

金属ナノワイヤ間の分散力相互作用における特異な非加算性寄与の解明

Anomalous non-additive dispersion interactions in systems of three one-dimensional wires

前園涼

Ryo Maezono

北陸先端科学技術大学院大学・情報科学研究科

School of Information Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology,
 Nomi Ishikawa 923-1292

3本のワイヤ間に作用する分散力相互作用を取扱い、そこでの非加算性寄与について解析を行った[1]。1次元ワイヤは、「甲、水素原子鎖」、「乙、1次元電子ガス」としてモデル化し、甲については、SAPT(対称性を考慮した密度汎関数法による摂動的解析)法、乙については、量子拡散モンテカルロ法を用いて解析した。分散力評価における量子多体相関について、乙を用い、恣意的近似を可能な限り排除した高い信頼性を以て定量評価する一方、甲では、ダイマー化パラメタによる系の伝導性調整や、摂動論による機構の切り分けを行い、両者を相補的に用いて、従来理論による知見との差異を明らかにした。非加算性寄与に関する従来理論としては、3双極子間相互作用を足し上げるAxilrod-Teller-Muto理論[2,3]がワイヤ間距離 d の逆7乗での冪減衰を帰結するが、我々の算定では、Axilrod-Teller-Muto型と異なり、非加算性寄与は、より長距離の冪を持つことが明らかになった。量子拡散モンテカルロ法から見積もられた減衰冪 $\delta E \sim d^{-\alpha}$ は、 $\alpha = 2.4$ ($r_s = 1$) から $\alpha = 2.9$ ($r_s = 10$)の範囲であり、これら結果は、摂動項の多重極展開[4]において最長距離項として残るチャージ・フロー項のべきと良く一致する一方、Axilrod-Teller-Muto理論の逆7乗のそれとは著しく異なる事が明らかになった。

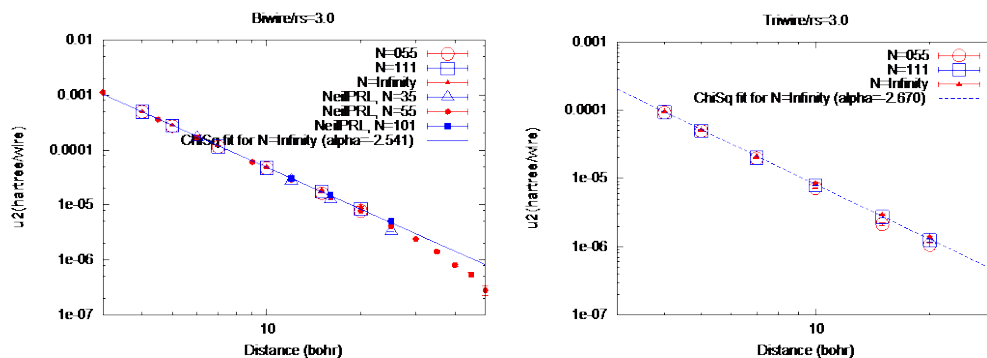


Figure. : Asymptotic behavior of the bi-wire interactions u_2 (left panel) and the non-additive contribution u_3 (right panel) at $r_s=3.0$

- [1] A.J. Misquitta, R. Maezono, N.D. Drummond, A.J. Stone, and R.J. Needs., to be appeared in Phys. Rev. B (2014).
- [2] P. M. Axilrod and E. Teller, J. Chem. Phys. 11, 299 (1943).
- [3] Y. Muto, Proc. Phys.-Math. Soc. Japan 17, 629 (1943).
- [4] H. C. Longuet-Higgins and L. Salem, Proc. R. Soc. A 259, 433 (1961).