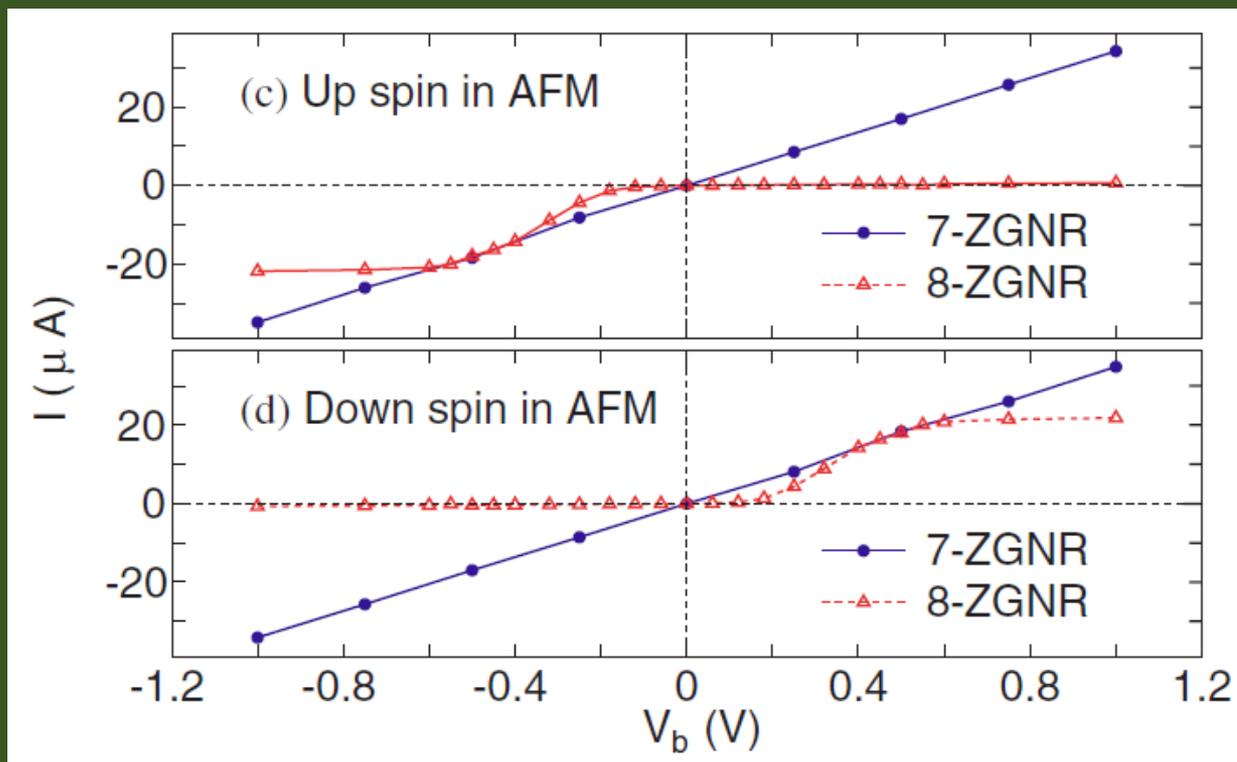


7-ZGNR: 線形依存

8-ZGNR: スピンダイオード効果

# 磁壁あり (AFM) におけるスピン整流効果

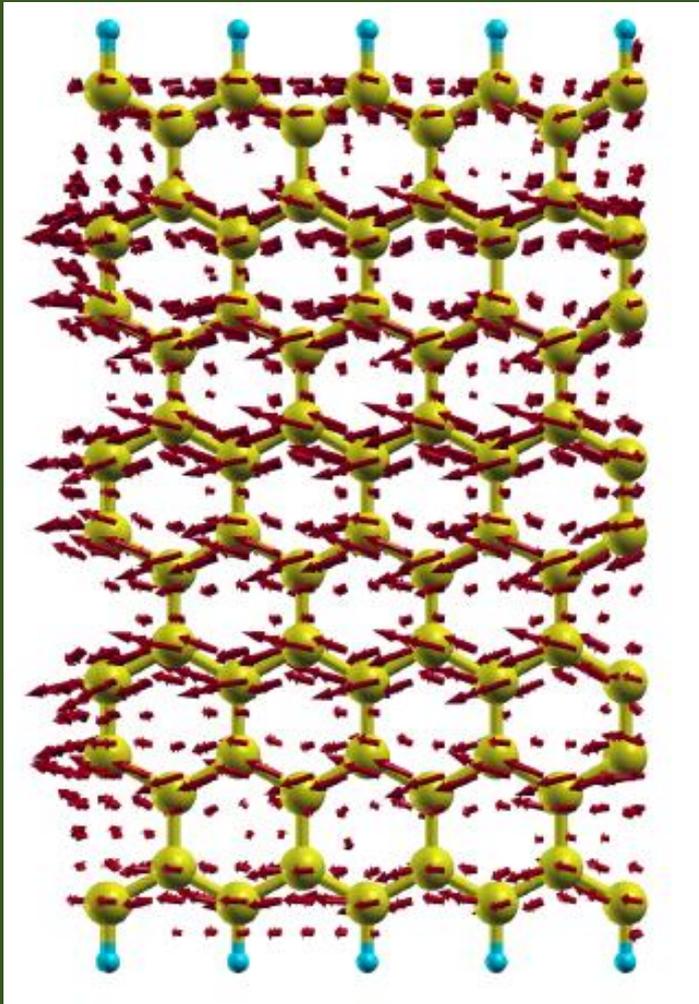
スピン整流比 ( $V=0.4V$ ) = 44.3



Upスピンは右から左に  
Downスピンは左から右に透過できる。  
→ **二重(dual)スピンフィルター効果**

# 実空間電流密度

ジグザググラフェンナノリボンの  
実空間電流密度



0.3Vを印加し計算

連続の方程式から導出される実空間、  
実エネルギー表示の電流密度(確率の流れ)を計算

C. Li, L. Wan, Y. Wei, and J. Wang,  
Nanotechnology 19, 155401 (2008).

$$\mathbf{J}(r) = \mathbf{J}_{\text{Loc}}(r) + \mathbf{J}_{\text{NL}}(r)$$

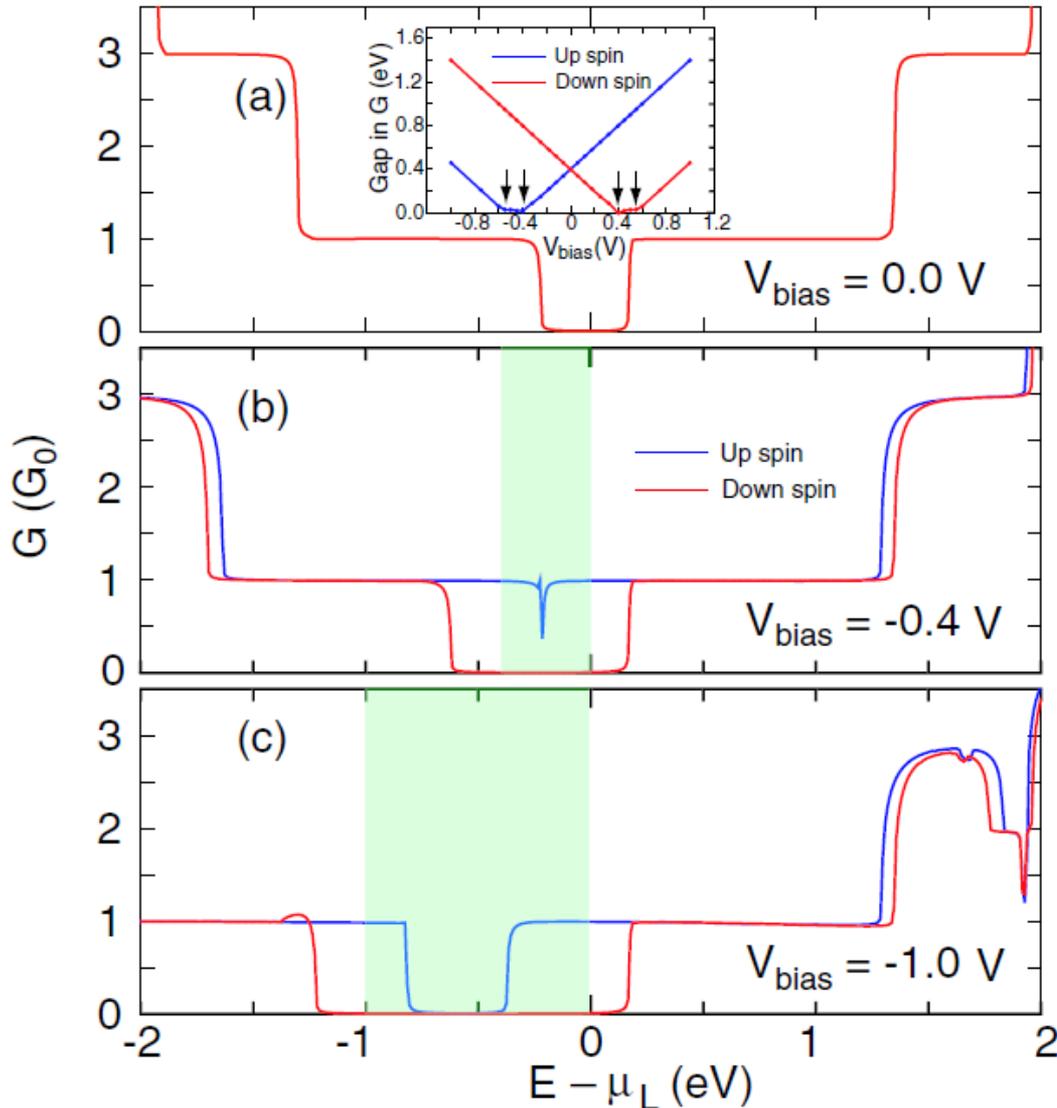
$$\mathbf{J}_{\text{Loc}}(r) = \int \frac{dE}{2\pi} \mathbf{J}_{\text{Loc}}(r, E)$$

$$\mathbf{J}_{\text{Loc}}(r, E) \equiv i[(\nabla_r - \nabla_{r'})D_R(r, r', E)]_{r'=r} \{f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)\}$$

$$D_R(r, r', Z) \equiv \iint d^3r_1 d^3r_2 G_C(r, r_1, Z) \Gamma_R(r_1, r_2, Z) G_C(r_2, r', Z^*)$$

ハミルトニアン<sup>の</sup>演算子に非局所項が含まれていると補正項 $\mathbf{J}_{\text{NL}}$ が生じる。  
この項は電流の保存則から導出される  
Poisson方程式に類似した方程式を解く  
ことで計算される。

# 8-ZGNRのコンダクタンス



金属的なバンド構造に係わらず、ゼロバイアス下でコンダクタンスギャップがある。

-0.4Vでup スピンのコンダクタンスギャップが消失。一方、ダウンスピンのギャップは単調に大きくなる。薄緑は $\Delta f$ が有限の領域である。

-1.0Vではどちらの場合にもギャップが単調に大きくなっていることが分かる。

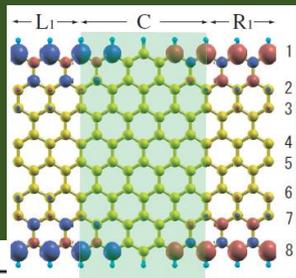
# オフセットを考慮した8-ZGNRのバンド図

青網掛:

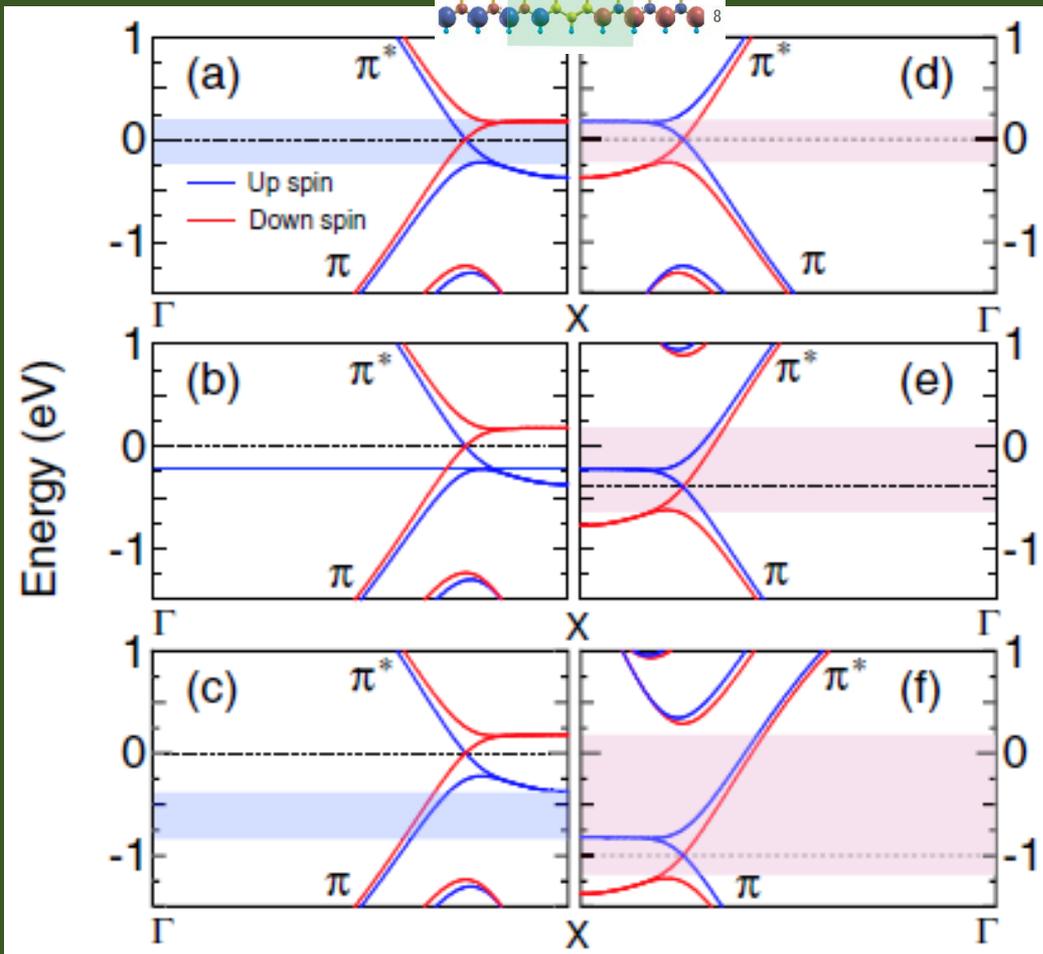
up スピンのコンダクタンスギャップ

紫網掛:

downスピンのコンダクタンスギャップ



網掛領域は左と右で $\pi$ と $\pi^*$ のみが重なっている領域に対応している。



0 Vに対応

-0.4 Vに対応

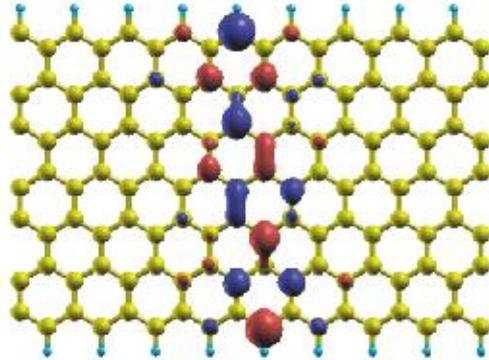
-1.0 Vに対応

# $\pi$ 及び $\pi^*$ 状態のワニア関数

Marzariの方法により第一原理的にワニア関数を計算

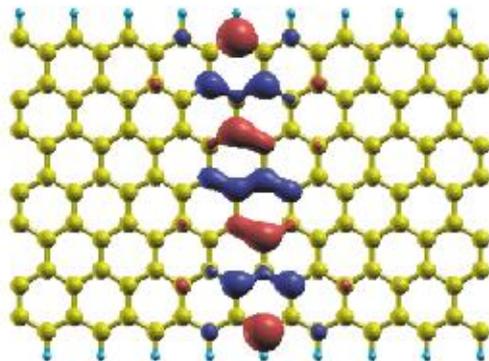
7-ZGNR

$\pi^*$



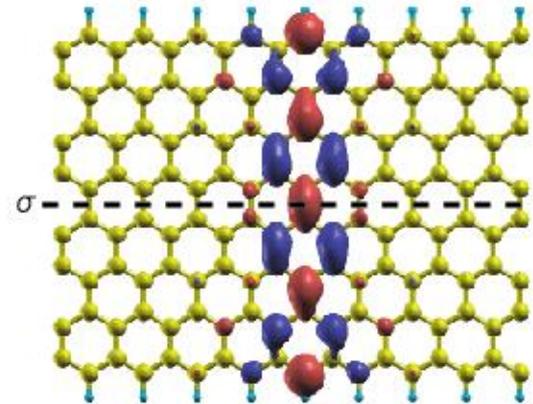
対称でも反対称でもない

$\pi$

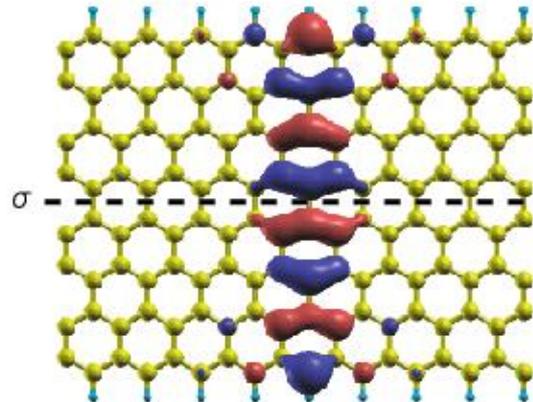


8-ZGNR

$\sigma$

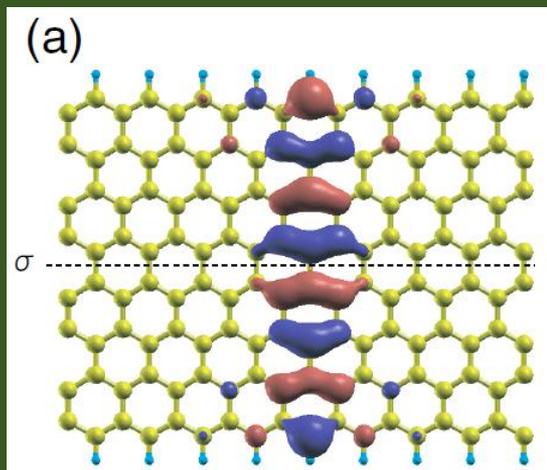


↑ 対称      ↓ 反対称

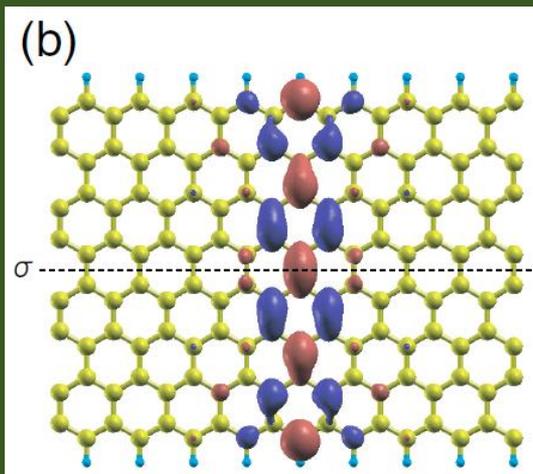


# 8-ZGNRの $\pi$ と $\pi^*$ のワニア関数

$\pi$  のワニア関数



$\pi^*$  のワニア関数



8-ZGNRの場合には  $\pi$  軌道は  $\sigma$  鏡映対称面に対して反対称、 $\pi^*$  軌道は対称であるため両者間のホッピング積分は消える。

ワニア関数を用いて評価されたホッピング積分

TABLE I: Tight-binding parameters (eV) evaluated by WFs denoted by *WF*, and a fitting, denoted by *fitted*, for the  $\pi$  and  $\pi^*$  states of the non-spin polarized 8-ZGNR, where  $\varepsilon$  is the on-site energy, and  $h_1, h_2 \dots$  the nearest and the second nearest neighbor hopping integrals, and so on. The Fermi level is set to zero.

	$\varepsilon$	$h_1$	$h_2$	$h_3$	$h_4$
$\pi$ (WF)	-1.3609	-0.7660	0.0076	0.0529	-0.0352
$\pi^*$ (WF)	1.4486	0.7708	-0.0400	-0.0513	0.0269
$\pi$ (fitted)	-1.4165	-0.7083	0	0	0
$\pi^*$ (fitted)	1.4135	0.7067	0	0	0

7-ZGNRの場合には対称でも反対称でもないため、 $\pi$  と  $\pi^*$  の積分は残る。

波動関数の対称性に関する議論はZ. Li et al., PRL 100, 20682 (2008)も参照のこと。

# Decoupled two band TB モデルによるI-V

フィッティングによって得られたTBモデルにおいては電流は次式で与えられる。

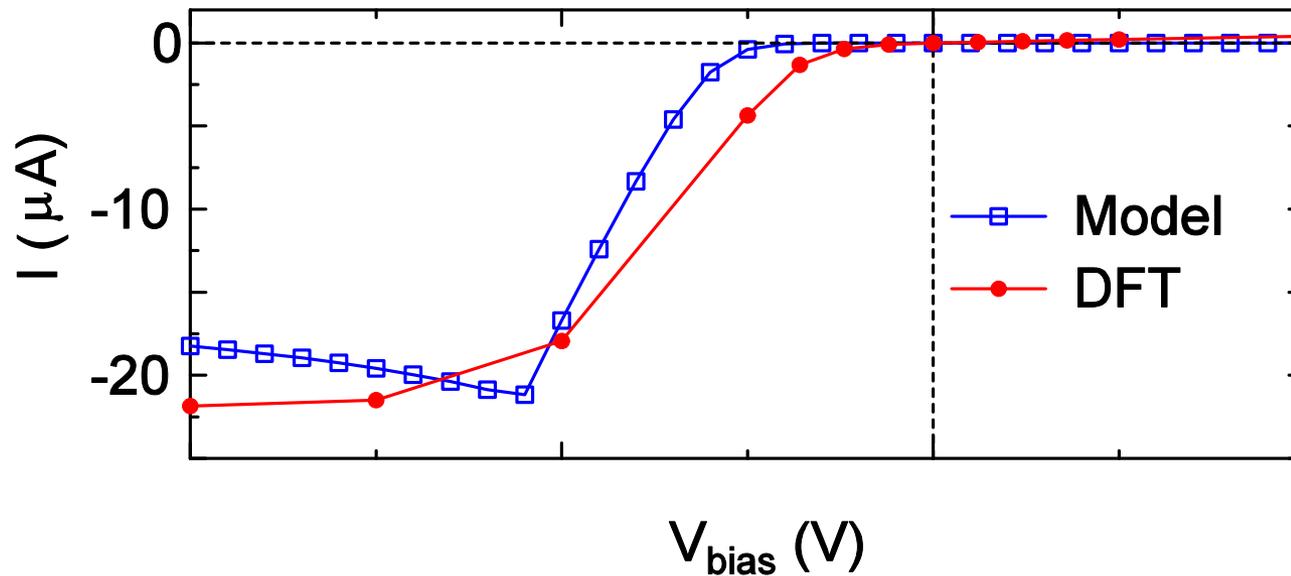
$$T(E) = \frac{4S_L(E)S_R(E)}{[S_L(E) + S_R(E)]^2}$$

$$I = \int dE (f_L - f_R) T(E),$$

$$S_L(E) = \sqrt{4h_1^2 - \left[ E - \left( \varepsilon - \frac{1}{2}\Delta_x \right) \right]^2},$$

$$S_R(E) = \sqrt{4h_1^2 - \left[ E - \left( \varepsilon + \frac{1}{2}\Delta_x + V_{\text{bias}} \right) \right]^2},$$

Upスピン状態に対するI-V



第一原理計算を良く再現していることが分かる。

# まとめ

---

非平衡グリーン関数法を散乱問題の立場から定式化し、理論の枠組みとDFT法との融合方法を議論した。応用計算の解析事例を通して、伝導特性を理解するための手続きを学んだ。

- 拡散/バリスティック伝導
- バリスティック伝導の実験例
- 非平衡グリーン関数法の特徴
- 散乱問題からの定式化
- 量子化コンダクタンス
- 一次元鎖のモデル
- 三次元系への拡張とDFT-NEGF法
- トンネル磁気抵抗素子: Fe|MgO|Fe
- グラフェンナノリボンの伝導特性

# 質問時間

---