

平成21年6月3日現在

研究種目：基盤研究(B)
 研究期間：2005～2008
 課題番号：17360163
 研究課題名(和文) 量子力学的手法による次世代分子トランジスタの最適化設計に関する研究
 研究課題名(英文) Study on the Optimal Design of Molecular Transistors in Next Generation Based on a Quantum Mechanical Simulation
 研究代表者
 小川 真人 (OGAWA MATSUTO)
 神戸大学・大学院工学研究科・教授
 研究者番号:40177142

研究成果の概要：

スケーリングリミットに近づいたシリコン系デバイスの次世代の代替候補として分子エレクトロニクス材料に焦点を当て、ナノ材料設計及びデバイス設計に関して第一原理電子状態解析とNEGF法に基づき主としてGNR(グラフェンナノリボン=Carbon系)およびPDT(ポリドデシルチオフェン)系の分子構造に伴う電子状態解析結果とデバイス構造設計によるデバイス特性解析結果、及び解析手法を開発し、PDT系材料のスイッチとしての分子デバイスへの応用が可能となることを明らかにした。シリコン系材料の置換の可能性が開け、次世代ナノ材料・デバイス設計も可能となり、産業技術への展開が可能となると考えられる。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2005年度	1,300,000	0	1,300,000
2006年度	1,000,000	0	1,000,000
2007年度	800,000	240,000	1,040,000
2008年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
総計	3,900,000	480,000	4,380,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：電気電子工学・電子デバイス・電子機器

キーワード：分子デバイス，デバイス物理，素子設計，非平衡グリーン関数法，第一原理バンド構造計算

1. 研究開始当初の背景

ユビキタスコンピューティングやウェアラブルコンピューティングが標榜されるIT社会を支える半導体技術は、シリコンCMOS ICテクノロジーが中心となっており、高性能化及び低消費電力化を目指して、ムーアの法則に従いデバイスの微細化が行われてきた。今日、ICの基本構成要素としてゲート長35nm程度のトランジスタが作成されており、素子の長さ方向に存在するシリコン原子の個数は数十個程度で

あるが、8nm程度になると、オン・オフを制御することが難しくなると言われている。さらに、このまま微細化が進んだとすると、10数年後には、1原子で動作する素子を作らなければならないという究極の微細化限界に直面し、現在のテクノロジーでは到底実現することが出来ない。

この限界を打破する解の一つとして考えられるのが、分子デバイスであり、研究が盛んになってきている。従来の半導体の集積化は結晶を加工して作成する所謂「ト

ップダウン方式」であったのに対し、デバイスを構成する原子や分子を積み木のように組み上げていく「ボトムアップ方式」で分子を作成してデバイスを作ろうという考え方である。現在、白川英樹博士の研究から派生した有機伝導体の研究が盛んであり、種々の材料が研究されているが、その中でも **Hendrik Schon** 博士ら(ルーセントテクノロジー)が発見したチオフェン(PDT)系の材料やグラフェンナノリボン(GNR)はその伝導特性及び自己組織化による集積化が可能であることからポストシリコン材料として着目されている。しかし、化学者達の合成と測定は米国や我が国でも盛んになりつつあるが、この材料の構造に依存した電子状態の物理的な解析や実際デバイス化してシリコン系トランジスタの特性と比較した時の特性予測に関する物理・工学的な検討は日本国内外では十分なされていないのが現状である。ナノサイエンス分野、特に、微細化により電子の波動性が顕わになってきてナノスケール Si IC を代替する分子デバイスの開発が望まれる時代に突入しつつあり、種々の分子デバイスの設計手法を確立する必要がある。

2. 研究の目的

本研究は、分子の電子状態と電気伝導特性の解析を行い、分子デバイスの特性を調べ、さらに次世代の原子・分子サイズの細線固有の量子輸送現象の理論を明らかにし、分子デバイスや分子架橋系デバイスの理論的設計の指針を得、将来のシリコンデバイスの代替化を検討することを目的としてきた。

具体的には、シリコン系ナノスケールデバイスの微細化限界(シリコン結晶の原子間隔 0.3 nm)を打破するために次世代の電子デバイスの候補と考えら得るグラフェンナノリボン(GNR)デバイスやポリチオフェン(PDT:ドデシルチオフェン)系の分子エレクトロニクスを用いた分子トランジスタの設計開発を目的とした。特にシリコンの微細化限界を超える新しい材料・デバイスの特性解析・設計の研究および解析方法論に関する研究を分子ナノテクノロジーの以下の 3 点に焦点を絞り順次検討を重ねた。

- (1) ナノ分子の構造、電子状態、原子位置変化を精度良い量子化学計算で高速シミュレーションするために有用な分子軌道法、密度汎関数法、およびこれらを融合した第一原理分子動力学法のプログラム作成と整備、および MPI による高並列化を行い、GNR 系、

PDT 系の機能性ナノ分子の設計と大規模計算を実施する。

- (2) 得られた結果から遺伝的アルゴリズムにより簡便な強束縛近似パラメータを得るためのプログラムを作成する。
- (3) GNR 系および PDT 系の分子デバイス構造に対して量子輸送解析を行い、トランジスタ材料としての妥当性、性能予測を行う。

3. 研究の方法

申請者らはナノサイエンス分野、特に、微細化により電子の波動性が顕わになってきて従来の設計手法の信頼性が揺らいでいるナノスケール MOSFET の新たな設計手法を開発するために、非平衡グリーン関数 (Non-Equilibrium Green's Function: NEGF)法に基づく量子力学的なデバイスシミュレーション技術を開発してきており、本研究ではシリコン系ナノスケールデバイスの微細化限界(シリコン結晶の原子間隔 0.3nm)を打破するために次世代の電子デバイスの候補と考えら得るグラフェンナノリボン(GNR)やポリチオフェン(PDT:ドデシルチオフェン)系の分子エレクトロニクスを用いた分子トランジスタの設計開発を目標とする。GNR 系や PDT 系の分子材料構造に依存した電子状態を第一原理電子状態計算による解析により明らかにし、その結果とシリコン系ナノデバイス設計で培ってきた NEGF 法を組み合わせる具体的なデバイス(トランジスタ構造)設計と特性評価を行い、微細化限界にさしかかったシリコン材料の次世代材料としての優位性を明確にする。スケーリングリミットに近づいたシリコン系デバイスの次世代の代替候補として分子エレクトロニクス材料に焦点を当てナノ材料設計及びデバイス設計に関して第一原理電子状態解析と NEGF 法に基づき学術的基盤を形成する点が本研究の学術上の特色であり独創的な点である。本研究の成果により PDT 系の分子構造に伴う電子状態解析結果とデバイス構造設計によるデバイス特性解析結果、及び解析手法が明らかになれば、PDT 系材料の分子デバイスへの応用(センサー、トランジスタ)はもとより、シリコン系材料の置換の可能性の判断が可能となると同時に、PDT 系材料に限らず開発した手法を用いた次世代ナノ材料・デバイス設計も可能となり今後の学術的基盤発展、さらには産業技術への展開が可能となる。

次世代のエレクトロニクスを荷うことが期待されているナノ分子デバイス(主に

GNR と PDT 分子を対象に考える)に対し、電子の持つ内部自由度 (電荷・軌道・スピン) のコントロールを可能とし、新しい機能を持たすべく、非平衡グリーン関数法に基づくデバイス特性解析を行う。その際、構成分子の電子状態解析の結果から強束縛近似パラメータを導出し、ハミルトニアン H および境界自己エネルギーに反映させることにより分子構造と材料に依存した量子輸送特性の解析が可能となる。デバイス内部で量子力学的な効果すなわちトンネル現象やエネルギーの離散化、量子干渉効果を表現することも可能であることが明らかになっており、本手法にて分子デバイスの最適化設計が可能となる。解析結果から、PDT 系材料の分子デバイスへの応用(トランジスタ)可能性と、シリコン系材料の置換の可能性につき検討した。さらに開発した解析法に数値的厳密対角化法、第一原理全電子混合基底法など効率よく計算するための種々の計算プログラムの作成と整備を行った。

さらに、一般的な分子材料のハミルトニアンを効率よく生成するプログラムを付加し、本研究で開発した手法を用いた次世代分子ナノ材料・デバイス設計手法として、ナノサイエンス・ナノテクノロジー研究に用いるための非経験分子軌道法、密度汎関数法、分子動力学法、非平衡グリーン関数によるデバイスシミュレーションのデータ形式の調査研究を行い、統合ナノシミュレーションシステムの統合データ形式の概念設計とシステム設計を実施する。また、統合ナノシミュレーションシステム GUI の概念設計と Web Hub 統合化のシステム設計を行った。

4. 研究成果

これまで経験にのみ依存し理論的に明確でなかった GNR デバイスや PDT 系の分子材料構造に依存した電子状態を第一原理電子状態計算による解析により明らかにし、その結果とシリコン系ナノデバイス設計で培ってきた NEGF 法を組み合わせる具体的なデバイス(トランジスタ構造)設計と特性評価を行い、更に海外研究者による試作特性評価との比較検証を行い、微細化限界にさしかかったシリコン材料の次世代材料としての優位性が明らかにされた。

特に GNR トランジスタにおいては、下図に示すようにスピン偏極した電子を励起して伝導させることが可能であることを明らかにしており、スピンメモリ素子としての可能性を見出している。

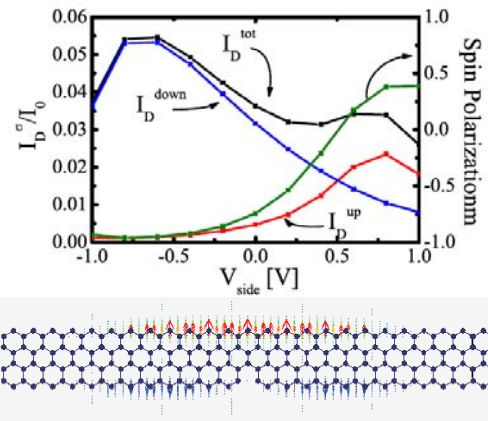


図1 GNR トランジスタのスピン輸送現象の解析. I-V 特性 (上図). スピンの空間局在 (下図) [発表②]

一方、PDT 分子を構成する原子の特性を考慮した第一原理計算による電子状態解析と非平衡グリーン関数やリカージョン伝播行列法に基づく量子輸送解析によって下の図のような分子デバイス内部の電子状態との伝導特性を調べた。

図2のような有機分子やDNA分子の両端に金属電極を付着した2端子デバイスや、さらにゲート電極を付着させたトランジスタ構造など、分子デバイス内部の電子状態との伝導特性を調べた。

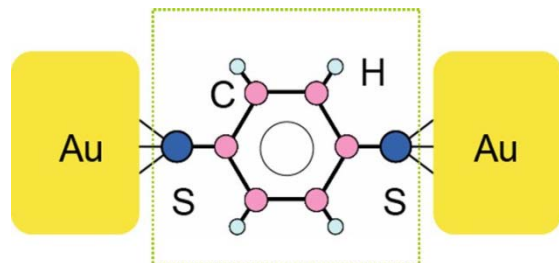


図2 PDT の両端に金電極を付けた分子デバイス構造.

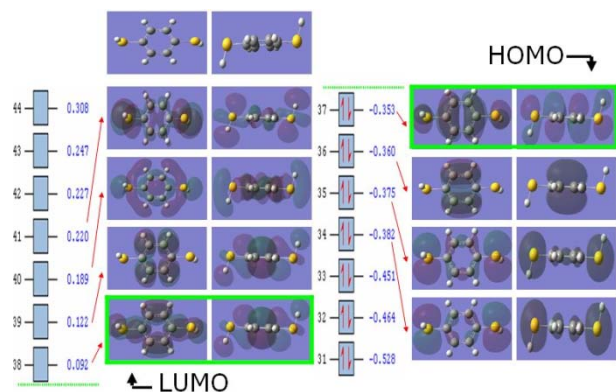


図3 PDT デバイスの HOMO, LUMO の電子状態.

図3に示すように PDT 内部の最上位の占有軌道 (HOMO : Highest Occupied Molecular Orbital) エネルギーと非占有軌道 (LUMO : Lowest Unoccupied Molecular Orbital) とを原子軌道 (局在軌道) を基底とした第一原理バンド構造計算ソフトウェア Gaussian 03 によって求めた。

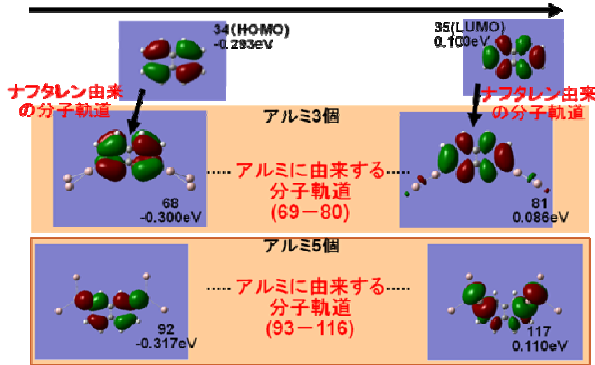


図4 電極を Al にした場合の HOMO/LUMO 準位と分子軌道。

さらに、電極間の PDT 系の分子をナフタレンに変えて電極を原子番号の小さい金属である Al に変化させると Al の軌道が分子軌道と混成してバンドギャップが狭くなることを見出した (図5)。

● 分子軌道準位の比較

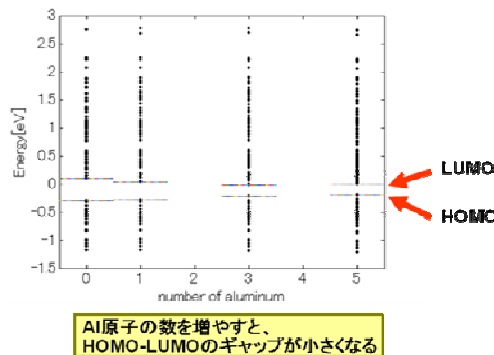


図5 電極を Al にした場合の HOMO-LUMO ギャップの変化。

さらに得られた分子軌道関数と MATLABM あるいは FORTRAN で作成したサブルーチンとを組み併せて、それらを連成させることによって解を得る方法で、分子内の電子状態と量子輸送現象による電気伝導度の計算結果を得ている。

量子力学的な手法 (NEGF=非平衡グリーン関数法) を適用して求めたこの分子デバイスの電流-電圧特性を図6(a)に、コンダクタンスの印加電圧依存性を図6(b)に示す。図5で解析した分子の HOMO/LUMO 準位と、電極のフェルミ準位とのエネルギー位置関係を印加バイアスごとに図6(c)に示すが、図6(a)の赤、青、黄のバイアス条件での各順位の

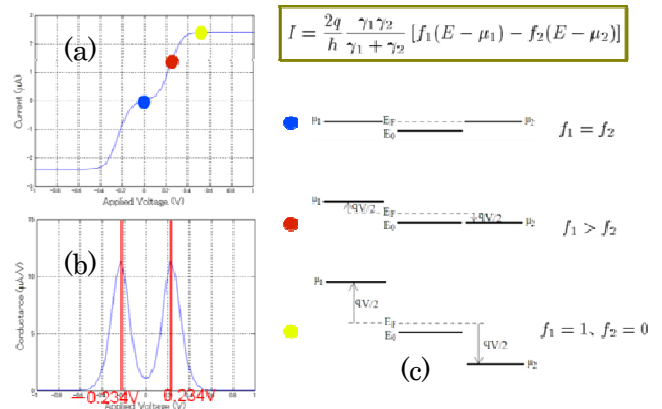


図6 分子トランジスタの (a) 電流-電圧特性, (b) コンダクタンス特性 (2つのピークに着目されたい), (c) (a) (b) の特性が生じる理由。

位置が (c) の各位置に相当する。準位が詰まっている状態 ($f_1 = f_2$) では電流が流れず (b) 図青丸, 程よく占有されると電流が流れ ($f_1 > f_2$) (b) 図中赤丸, 準位が完全に詰まると再び流れなくなる (b) 図中黄丸). したがって、印加バイアスの制御により 3 値論理動作が可能であるトランジスタ特性が得られることが明らかされており、今後 Si IC に置き換えることな可能な特性を有している点が示されている。

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 8 件)

- ① T. Maegawa, T. Yamauchi, T. Hara, H. Tsuchiya, and M. Ogawa, "Strain Effects on Electronic Band Structures in Nanoscaled Silicon: From Bulk to Nanowire," IEEE Trans. On Electron Devices, vol.56, No.4, pp.553-559 2009. (査読有)
- ② S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto, and K. Watanabe, "Numerical simulation of electronic transport in zigzag-edged graphene nano-ribbon devices," J. Comp. Electron. Vol.7, No.3, pp.390-393,2008. (査読有)
- ③ H. Fitriawan, M. Ogawa, S. Souma, and T. Miyoshi, "Non-equilibrium Green's function method for modeling quantum electron transport in nano-scale devices with anisotropic multiband structure," J. Mat. Sci.: Materials in Electronics, Vol.19, No.2, pp.107-110, Mar. 2008. (査読有)

- ④H. Fitriawan, S. Souma, M. Ogawa, T. Miyoshi, "Quantum electron transport modeling in uniaxially strained silicon channel of double-gate MOSFETs," Phys. Stat. Sol. C, Vol.5, pp.105-109, Jan. 2008. (査読有)
- ⑤H. Fitriawan, M. Ogawa, S. Souma, and T. Miyoshi, "Fullband Simulation of Nano-Scale MOSFETs Based on a Non-equilibrium Green's Function Method," IEICE Trans. Electron. Vol.E91-C, No.1, pp.105-109, Jan. 2008. (査読有)
- ⑥H. Fitriawan, S. Souma, M. Ogawa, and T. Miyoshi, "Quantum Electron Transport Modeling in Double-Gated MOSFETs Based on Multiband Non-Equilibrium Green's Function Method," Physica E, Vol.42, pp.245-248, Jan. 2007. (査読有)
- ⑦T. Umegaki, M. Ogawa, and T. Miyoshi, "Investigation of Electronic Transport in Carbon Nanotubes Using Green's-Function Method," J. Appl. Phys., Vol. 99, pp. 034307-1-034307-8, June 2006. (査読有)
- ⑧T. Umegaki, M. Ogawa, and T. Miyoshi, "Analysis of Band-Pass Filter Characteristics in a Ferrite Device with Carbon Nanotube Electrodes," ACES Journal, Vol. 20, No. 3, pp.221-230, March 2005. (査読有)

[学会発表] (計 10 件)

- ① S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto, K. Watanabe, "Computational Modeling of Spin-Dependent Transport in Graphene Nanoribbon Devices," The 23rd Nishinomiya-Yukawa Memorial International Workshop Spin Transport in Condensed Matter (STCM)(2008/11/26 Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University) (2008. 11.26発表).
- ② S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto, K. Watanabe, "COMPUTATIONAL MODELING OF GRAPHENE NANO-RIBBON SPIN DEVICES BASED ON SPIN-DENSITY-FUNCTIONAL TIGHT-BINDING METHOD," International Symposium on Graphene Devices (ISGD), November, 2008. (2008.11.17発表).
他 8 件

[図書] (計 1 件)

- ① 三好 且六, 小川真人, 土屋英昭, 「ナノエレクトロニクス基礎」培風館(2007)総ページ数 272 頁

[産業財産権]

○出願状況 (計 1 件)

- 発明者: 三好 且六, 小川 真人, 梅垣 俊仁
「スピン波励振・検出装置, 前記装置を用いた高周波信号処理装置及びカーボンナノチューブの構造評価装置」
出願人: 財団法人新産業創造研究機構
特許権
特開 2005-181071 (2005. 07. 07)
国内

[その他]

- ・電子情報通信学会 第 9 回 エレクトロニクスソサイエティ賞, 小川真人, 土屋英昭, 三好且六 「ナノスケールデバイスシミュレータの先駆的研究」 (2006)
- ・第 6 回半導体理工学研究センター共同研究賞, 小川真人 「原子レベルの材料特性を考慮した 3 次元量子輸送デバイスシミュレータの開発」 (2008)
- ・IMFEDK2009 Best Paper Award, S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto, and K. Watanabe "Influence of Edge Roughness on the Performance of Graphene Nano-Ribbon Devices" (2009)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小川 真人 (OGAWA MATSUTO)
神戸大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号: 40177142

(2) 研究分担者

相馬 聡文 (SOUA SATOFUMI)
神戸大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号: 20432560

(3) 連携研究者

該当なし