

Title	実空間差分法に基づく第一原理電気伝導特性計算手法の開発と応用
Author(s)	江上, 喜幸
Citation	大阪大学, 2007, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/48466
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、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について <a>〉 をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

氏名	えがみ よしゆき 江 上 喜 幸
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学位記番号	第 2 1 1 5 2 号
学位授与年月日	平成 19 年 3 月 23 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	実空間差分法に基づく第一原理電気伝導特性計算手法の開発と応用
論文審査委員	(主査) 教 授 広瀬喜久治 (副査) 教 授 安武 潔 教 授 森田 瑞穂 教 授 片岡 俊彦 教 授 桑原 裕司 教 授 山内 和人 教 授 渡部 平司 教 授 遠藤 勝義

論 文 内 容 の 要 旨

本研究は、ナノ構造体の電気伝導特性を高精度かつ効率的に計算するための第一原理計算手法を開発すること、およびこの開発手法を用いて実験的に観察される興味深い物理現象について理論的な研究を行い、本手法の有用性を示すとともに、これらの物理現象に量子力学的な見地からの解釈を与えることを目的とした。以下に本論文の各章ごとの要旨をまとめる。

第 1 章では、本研究の背景および動機、目的とその意義について述べた。

第 2 章では、第一原理に基づく電子状態計算および電気伝導特性計算を行うにあたって必要な量子力学における基礎知識や、本計算手法の基礎理論である密度汎関数理論について述べた。

第 3 章では、本研究で用いる電子状態計算手法および電気伝導特性計算手法に基づく実空間差分法について説明を行った。さらに、高精度電子状態計算を低コストで実行するための手法について述べ、最後に実際にナノ構造体の電子状態を求めるための手順と手法について述べた。

第 4 章では、半無限電極間に挟まれたナノ構造体における電気伝導特性を計算する手法について説明した。まず、従来法である Overbridging Boundary-Matching (OBM) 法について、基礎となる接合公式の導出、および結晶電極、Jellium 電極を用いた場合の一般化 Bloch 状態の計算手法についてそれぞれ述べた。次に、新たな電気伝導特性計算手法として今回開発を行った Lippmann-Schwinger 方程式を用いた計算手法 (LS 法) について説明を行い、Jellium 電極を用いた効率的な解法や高速計算を行うためのアルゴリズムについて論じた。

第 5 章では、電気伝導特性計算手法のアプリケーションとして、原子鎖におけるコンダクタンスの振動現象について研究を行った。その結果、コンダクタンスの振動現象は無限長原子鎖の性質と波動関数の接合公式により理解することができることを示した。さらに、複数の単原子鎖を含むナノワイヤ列についても計算を行い、単原子鎖系と同様の解釈ができることを示した。また、OBM 法と LS 法を用いて計算速度の比較を行い、LS 法によって従来よりも効率的な計算が可能となることを実証した。

第 6 章では、別のアプリケーションとして、 C_2H_2 分子が吸着した Si(001) 表面の STM 像のシミュレーションを行った。その結果、実際の幾何構造ではより高い位置にある C_2H_2 分子像よりも bare Si-dimer 像の方が明るく見え

るという実験結果と符合する計算結果が得られた。これは、 C_2H_2 分子が吸着することで、トンネル電子の伝導に大きく寄与する Si-dimer の π -state が終端化され、探針へ伝導するトンネル電流が減少するためであることを示した。

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

電子デバイスの高性能化、小型化という要求に対し、デバイスを構成する素子のダウンサイジングや高集積化が進められており、近い将来、デバイス中に原子・分子スケールで制御された構造が現れることにより、従来の古典力学的な予測の範疇を超え、電子の粒子性や波動性といった量子力学的な性質がデバイスの電気特性に大きな影響を与えるようになると考えられる。これまで、原子・分子スケールの構造体を用いた実験において電子の量子力学的な振る舞いが実際に数多く観察されているが、このようなスケールで起こる現象について、その本質を実験のみで解析・理解することは大きな困難を伴う。そのため、計算機シミュレーションを用いた理論的な電気伝導特性研究の需要が高まっている。

現在、ナノ構造体における電気伝導特性を高精度に計算するための手法はいくつかあるが、計算条件によって計算精度に非物理的な揺らぎが生じる、あるいは計算量が膨大なため大規模領域を扱うことができず、現実的なサイズのモデルにおける電気伝導特性の計算が困難であるという問題がある。本論文は、電極間に挟まれたナノ構造体における電気伝導特性を高精度かつ高効率に計算するための新しい手法を開発し、実験的に得られている興味深い電子の輸送現象について解析を行うことで本手法の有用性を示すとともに、これらの物理現象に量子力学的な見地からの解釈を与えているものであり、以下のような有用な成果を得ている。

- (1) 実空間差分法を基礎とした計算手法の開発を行うことにより、計算条件による非物理的な計算精度の揺らぎが生じる問題を解決し、さらに計算モデルとして半無限電極を取り扱うことができるため、より現実的なモデルを用いた高精度計算が可能であることを示している。また、電気伝導特性を計算するための積分方程式が変数分離可能であることを利用し、積分方程式を効率的に解くためのアルゴリズムを提案している。これにより、計算時間の大幅な削減を実現し、大規模モデルにおける電気伝導特性計算を可能としている。
- (2) 開発された手法を用いて金属単原子鎖における電気伝導特性について計算し、実験的に観察されているコンダクタンスの振動現象について解析を行っている。その結果、金属単原子鎖における電気伝導特性が無限長の原子鎖の性質と波動関数の接合公式を用いて説明でき、また、複数の単原子鎖を含む原子鎖列においても同様の解釈が可能であることを示すことで、本計算手法の有用性を実証している。
- (3) C_2H_2 分子が吸着した Si(001) 表面における STM 像のシミュレーションを行い、実際の幾何構造とは異なる STM 像が得られるという実験結果と一致する像が得られることを示している。さらに、トンネル電子がどのようなエネルギー準位や空間経路を介して伝導しているかという解析を行い、STM 像が得られるメカニズムについて論じている。

以上のように、本論文は、ナノ構造体における高精度・高効率電気伝導特性計算手法を確立し、ナノ構造体における電気伝導特性の量子力学的な挙動を理論的に示すことにより、本手法の有用性を実証するものであり、次世代の電子デバイス開発に寄与するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。