

Title	Development of Efficient First-Principles Method for Calculating Conductivity Using Screened KKR Method and Its Applications to Multilayered Systems
Author(s)	永田, 徹哉
Citation	大阪大学, 2012, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/59463
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、 https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed 大阪大学の博士論文について https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

氏名	永田徹哉
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学位記番号	第25187号
学位授与年月日	平成24年3月22日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科物理学専攻
学位論文名	Development of Efficient First-Principles Method for Calculating Conductivity Using Screened KKR Method and Its Applications to Multilayered Systems (遮蔽グリーン関数法を用いた効率的な伝導率の第一原理計算手法の開発と多層薄膜系への応用)
論文審査委員	(主査) 教授 赤井 久純 (副査) 教授 小川 哲生 准教授 浅野 健一 助教 小倉 昌子 パナソニック先端技術研究所主任研究員 四橋 聡史

論文内容の要旨

遮蔽グリーン関数法と久保グリーンウッド公式を組み合わせて、多層薄膜の層数 N に対してオーダー N の計算量で電気伝導率を計算可能な手法を開発した。また数値計算コードの実装を行い、実際にいくつかの多層薄膜系について計算を行った。

遮蔽グリーン関数法とは Korringa-Kohn-Rostoker 法(KKR 法)の一種で、KKR 行列と呼ばれる行列を疎行列に変換することにより一体グリーン関数の計算を高速化する手法である[1]。この変換には近似を一切導入していないため、従来の KKR 法と同じ精度を保っている。遮蔽グリーン関数法を Kohn-Sham 方程式に適用すれば、密度汎関数理論に基づく電子状態計算を効率的に実行することができる。

また久保グリーンウッド公式とは線形応答理論の枠組みを用いた電気伝導率の定式化の一つである。KKR 法と久保グリーンウッド公式を組み合わせて電気伝導率を計算する手法は以前から知られていたが[2]、この従来の手法では応答関数を求める際に N の 3 乗に比例する計算量が必要であった。本研究では遮蔽グリーン関数法と久保グリーンウッド公式を組み合わせて、多層薄膜の電気伝導率を層数 N に対してオーダー N で計算可能な新しい手法を開発した。これにより従来より大規模な多層薄膜を数値計算で取り扱うことが可能となり、デバイス全体の伝導計算とその発現機構の解析を現実的な時間内で行うことが可能になった。

応用として、金属半導体接合、PN 接合、GMR 構造について大規模な多層薄膜の計算を行った。各層の状態密度を計算することによりショットキー障壁や空乏層などの振る舞いを直接観察し、それぞれの系の伝導特性と特徴的な電子状態との関連を考察した。

薄膜系の電子状態を第一原理に基づいて計算する場合、計算量は一般に膜を作る原子層の数の 3 乗に比例して増加する。これに対して、原子層の数に対して計算量が線形にしか増加しない手法をオーダー N 法と呼ぶ。永田徹哉氏の研究は薄膜に対するオーダー N 法として知られている遮蔽 KKR 法を発展させ、効率の良い計算機コードを完成するとともに、薄膜構造が周期的に繰り返された超格子に対してもオーダー N で計算できるアルゴリズムを組み込んだ。また、たとえ遮蔽 KKR 法を用いても、輸送係数などの相関関数の計算は一般にオーダー N 計算とはならず、オーダー N^2 の計算となってしまうが、永田氏はアルゴリズムを工夫することによって、相関関数をオーダー N で計算可能にすることに成功し、それを実行するための計算機コードを開発した。これらの手法の応用として、永田氏は反強磁性ハーフメタルを用いた GMR/TMR 構造、金属半導体接合、半導体 PN 接合の電子状態を第一原理に基づいて計算するとともに、それらの直流電気伝導の計算を行った。

反強磁性ハーフメタルを用いた GMR/TMR 構造は、これまで数原子層を用いた計算が先行研究として存在するが、デバイスサイズに近い層数を持った系に対する計算は計算量の大きさから言って実行が困難であるため取り扱われてこなかった。永田氏は十分な膜厚を持った GMR/TMR 構造に対する電子状態と直流伝導度の計算を行い、層数が増えるとともに GMR 比が大きくなっていくことを見だし、その機構を明らかにした。また、金属半導体界面においては電子状態の計算から、ショットキー障壁の形成が行われていることを確認し、その電気伝導度への影響を議論した。また、両側にアルミニウム電極を持つ P 型 (GaBe)As と N 型 (GaSi)As からなる PN 接合構造について、電子状態を計算し、層毎の状態密度曲線から、バンド変形が実際に起こっていることを示した。さらに有限バイアスの下での直流伝導度を、微分伝導度を計算することにより求め、その結果、正バイアスと負バイアスによって明らかに電気伝導度が異なることを確認した。PN 接合におけるバンド変形や非線形 IV 特性を精度の高い第一原理計算や線形応答理論の適用によって確認した例はこれまで知られてない。これらの結果は物質の基礎的な理解に新しい視点を与えるだけでなく、現実的なデバイスのシミュレーションにもつながるものであり、その学問的、応用的価値は高い。よって、本論文は博士(理学)の学位論文として十分価値あるものと認める。

[1] R. Zeller et al., Phys. Rev. B 52, 8807 (1995)

[2] W. H. Butler, Phys. Rev. B 31, 3260 (1985)