

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・准教授

研究者番号：10311341

研究代表者の専門分野：ナノ構造物性、計算物性物理学  
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. 研究計画の概要

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、固有チャンネル分解法を通し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、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、原子軌道を通し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。

### 2. 研究の進捗状況

独自に開発してきた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、半導体ナノコンタクトにおける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明らかにした。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、多端子電極コンタクトによる伝導特性変化について明らかにしつつある。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。

### 3. 現在までの達成度

①当初の計画以上に進展している。

（理由）この研究計画では独自に開発した第一原理伝導計算手法を用いてナノコンタクトの弾道輸送を解析するものであったが、計画以上の、弾道領域から拡散伝導領域までの統一計算ができる時間依存拡散伝導法の独自開発にも成功した。

### 4. 今後の研究の推進方策

独自に開発してきた第一原理伝導計算手法の整備を進めるとともに、伝導チャンネルの解析を継続する。様々な系でのナノコンタクトの伝導解析を進め、ナノ系での伝導特性制御のための理論的指針作成を推進する。また、弾道領域から拡散伝導領域までの統一計算理論の発展を更に進めて、従来型の理論では解析できなかった弾道領域から拡散伝導領域までの原子論的な精密理論解析によってナノスケールでの伝導理論を発展させる。

5. 代表的な研究成果  
(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 14 件)

- 1) 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
- 2) H. Kusaka and N. Kobayashi, “First-Principles Calculation of Electron Transport in Si Atom Wire”, *J. Vac. Sci. and Technol. B* 27 810–812 (2009). 査読有
- 3) 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
- 4) 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 53 件)

[図書] (計 3 件)

- 1) K. Hirose and N. Kobayashi, *Quantum transport calculations for nanosystems*, (Pan Stanford Publishing 2010) in press.