

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 15 日現在

機関番号：82626

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2013～2017

課題番号：25110009

研究課題名（和文）単一分子と組織化分子ネットワークの非線型伝導理論

研究課題名（英文）Non-equilibrium quantum transport theory for current and noise of single molecules and organized molecular networks

研究代表者

浅井 美博（ASAI, Yoshihiro）

国立研究開発法人産業技術総合研究所・機能材料コンピューショナルデザイン研究センター・研究センター長

研究者番号：20192461

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 78,130,000円

研究成果の概要（和文）：単分子エレクトロニクス研究の初期において不十分であった精密科学による裏付けは、計測実験と理論・計算シミュレーションの著しい進展により既に概ね解決している。本研究では単分子エレクトロニクスをより現実的な技術問題として捉え直し、その理論指針を与えるような研究を実施した。その結果、“確率共鳴法”に必要な非線形的電気特性やメモリー双対的電気特性を実現するための材料設計指針が確立し、電流ノイズを支配する材料要因の解明に成功し、単分子素子をネットワーク化する事によりネットワーク全体の電気特性をデザインするためのルールを明らかにし、ナノスケール・界面領域での熱伝導物性などの残っていた基礎科学課題を解決した。

研究成果の概要（英文）：The science of single molecular electronics has already been largely improved owing to rapid developments in precise experimental measurements, theory and computational simulations based on it. Here, we redefined the problem as a practical engineering problem and extended the frontier of theoretical researches to help it. As such, we clarified (1) a material design rule for the non-linear and bistable electrical properties useful to the stochastic resonance applications, (2) material factors controlling the electric noise, (3) design rule for the electrical property of the organized single molecular network in terms of elementary component of single molecules, and (4) basic science of heat conduction at nanoscale interface.

研究分野：物性理論、計算物理、化学物理・理論化学、計算エレクトロニクス

キーワード：非平衡量子伝導理論 第一原理計算 分子エレクトロニクス ナノエレクトロニクス

1. 研究開始当初の背景

分子1個をチャンネル材料として利用を図る科学技術分野は「単分子エレクトロニクス」と呼ばれるが、その第一期研究(1970~1990年代前半)では不十分であった精密科学による裏付けは、第二期研究(1990年代後半~2010年代前半)における計測実験と理論・計算シミュレーションの著しい進展により概ねその不足を解消した。理学・基礎科学からの裏付けを得て、より現実的な技術問題として問題を捉え直し、デバイス動作安定化や、サイズの小さい系では避ける事が難しい電流揺らぎの制御・活用等の基礎工学的な研究の必要性が強く意識されるようになってきた。

2. 研究の目的

ナノスケール・界面領域での熱伝導物性などの未だに残る基礎科学課題の研究を更に推進すると同時に、「背景」で述べた基礎工学的な研究を電流揺らぎの制御・利用による神経模倣コンピューティング等の新たな課題も含めて材料化学の立場から支える必要がある。とは言え未踏領域であり、実験研究を先導する理論・学理を構築する事がまず必要である。そういった研究を実施する。知見の活用を念頭におき不揮発性メモリ材料におけるメモリ機構の解明にも努める。

3. 研究の方法

非平衡グリーン関数法に基づく第一原理非平衡伝導計算シミュレーションとケルディッシュ・グリーン関数法に基づいて構築した電流とフォノン流の自己無撞着的な伝導理論を中軸とし、これらをベースとした新たな理論・計算手法を、単分子やそのネットワーク、更には不揮発性メモリ材料の研究に適用し、基礎科学研究を更に開拓すると同時に、デバイス動作安定化や電流揺らぎの制御・活用等の基礎工学的研究につなげる。【①非線形電気伝導に関する理論研究】、【②電流揺らぎ(ノイズ)に関する理論研究】、【③単分子のネットワーク化に関する理論研究】、【④ナノスケールの導体を介する熱輸送に関する理論研究】の4つの課題に関して上記の方針に沿った研究を実施し研究成果を挙げた。

4. 研究成果

以下、4つの課題毎にその課題の意義と研究成果の概要を説明する。

【①非線形電気伝導に関する理論研究】

(意義) 揺らぎを伴うデバイスを安定的に動作させるための“確率共鳴法”の利用がこの本新学術領域 A04 班を含めた計算機構・計算機アーキテクチャー研究分野で検討されている。“確率共鳴法”を有効に利用するためには、非線形的な電気特性(電流・電圧曲線)やメモリ双対的な電気特性が必要であり、これらが材料に求められる必要条件となる。

(研究内容) (1) 前者(非線形電気特性)の原子・分子レベルの設計シミュレーションを

第一原理計算にもとづいて実施し、(2) 強い電子相関効果に関する理論検討も併せて実施した。後者(メモリ双対的な電気特性)に関しては不揮発性メモリ材料のメモリ・オン、メモリ・オフ状態の電気特性に関する第一原理非平衡伝導計算シミュレーションを実施し、メモリ機構を電子論的に明らかにした(3)。

(研究結果) (1) に関しては本新学術領域の実験グループ(合成、評価:A01、A02班)においても研究が行われているグラフェン電極と100ナノメートル程度の長さをもつオリゴチオフェン・チャンネル材料よりなる2端子系に関して電流・電圧曲線の第一原理計算を実施した。大規模第一原理電子状態計算プログラム CONQUEST を用いて非平衡伝導計算を行うためのプログラム開発を新たに行った。これを用いて計算を行った結果、実験で示唆されているのと同様に、グラフェン電極のフェルミエネルギーがオリゴマーの分子軌道エネルギーに近接している事がわかった。更に、グラフェン電極とオリゴマーの電気的な接触が弱いため、伝導に用いることができる電子状態密度のエネルギー分散幅が非常に小さくなっており、そのため伝導電子がフォノン等の擾乱を受けやすい状況になっていることも判明した。これらの理由によりこの2端子材料系は非常に強い非線形電気特性を示す可能性を持つ。(論文発表の準備中)

(2) の強相関効果による非線形性の可能性に関して、量子ドットに対する標準理論を超えたスピン効果の影響も考慮するため、ハバード鎖モデルの電気伝導度の長さ依存性を調べた。新たに作成した時間依存密度行列繰り込み群法に基づく計算プログラムを用いて電子の時間発展を追跡し、電流と電気伝導度を見積もった。研究対象としたハバード鎖モデルに関しては、朝永・ラッティンジャー理論に基づき、鎖長が無限の極限で完全透過を意味するユニット・コンダクタンス(G_0)が実現していると永らく信じられてきたが、この理論モデルには電極効果が含まれておらず、現実的な2端子系では電極効果のため(チャンネル長さが無限大となる極限においても)電気伝導度は G_0 より小さくなる。長さ無限大の極限に向かって伝導度の長さ依存性は減衰振動を示した。この数値計算結果はクーロン斥力による一粒子エネルギーのシフトとダンピングが存在している事を意味しており、電極効果により朝永・ラッティンジャー理論を超えた新しい物理が強相関電子の伝導問題に現れることを明らかにした。(論文発表の準備中)

(3) 不揮発性メモリ材料の第一原理非平衡伝導計算シミュレーションに関しては、ハフニウム酸化物をチャンネル材料とする抵抗変化型ランダムアクセスメモリ(ReRAM)とゲルマニウム・テルル・アンチモンのカルコゲンナイド超格子型相変化メモリ(iPCM)の研究を実施した。ReRAMの研究においては、チャンネルと電極の間に原子層を数層挿入することによりオン・オフ状態の電気特性の差が明瞭に

ると同時に、ホッピング障壁を軽減するなどの電気特性の改質につながり、(酸素欠陥の分布など) プロセス条件に依存する要因が電気特性に及ぼす影響も小さくなる等の効果がある事を第一原理計算により見出し、それらの理由と材料依存性を明らかにした。(雑誌論文⑥、⑦、⑳、㉑、㉒)

iPCM の研究においては、電界誘起によるゲルマニウム・テルル原子交換移動がメモリオン・オフの原因である事を突き止めると同時に、3次元トポロジカル絶縁体(TPI)状態がメモリ・オフを示す材料周辺に見られ、TPI物理のメモリ機構への積極的な関与が期待できる状況にはあるものの、チャネル材料と電極の準位接続が悪いためにその関与が見られない事、界面改質によりその問題を解決する可能性が残っている事などを第一原理計算により見出した。(雑誌論文①)

これらの研究成果により“確率共鳴法”に必要な非線形的な電気特性やメモリー双対的な電気特性を実現するために必要な材料の設計指針が確立された。

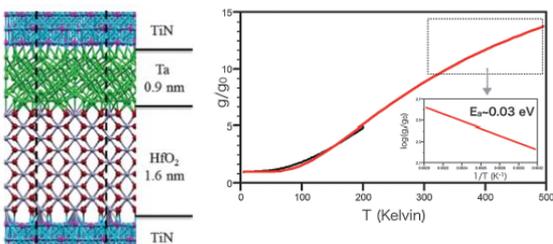


図1 ReRAMにおけるTa原子層挿入構造(左図)とそれによるホッピング障壁の低下を示す電流の温度依存性計算結果(上図)

【②電流揺らぎ(ノイズ)に関する理論研究】

(意義) “確率共鳴法”において重要なもう一つの物理因子は電流ノイズである。“確率共鳴法”においては外部ノイズの入力により信号の明瞭化を図るが、その為には信号側(分子デバイス側)のノイズの素性を知る事が重要である。一方、ノイズが顕著になるのは信号を低パワーで駆動しようとしているからであるが、そのノイズを消すために高パワーを外部から入力するのは利にかなわない。自然ノイズの利用が図られるべきである。その観点からもノイズの物理に関わる原子・分子レベルの理解を深める事が重要である。

(研究内容) 電流ノイズには実材料における組成・構造のバラツキなどの再現性が難しい外的な要因からくるものも含めて様々な起源が考えられるが、温度や量子効果など物理的に本質的で再現性がありかつ不可避な原因に由来するノイズも存在する。物理的にも本質的なノイズではあっても、その振る舞いは伝導機構により変わるので機構に応じてノイズ理論を構築する必要がある。弾道電流のノイズ理論は既に1992年のBuettiker論文で導出されており、近藤系などの強相関電子系に関しても2000年代前半のNazarov等による完全計数統計理論を用いた研究例があるが、フォノンによる伝導電子の散乱過程や電荷の

トラップ・デトラップ過程などデバイス材料で現実的な物理過程を含めた理論研究は意外と例に乏しい。そういった問題の研究に取り組んだ。

(研究成果) 電子・フォノン散乱効果を、それによって発生する熱を電流やフォノン流を介して熱電極へ散逸させる効果をも含めて理論計算に取り込む自己無撞着理論を既に自ら確立していたが、これを完全計数統計理論と結びつける事により熱散逸も含んだ状態での電流ノイズに対するフォノンの影響を取り扱う理論を構築し、それをスー・シュリーファー・ヒーガーモデルに適用し、電流ノイズの電圧

$$S = 2eVG_0 \coth(eV/2k_B T) \sum_i T_i (1 - T_i) + 4k_B T G_0 \sum_i T_i^2$$

フォノンを考慮しない場合の電流ノイズの表式

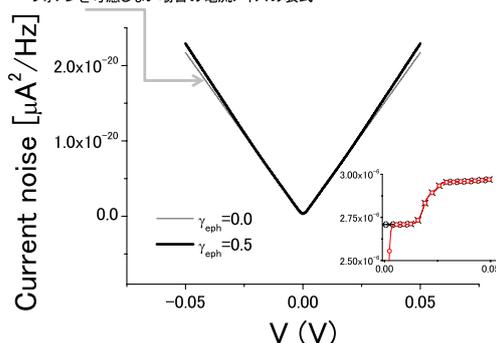


図2 電流ノイズに電圧依存性(黒太線)。灰薄線は電子・フォノン散乱のない場合。インセットはノイズの電圧微分(赤線)と電流の電圧微分の各々電圧依存性

依存性の計算を行った。フォノンエネルギーに対応する電圧位置でノイズの電圧依存性に変調が現れ、非弾性スペクトルに見られる電流の変調との類似点を見出したが、その現れ方には電圧の正負での振る舞いも含めて違いがあり、その違いは電子のファノ因子に依存して変化する、即ち電子のダイナミクスに依存している事を明らかにした。(雑誌論文⑭)

【③単分子のネットワーク化に関する理論研究】

(意義) 小さな分子を用いた単分子素子は、構造的に不安定であり、電流下ではその不安定性がさらにひどくなる。この不安定性問題を解決する一つの方法として、【①非線形電気伝導に関する理論研究】で紹介したグラフェン電極・長鎖オリゴチオフェン系などのような大きな分子チャネル材料や炭素材料電極の活用が考えられるが、単分子素子のネットワーク化による強靱化の可能性も考えられる。後者においてはネットワークのデザインルールの有無(個々の単分子素子の電気特性とそのネットワーク中での配列によりネットワーク全体の電気特性が定まっているといったルールが存在しているかどうか)に興味を持たれる。そのようなルールが存在すれば、単分子素子をレゴブロックのように用いたネットワーク素子全体の電気特性を作り上げていく事ができる。

(研究内容) 上記のデザインルールの有無を検証する素材としてDNAを選んだ。本新学術領域A01班においてもDNAの研究が行われて

いるが、合成化学的な手法により自在に選んだ塩基を意のままに配列する事が可能であり、合成 DNA の輸送係数の研究は上記の目的に良く適っている。走査型トンネル顕微鏡 (STM) ブレークジャンクションを用いた計測実験結果と理論計算の比較によりこの課題の研究に取り組んだ。一方、小さな分子がネットワークに繋がっていく際に、求核置換反応性に対するハメット則のように、分子内のどの接点でつながるかによって電気特性が違ってくる可能性がある。これもデザインルールに重要な要因であり、STM ブレークジャンクション計測実験結果と第一原理計算の比較によりその研究に取り組んだ。

(研究成果) グアニン (G)・シトシン (C) 対はホッピング伝導機構を優勢にし、アデニン (A)・チミン (T) 対はトンネル (弾道) 伝導を優勢とする塩基である事が自らも行った伝導度の温度依存性に関する過去の理論と実験研究により知られているが、全て GC 対からなる DNA に AT 対を置換導入すると DNA 全体の伝導機構がどの様に移り変わっていくかどうかについてゼーベック係数の長さ (塩基数) 依存性に関する実験・理論の共同研究を行って調べた。その結果、AT 対を置換導入によるホッピングからトンネル伝導機構への明瞭な移行が理論・実験双方で確認できたが、置換する AT 対の数が一定数を超えるとリエントラ

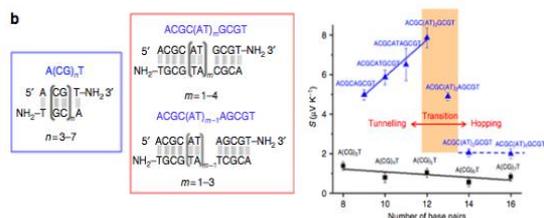


図3 GC対からなるDNAへのAT対の導入とそれに伴うゼーベック係数の変化

ント的にホッピング機構が回復するという現象が実験的には観測された。このリエントラント的な振る舞いは理論では見られず、外因的な理由による可能性も否定できない。(雑誌論文⑤) 接点依存性に関してはX型の構造を持つテトラフェニル分子の電気伝導度に対する第一原理計算と計測実験の比較研究を行い、実験ヒストグラムに見られる高抵抗と低抵抗の二つのピークがシス型とトランス型の二種類の接合様式に由来する事を定量的にも明らかにし、これが接点位置でのHOMO、LUMO分子軌道係数の係数により規定される量子干渉効果による事を明らかにした。(雑誌論文②)

【④ナノスケールの導体を介する熱輸送に関する理論研究】

(意義) ナノスケール・界面領域での熱伝導物性は未解明の基礎科学課題である。

(研究内容) ナノスケール・界面領域での伝熱や熱電輸送係数の精密科学研究を実施する。

(研究成果) 熱電輸送係数に関してはA03班のSTMブレークジャンクション計測実験との比較検証を重ね、第一原理計算に対してイ

メージポテンシャル補正を施す事により電気伝導度と熱起電力に対する実験計測値と計算値の差を数パーセント以下とする事ができる事を示した。(雑誌論文⑩) ナノスケールでの伝熱の実験測定は現段階では困難であるが、将来可能になる事を想定して、実験との定量的な比較に有用な第一原理計算を実施するための手法を開発すると同時に、開発した第一原理計算プログラムを用いて伝熱制御に関する分子設計提案を行った。(雑誌論文③、⑬)

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 23 件)

- ① Hisao Nakamura, Ivan Rungger, Stefano Sanvito, Nobuki Inoue, Junji Tominaga, and Yoshihiro Asai, "Resistive switching mechanism of $\text{GeTe-Sb}_2\text{Te}_3$ interfacial phase change memory and topological properties of embedded two-dimensional states", *Nanoscale*, 9, 9386-9395 (2017). doi: 10.1039/c7nr03495d
- ② Marius Buerkle, Limin Xiang, Guangfeng Li, Ali Rostamian, Thomas Hines, Shaoyin Guo, Gang Zhou, Nongjian Tao, and Yoshihiro Asai, "The Orbital Selection Rule for Molecular Conductance as Manifested in Tetraphenyl-Based Molecular Junctions", *J. Am. Chem. Soc.* 139, 2989-2993 (2017). doi: 10.1021/jacs.6b10837
- ③ Marius Buerkle, and Yoshihiro Asai, "Thermal conductance of Teflon and Polyethylene: Insight from an atomistic, single-molecule level", *Sci. Rep.* 7, 41898-1-7 (2017). doi: 10.1038/srep41898
- ④ Marius Buerkle, Mickael Lozach, Calum McDonald, Davide Mariotti, Koji Matsubara, Vladimir Srveck, "Bandgap Engineering in OH-Functionalized Silicon", *Adv. Funct. Mater.* 27, 1701898-1-7 (2017). doi: 10.1002/adfm.201701898
- ⑤ Yueqi Li, Limin Xiang, Julio L. Palma, Yoshihiro Asai, and Nongjian Tao, "Thermoelectric effect and its dependence on molecular length and sequence in single DNA molecules", *Nature Communications*, 7, 11294-1-8 (2016). doi: 10.1038/ncomms11294
- ⑥ Hisao Nakamura, and Yoshihiro Asai, "Competitive effects of oxygen vacancy formation and interfacial oxidation on an ultra-thin HfO_2 -based resistive switching memory: beyond filament and charge hopping models", *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18, 8820-8826 (2016). doi: 10.1039/c6cp00916f
- ⑦ Xiaoliang Zhong, Ivan Rungger, Peter Zapol, Hisao Nakamura, Yoshihiro Asai, and Olle Heinonen, "The effect of a Ta oxygen scavenger layer on HfO_2 -based resistive switching behavior: thermodynamic stability, electronic structure, and low-bias transport", *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18, 7502-7510 (2016). doi: 10.1039/c6cp00450d
- ⑧ Yuki Komoto, Shintaro Fujii, Hisao Nakamura, Tomofumi Tada, Tomoaki Nishino and Manabu Kiguchi, "Resolving metal-molecule interfaces at single-molecule

- junctions”, **Sci. Rep.** 6, 26606-1-9 (2016).
doi: 10.1038/srep26606
- ⑨ Satoshi Kaneko, Daigo Murai, Santiago Marqués - González, Hisao Nakamura, Yuki Komoto, Shintaro Fujii, Tomoaki Nishino, Katsuyoshi Ikeda, Kazuhito Tsukagoshi and Manabu Kiguchi, “Site-Selection in Single-Molecule Junction for Highly Reproducible Molecular Electronics”, **J. Am. Chem. Soc.** 138, 1294-1300 (2016).
doi: 10.1021/jacs.5b11559
- ⑩ See Kei Lee, Marius Buerkle, Ryo Yamada, Yoshihiro Asai, and Hirokazu Tada, “Thermoelectricity at the molecular scale: a large Seebeck effect in endohedral metallofullerenes”, **Nanoscale**, 7, 20497-20502 (2015).
doi: 10.1039/c5nr05394c
- ⑪ Delia Miguel, Luis Álvarez de Cienfuegos, Ana Martín-Lasanta, Sara P. Morcillo, Linda A. Zotti, Edmund Leary, Marius Buerkle, Yoshihiro Asai, Rocio Jurado, Diego J. Cárdenas, Gabino Rubio-Bollinger, Nicolás Agrait, Juan M. Cuerva, and M. Teresa González, “Towards multiple conductance pathways with heterocycle-based oligo (phenyleneethynylene) derivatives”, **J. Am. Chem. Soc.** 137, 13818-13826 (2015).
doi: 10.1021/jacs.5b05637
- ⑫ Raúl García, M. Ángeles Herranz, Edmund Leary, M. Teresa González, Gabino Rubio Bollinger, Marius Buerkle, Linda A. Zotti, Yoshihiro Asai, Fabian Pauly, Juan Carlos Cuevas, Nicolás Agrait and Nazario Martín, “Single-molecule conductance of a chemically modified, π -extended tetrathiafulvalene and its charge-transfer complex with F4TCNQ”, **Beilstein J. Org. Chem.** 11, 1068–1078 (2015).
doi: 10.3762/bjoc.11.120
- ⑬ Marius Buerkle, Thomas J. Hellmuth, Fabian Pauly and Yoshihiro Asai, “First-principles calculation of the thermoelectric figure of merit for [2,2] paracyclophane-based single-molecule junctions”, **Phys. Rev. B**, 91, 165419-1-8 (2015).
doi: 10.1103/PhysRevB.91.165419
- ⑭ Yoshihiro Asai, “Vibronic spectroscopy using current noise”, **Phys. Rev. B**, 91, 161402-1-4 (R) (2015).
doi: 10.1103/PhysRevB.91.161402
- ⑮ R. Matsushita, S. Kaneko, S. Fujii, H. Nakamura and M. Kiguchi, “Temperature Dependence of the Thermopower and its Variation of the Au Atomic Contact”, **Nanotechnology**, 26, 045709-1-6 (2015). doi: 10.1088/0957-4484/26/4/045709
- ⑯ L.A. Zotti, M. Buerkle, F. Pauly, W. Lee, K. Kim, W. Jeong, Y. Asai, P. Reddy and J.C. Cuevas, “Heat dissipation and its relation to thermopower in single-molecule junctions”, **New J. Phys.** 16, 015004-1-25 (2014).
doi: 10.1088/1367-2630/16/1/015004
- ⑰ M. Kiguchi, T. Ohto, K. Sugiyasu, S. Nakajima, M. Takeuchi and H. Nakamura, “Single Molecular Resistive Switch Obtained via Sliding Multiple Anchoring Points and Varying Effective Wire Length”, **J. Am. Chem. Soc.** 136, 7327-7332 (2014).
doi: 10.1021/ja413104g
- ⑱ T. Ohto, A. Mishra, S. Yoshimune, H. Nakamura, M. Bonn and Y. Nagata, “Influence of surface polarity on water dynamics at the water/rutile TiO₂(110) interface”, **J. Phys. Condens. Matter**, 26, 244102-1-8 (2014).
doi: 10.1088/0953-8984/26/24/244102
- ⑲ Y. Asai, and H. Nakamura, “Non-Equilibrium Transport Theory Applied to Nano Electronics Problems”, **ECS Transactions**, 64(14), 63-69, 2014.
doi:10.1149/06414.0063ecst
- ⑳ H. Nakamura, T. Miyazaki, K. Nishio, H. Shima, H. Akinaga, and Y. Asai, “Design of ReRAM Cell Structure by Metal Buffer and Contact Engineering via First-Principles Transport Calculation”, **Proc. IWCE 2014 (IEEE)** (Paris 2014)
doi: 10.1109/IWCE.2014.6865829.
- 21 T. Miyazaki, H. Nakamura, K. Nishio, H. Shima, H. Akinaga, and Y. Asai, “First-Principles Transport Modeling for Metal/Insulator/Metal Structures”, **JPS Conf. Proc.**, 012075-1-6 (2014).
doi: 10.7566/JPSCP.1.012075
- 22 Hisao Nakamura, Tatsuhiro Ohto, Takao Ishida, and Yoshihiro Asai, “Thermoelectric Efficiency of Organometallic Complex Wires via Quantum Resonance Effect and Long-Range Electric Transport Property”, **J. Am. Chem. Soc.** 135, 16545–16552 (2013).
doi: 10.1021/ja407662m
- 23 T. Miyazaki, H. Nakamura, K. Nishio, H. Shima, H. Akinaga, and Y. Asai, “First-principles modeling for current-voltage characteristics of resistive random access memories”, **Proc. Materials Research Society** (San Francisco 2013)
doi: 10.1557/opl.2013.763

[学会発表] (計 14 件)

【国際会議招待講演の内、以下の 14 件のみ記載】

- ① Yoshihiro Asai, “Quantum mechanical whole device atomic simulation from molecular electronics to nano-electronics devices”, **The 4th International Conference on Advanced Electromaterials (ICAE2017)**, Jeju, Korea, 2017/11/21 - 2017/11/24.
- ② Yoshihiro Asai, “First-principles Non-Equilibrium Green Function (NEGF) Simulation Studies of Device Properties of Non-volatile Memory Materials”, **8th International Workshop on Characterization and Modeling of Memory Devices (IWCMD2)**, Milano, Italy, 2017/9/28 - 2017/9/29.
- ③ Yoshihiro Asai, “Non-equilibrium transport theory from single molecules to nano electronics devices: examples of non-volatile memory cells”, **Psi-k NVM workshop on ‘New Horizons for Memory Storage: Advancing Non-volatile Memory with Atomistic Simulations’**, Dublin, Ireland, 2016/06/29-2016/07/01.
- ④ Yoshihiro Asai, “Quantum transport theory for the current induced local heating and the current noise”, Symposium #408, **Pacificchem 2015**, Honolulu, U.S.A. 2015/12/15.
- ⑤ Yoshihiro Asai, “New opportunities for molecular

electronics using current noise and non-linearity”,
International Workshop on Molecular Architectonics (IWMA 2015), Shiretoko, Japan, 2015/08/05.

- ⑥ Yoshihiro Asai, “Non-equilibrium transport theory applied to nano electronics problems”, **2014 ECS and SMEQ Joint International Meeting**, Symposium Q5: Nonvolatile Memories, The Electrochemical Society, Cancun, Mexico, 2014/10/5-2014/10/10.
- ⑦ Yoshihiro Asai, “Thermal and low energy physics at nanoscale:some theoretical insights”, **International Workshop “Controlled charge and heat transport at the molecular scale”**, Konstanz, Germany, 2014/09/29/ - 2014/10/1.
- ⑧ Yoshihiro Asai, “Non-equilibrium Low-Energy Transport Physics of Electron and Phonon at Nanoscale”, **16th International Workshop on Computational Electronics (IWCE-16)**, Nara, Japan, 2013/06/04.
- ⑨ Hisao Nakamura, “Theory and first-principles simulation of nano-scale device: From single molecule to topological superlattice”, **Single-Molecule Science and Technology**, Konstanz, Germany, 2017/12/12.
- ⑩ Marius Buerkle, “Computational modeling of nanoscale systems”, **Single-Molecule Science and Technology**, Konstanz, Germany, 2017/12/14.
- ⑪ Marius Buerkle, “Electron phonon interactions from DFPT - Application to single molecule junctions”, **Recent Developments in Post-DFT Quantum Chemistry**, Regensburg, Germany, 2017/6/30.
- ⑫ J. Ozaki, “Strong Correlation Effects on Electrical Transport through Hubbard Chains”, **BIT's 5th Annual World Congress of Advanced Materials - 2016**, 重慶、中国, 2016/6/7.
- ⑬ J. Ozaki, “Transport properties of strongly correlated quantum wires”, **EMN Quantum Meeting 2016**, Phuket, Thailand, 2016/4/10.
- ⑭ Marius Buerkle, “Thermoelectric transport through molecular junctions”, **4th WMRIF Young Scientist Workshop**, Boulder, U.S.A., 2014/9/9.

〔図書〕 (計 2 件)

- ① Marius Buerkle, Fabian Pauly, Yoshihiro Asai, **Springer**, “**Materials for Energy Infrastructure**” (W. Udomkitchdecha, A. Mononukul, Th. Böllinghaus, J. Lexow (Eds.)), 2016, 8 pages (chapter contribution: Thermoelectric transport from first-principles - Biphenyl-based single-molecule junctions).
- ② Hisao Nakamura, **Springer**, “**Single-Molecule Electronics**” (M. Kiguchi (Eds.)). 2016, 25 pages (chapter contribution: Theoretical Aspects of Quantum Transport and Computational Modeling of Molecular Electronic Device).

〔産業財産権〕

- 出願状況 (計 件)
名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：

出願年月日：
国内外の別：
○取得状況 (計 件)
名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

http://molarch.jp/member_form/re_task.html?comment_id=182&mode=view

<https://staff.aist.go.jp/yo-asai/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

浅井 美博 (ASAI, Yoshihiro)
産業技術総合研究所・機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター・研究センター長
研究者番号：20192461

(2) 研究分担者

中村 恒夫 (NAKAMURA, Hisao)
産業技術総合研究所・機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター・主任研究員
研究者番号：30345095

(3) 研究分担者 (平成27年度から)

マリウス ビュルクレ (BUERKLE, Marius)
産業技術総合研究所・機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター・主任研究員
研究者番号：00756661

(4) 研究分担者 (平成26年度まで)

宮崎 剛英 (MIYAZAKI, Takehide)
産業技術総合研究所・機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター・副研究センター長
研究者番号：10212242

(3) 連携研究者

()

研究者番号：

(4) 研究協力者 (平成26年度まで)

マリウス ビュルクレ (BUERKLE, Marius)
日本学術振興会・外国人特別研究員 (産総研特別研究員として産業技術総合研究所において受け入れ)