



Title	ナノ構造の電気伝導特性に対する第一原理計算手法の開発
Author(s)	塚本, 茂
Citation	大阪大学, 2002, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/43464
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名	塚 本 茂
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	第 1 6 9 9 5 号
学 位 授 与 年 月 日	平 成 14 年 3 月 25 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科精密科学専攻
学 位 論 文 名	ナノ構造の電気伝導特性に対する第一原理計算手法の開発
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 広瀬喜久治 (副査) 教 授 青野 正和 教 授 遠藤 勝義 教 授 梅野 正隆 教 授 片岡 俊彦 教 授 森 勇藏 教 授 森田 瑞穂 教 授 芳井 熊安 助教授 後藤 英和 助教授 桑原 裕司

論 文 内 容 の 要 旨

本研究は、従来不可能であった、ナノ構造の電気伝導特性を高精度に計算することが可能な手法の開発を行うとともに、ナノワイヤーの電気伝導度や、STM 測定時のトンネル電流の計算を行い、それらの電気伝導特性を理論的に解析することを目的とした。以下に、本論文の要旨をまとめる。

第1章では、本研究の目的と背景について述べた。

第2章では、本研究で開発した計算手法の基礎となる量子力学と、密度汎関数理論について説明した。

第3章では、本研究で開発した計算手法について説明した。まず、計算モデルには、半無限に続く金属結晶を電極として扱い、系に流入・流出する電子を扱うことに成功した。そして、波動関数を決定する2階微分方程式を積分方程式に変換することで、波動関数を容易に得ることが可能であることを示した。また、半無限固体を含めた系におけるポテンシャルやトータルエネルギー、原子核に作用する力について定式化を行った。最後に、系の電気伝導特性を導くための Landauer の理論について解説した。

第4章では、本計算手法が採用した、計算の高速化技法について説明した。前章で述べた積分方程式を解くにあたり、共役勾配法を採用し、波動関数が高速に求まることを示した。積分方程式が変数分離できることを利用して、数値計算にかかる時間をさらに短縮することに成功した。

第5章では、ナトリウムのナノワイヤーの電気伝導特性を計算した。その計算結果は、実験によって得られた電気伝導特性や、理論的に予言されている電気伝導度の挙動とよく一致しており、本計算手法の有用性が示された。また、ナノワイヤーの両端に電位差を与えた場合には、非線形な電流電圧特性が確認され、この原因について電子論的な立場から詳細な議論を行い、そのメカニズムを明らかにした。

第6章では、STM 測定系を模したモデルを用いて、探針と試料表面との相互作用や、電界の存在による影響を考慮した上での、STM 像のシミュレーションを行った。その結果、計算によって得られたシリコン表面の STM 像は、実験によって得られた STM 像と一致した。また、探針と試料表面との距離に対して、トンネル電流が指数関数的に変化するという事実を、計算によって確認した。

第7章では、本研究で得られた成果をまとめ、本論文の総括を行った。

論文審査の結果の要旨

近い将来、現実になるであろうナノデバイスにおける、原子スケールの素子の電気的特性には、電子の波動性や粒子性が顕著になり、従来の古典電磁気学の予想を越える電子輸送現象が現れることが予想されまた実際に観測されている。このような原子スケールの素子に見られる特異な電気伝導特性についての研究は、近年、盛んに行われている。しかし、原子スケールという微細な領域に見られる現象の本質を実験のみで明らかにし、理解することは難しいために、計算機シミュレーションによって現象の本質の理解を深める必要がある。現在、電気伝導特性の計算対象物と、それに接続された一対の電極をひとつのモデルとして扱い、有限バイアスの下で電気伝導特性を理論的に得ることのできる、量子力学の第一原理に基づいた計算手法はほとんどない。その数少ない計算手法のひとつは、非局所項を含む擬ポテンシャルを採用することが困難であり、精度の頭打ちが懸念される。また、計算量が膨大であり、現実的なサイズのモデルの計算を行うことは困難である。本論文は、ナノ構造の電気伝導特性を、電極をも含めたモデルを用いて計算する手法を開発し、計算結果と実験結果との比較によって本計算手法の有用性を実証するとともに、ナノ構造の電気伝導特性の詳細な解析を行っているものであり、以下のような有用な成果を得ている。

- (1) ナノ構造と一対の電極を一体として扱うモデルにおいて、電子の波動関数が満たす微分方程式と境界条件は、一括して積分方程式に変換することができ、それを解くことで比較的容易に電子の波動関数を得ることができることを示している。また、そのようなモデルにおいて、トータルエネルギーや原子核に働く力の定式化を行っている。
- (2) 上記の積分方程式を解くにあたって、最も計算量が多く、計算機に負荷をかける部分の計算が変数分離可能であることを発見することによって、計算時間の大幅な減少に成功し、大規模なモデルの計算を可能にしている。
- (3) 開発されたプログラムを用いて、ナトリウムの原子細線の電気伝導特性を計算し、実験によって得られているナトリウム原子細線のコンダクタンスの量子的な挙動と比較することで、本計算手法の有用性を実証している。さらに、ナトリウム原子細線が非線形な電流電圧特性、そして負の微分コンダクタンスを持つことを示し、負の微分コンダクタンスが現れるメカニズムを局所状態密度から解明している。
- (4) STM 測定系に対して本計算手法を適用し、STM 測定時に流れるトンネル電流を有限バイアスの下で探針と試料表面の相互作用を考慮して計算し、Si(001)-p(2×2) 表面の STM 像を再現し、実験によって得られている STM 像と一致することを示している。また、探針と試料表面間の距離に対して、トンネル電流が指数関数的に変化することを理論的に実証している。

以上のように本論文は、ナノ構造の電気伝導特性に対する第一原理計算手法を確立し、その有用性の評価を行うとともに、ナノ構造における電気伝導特性の特異な挙動を理論的に示したもので、将来のナノデバイスの開発に寄与するところが多い。よって本論文は、博士論文として価値あるものと認める。