

機関番号：12102

研究種目：若手研究（A）

研究期間：2007～2010

課題番号：19681010

研究課題名（和文）ナノコンタクトの量子輸送シミュレーション

研究課題名（英文）simulation of quantum transport in nano contacts

研究代表者

小林 伸彦 (KOBAYASHI NOBUHIKO)

筑波大学・大学院数理物質科学研究科・准教授

研究者番号：10311341

研究成果の概要（和文）：

第一原理電気伝導計算手法を用いてナノコンタクトの量子輸送特性を解析した。独自に開発してきた第一原理リカージョン伝達行列法、積分方程式を用いた第一原理電気伝導計算法、非平衡グリーン関数法等の計算理論の整備を進め、量子伝導特性解析に応用し、伝導チャンネルを明らかにした。また、時間依存波束拡散伝導法の開発を行い、弾道領域から拡散領域までの統一量子伝導計算を可能にした。

研究成果の概要（英文）：

We have performed first-principles calculations of quantum transport in nano contacts by using the recursion-transfer matrix method, the Lippmann-Schwinger method, and the nonequilibrium Green's function method. We have analyzed transport properties to reveal conduction channels. We have also developed the time-dependent wave-packet diffusion method, and have succeeded in the unified quantum transport calculation from ballistic to diffusive regime.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	9,900,000	2,970,000	12,870,000
2008年度	3,800,000	1,140,000	4,940,000
2009年度	3,200,000	960,000	4,160,000
2010年度	3,200,000	960,000	4,160,000
年度			
総計	20,100,000	6,030,000	26,130,000

研究分野：ナノ構造物性

科研費の分科・細目：ナノ・マイクロ科学、ナノ構造科学

キーワード：ナノ構造物性、量子輸送、ナノコンタクト

1. 研究開始当初の背景

ナノスケール系の量子輸送特性は、コンダクタンスの量子化など量子効果が顕著に現れ学術的に興味深いとともに、ナノスケールトランジスタやナノ配線材料への応用研究のために重要な研究課題である。そのために、走査トンネル顕微鏡の探針表面間のコンタ

クト、メカニカルコントローラブルブレークジャンクション、エレクトロマイグレーションによるコンタクト形成などにより原子細線、ナノコンタクトの量子輸送特性の実験研究が盛んに行われている。このナノコンタクトの伝導特性は原子の電子状態が大きく反映するため、実際の実験結果も構成する原子種によって著しく性質が異なる。そのため、

伝導特性を理解するためには、コンタクトの電子状態を考慮した精密な理論による解明が求められていた。

2. 研究の目的

そこで、非平衡開放系の密度汎関数理論に基づく第一原理電気伝導計算手法を主に用いてナノコンタクトの量子輸送特性を解析する。そのための方法論として独自に開発してきた第一原理リカージョン伝達行列法、積分方程式を用いた第一原理電気伝導計算法、非平衡グリーン関数法等の計算理論の整備を進め、ナノスケール系の量子伝導特性解析に応用し、伝導チャンネルの数、チャンネル透過率、原子軌道とチャンネルの関係、コンタクトの構造依存性、原子細線のバンド構造との関係、原子軌道を通じた共鳴トンネル的描像と一次元バンド描像、原子種依存性を明らかにする。

3. 研究の方法

ナノコンタクトの量子輸送特性を解析するために既に独自に開発してきた計算手法によってナノコンタクトの電子状態計算を行い、伝導チャンネルを解析することによって伝導特性を明らかにする。

リカージョン伝達行列法はコーンシャム方程式をヌメロフ展開により差分方程式に直し、隣接するメッシュ点間の比として定義される伝達行列をリカージョン法にて計算する。これにより、多次元の散乱波解の逐次計算で問題となる指数関数的に増大する成分を常に抑制でき、数値的に安定で高速な散乱行列計算が可能となる。

積分方程式であるリップマンシュウインガー方程式を用いた手法は平面波や実空間基底を用いて行列の連立1次方程式を数値計算することによって伝導計算を行う。電極部のグリーン関数を計算して、それを基にナノ系の電子状態を繰り込まれる。

数値局在原子基底、非平衡グリーン関数法を用いた第一原理電気伝導計算法では電極の効果は半無限結晶の表面グリーン関数からコンタクト部分のグリーン関数の自己エネルギーとして精度よく取り込み、ハミルトニアン行列の逆行列によりグリーン関数を求めて伝導計算を行う。計算は基底間の実空間積分を始めに求めることにより展開係数のみを扱う密度行列計算となる。

これらの手法により伝導計算を行い、伝導チャンネルを解析する。この研究は独自開発した数値計算プログラム群をコンピュータ上で実行して数値シミュレーションをさせることによって遂行する。PCクラスタの並列計算、全国共同利用施設のスーパーコンピュ

ータによるプログラム実行によって研究を行う。

4. 研究成果

密度汎関数理論に基づく第一原理電気伝導計算手法を主に用いてナノコンタクトの量子輸送特性を解析してきた。第一原理リカージョン伝達行列法、積分方程式を用いた第一原理電気伝導計算法、非平衡グリーン関数法等の計算理論の整備を進めた。それらを用いて、伝導チャンネルの数、チャンネル透過率、原子軌道とチャンネルの関係、原子細線のバンド構造との関係、共鳴トンネル描像と一次元

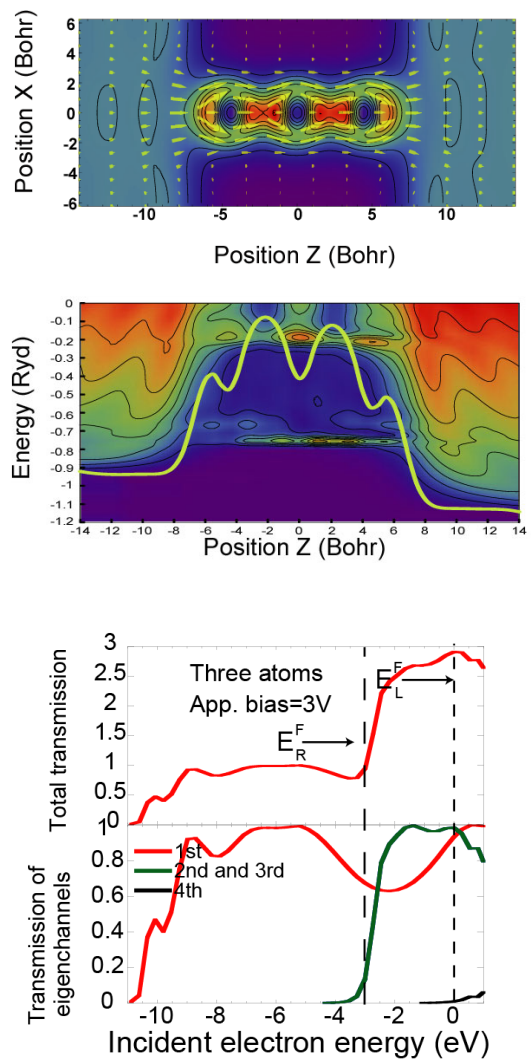


図1：有限バイアス電圧下でのSiナノコンタクトの第一原理電気伝導計算。
 (上図) 電荷分布密度と電流密度分布。
 (中図) 有効ポテンシャルと状態密度。
 (下図) 透過率スペクトル。

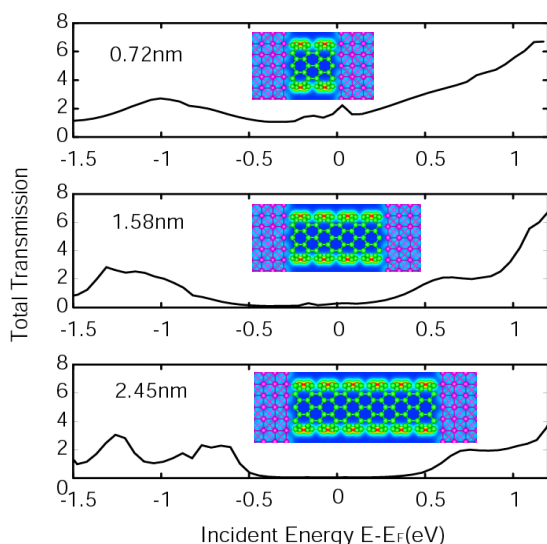


図2：カーボンナノチューブの第一原理電気伝導計算。電極コンタクトの効果と長さ依存性。

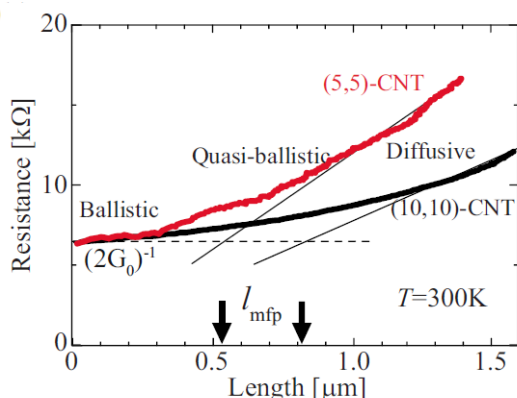


図3：時間依存波束拡散伝導法によるバリスティック領域から拡散領域までの統一量子伝導計算。

バンド描像、ポテンシャルドロップ、バイアス電圧依存性、それらの細線長依存性や金属電極とのコンタクトの効果を一明らかにした。

Si コンタクトにおいて有限バイアス電圧効果を解析した。ポテンシャルドロップは、金属電極との接合面で急激に落ちる。また、印加バイアスにより s 状態のシフトは一様であったが、p 状態は位置に依存した。固有チャネル分解により、伝導チャネルを調べた結果、バイアスウィンドウ内で3つのチャネルがほぼ安定的に開いていることを見出した。

分子の伝導におけるナノコンタクトの影響を解析し、非線形な電流電圧特性が分子の

最高被占有分子軌道、最低空分子軌道からのみ決まるのではなく、電極とのコンタクトにも大きく依存することを明らかにした。

また、ナノカーボン系における金属電極のコンタクトによる電子状態変化、電気伝導度の影響、多端子電極コンタクトによる電子状態変化と伝導特性変化について明らかにした。

さらに、時間依存拡散伝導法の開発により、弾道領域から拡散領域までの統一伝導計算を可能とし、フォノン散乱効果、不純物散乱効果を取り入れ、伝導度、平均自由行程、移動度、位相緩和長、およびそれらの温度依存性を解析可能とした。そこで、弾道領域から拡散領域までの移り変わりや、不純物散乱とフォノン散乱の競合、およびその温度依存性を明らかにした。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 22 件)

- 1) H. Kusaka, N. Kobayashi, First-principles study of electron transport in Si atom wires under finite bias voltage, *Appl. Surf. Sci.* (2011) in press, 査読有
- 2) 山本晃平、石井宏幸、広瀬賢二、小林伸彦、非平衡グリーン関数法を用いたナノワイヤの熱伝導計算、*表面科学*, 32 (2011) 印刷中、査読有
- 3) H. Ishii, S. Roche, N. Kobayashi, and K. Hirose, Inelastic Transport in Vibrating Carbon Nanotubes: Scattering Times and Temperature-Dependent Decoherence Effects”, *Phys. Rev. Lett.*, 104 (2010). 116801(1-4), 査読有
- 4) N. Kobayashi, T. Ozaki and K. Hirose, Length dependence of effect of electrode contact on transport properties of semiconducting carbon nanotubes, *Surf. Sci.*, 601 (2007) 4131- 4133, 査読有
- 5) K. Hirose and N. Kobayashi, Effects of atomic-scale contacts on transport properties through single molecules, - ab initio study-, *Surf. Sci.* 601 (2007) 4113-4116, 査読有

[学会発表] (計 71 件)

- 1) N. Kobayashi, H. Kusaka, First- principles study of quantum transport in Si atom wires under finite bias voltage, 18th International Vacuum Congress (IVC-18) , Beijing, China, August 23th - 27th, 2010.
- 2) H. Ishii, S. Roche, N. Kobayashi and K. Hirose, "Inelastic transport through phonon-vibrating carbon nanotubes:

Scattering times and temperature-dependent decoherence effects" Workshop on Inelastic Transport Phenomena, Donostia-San Sebastian, Spain, Sep. 1st - 3rd, 2010. (invited)

- 3) N. Kobayashi, T. Ozaki, K. Hirose Effect of gate electrode contact on transport properties of carbon nanotubes, 2009 American Physical Society March Meeting 2009/3/16 Pittsburgh, USA
- 4) N. Kobayashi, H. Ishii, T. Ozaki, K. Hirose, Atomistic Theory of Quantum Transport in Nanoscale Systems, International 21st Century COE Symposium, on Atomistic Fabrication Technology 2007, Osaka Univ. 2007/10/17 (invited)

〔図書〕 (計 3 件)

- 1) K. Hirose and N. Kobayashi, *Quantum transport calculations for nanosystems*, (Pan Stanford Publishing 2011) in press.

〔その他〕

ホームページ

<http://www.bk.tsukuba.ac.jp/~cmslab/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小林 伸彦 (KOBAYASHI NOBUHIKO)

筑波大学・大学院数理物質科学研究科・准教授

研究者番号 : 10311341