

自己評価報告書

平成 23 年 4 月 28 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究 B

研究期間：2008～2011

課題番号：20740216

研究課題名（和文）ナノ物質の電子構造とキャパシタンス

研究課題名（英文）Electronic Structure and Capacitance of Nano-Materials

研究代表者

内田 和之 (Uchida Kazuyuki)

東京大学・大学院工学系研究科・助教

研究者番号：10393810

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学, 数理物理・物性基礎

キーワード：ナノ物質, ナノデバイス, キャパシタンス,
電子構造計算, 密度汎関数法, 第一原理計算

1. 研究計画の概要

有限バイアスを印加したナノスケール・キャパシタの特性を計算・予測するため、

(1) 量子力学の第一原理に立脚した、高精度かつ低コストのシミュレーション手法を確立する。

(2) この手法を用いて半導体・有機分子結晶から遷移金属酸化物にいたるまで、様々な物質を材料としたナノキャパシタの、様々な形状・様々な幾何配置における特性を明らかにする。得られた特性と系の原子・電子構造を関連付けて理解してゆくことにより、広くナノデバイスの設計指針となる普遍的な物理・知見を抽出する。

(3) 最終的には、意図する特性を備えたナノキャパシタをデザインし、その新奇な特性の発現をシミュレーションによって実証することを、目標としている。

2. 研究の進捗状況

(1) 電極間に誘電体を挟んだナノキャパシタの電子構造と電気容量の相関を、第一原理計算を用いて解析した。具体的には、三重壁のカーボンナノチューブ(8,0)@(17,0)@(26,0)の、同軸円筒型キャパシタとしての特性を計算した。バンドギャップが小さい内側および外側のチューブは電極として振る舞い、中間のチューブはバンドギャップが大きい為に電極間の誘電体として振る舞うことを明らかにした。CNT 1 層の誘電率は電子状態の閉じ込めを反映して、グラファイト結晶の c 軸方向のものよりも小さい事が分かった。又、電極に蓄えられた電荷と誘電体の誘電分極

電荷は空間的に重なるため、蓄積電荷の量を空間積分の方法で求めることはできず、各電極のバンド充填数でカウントする必要があることを明らかにした。

(2) ナノキャパシタにおいてスピン自由度がもたらす新機能の発現を第一原理計算の立場から提唱した。具体的には、ある種の格子欠陥を含むカーボンナノチューブを電極としたキャパシタに、正方向バイアスを印加した時、電荷が蓄積されると同時に、格子欠陥がスピン分極することを見出した。一方、負方向のバイアスを印加した場合には、スピンの分極は誘起されなかった。これらの結果は、カーボンナノチューブのミクロな電子構造から理解可能であった。Pd 薄膜を電極とした場合には、欠陥が存在しない場合においてもバイアスの印加でスピン分極が誘起されることを見出した。これらの「スピン・キャパシタ」は、スピントロニクスへの応用が期待できるという点において、重要である。

(3) ナノキャパシタに欠陥がある場合の挙動の解析を、現在も推進中である。具体的には、h-BN シート中の欠陥や Si 結晶中の原子空孔 V 1 0 の電子状態計算を進めており、大きな電子格子相互作用の存在を明らかにしつつある。

3. 現在までの達成度

おおむね順調に進展している。

理由：電極間の誘電体・スピン自由度に関する研究はほぼ予定通りに進展しているが、欠陥に関する解析には、なお努力を要する。欠陥を含むナノ構造体は原子数が多く、計算に時間がかかることが理由であり、実空間法の

利用やウルトラソフト擬ポテンシャル法との融合など、時間短縮のできるキャパシタンス計算コードを構築することが、今後の研究発展のために不可欠であると考え。

4. 今後の研究の推進方策

(1) 並列計算機の機能を最大限に引き出すことのできる実空間法のコードを出発点に、電子状態計算の精度を維持したまま計算量を少なくすることのできる擬ポテンシャル(ウルトラソフト型)を実装し、これにより、欠陥を含む系など、大規模な系に関する電子状態計算とキャパシタの解析を進める。

(2) キャパシタに電圧を印加した場合の電界ドーブと化学ドーブの競合に関する計算を進めたい。この場合にも系の原子数は膨大なものになるため、(1)の作業を優先しつつ進めてゆく。

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5件)

T. Kurita, K. Uchida and A. Oshiyama, Atomic and electronic structures of alpha-Al₂O₃ surfaces, Phys. Rev. B 82, 155319 (2010), 査読有

K. Uchida and A. Oshiyama, Symmetry and Spin of the Decavacancy in Crystalline Si, J. Phys. Soc. Jpn. 79, 093711, 2010, 査読有

K. Uchida and A. Oshiyama, Electronic-Structure Calculations for Carbonnanotube Capacitor with a Dielectric Medium, Phys. Rev. B 79, 235444, 2009, 査読有

K. Uchida and S. Okada, Electronic properties of a carbon nanotube in a field-effect transistor structure: A first-principles study, Phys. Rev. B 79, 085402, 2009, 査読有

K. Uchida, Quantum Effects of Capacitance in Nano-Scale Devices, ECS transactions Volume 13, Issue 2, pp51-56, 2008, 査読無

[学会発表](計9件)

K. Uchida, A brief review on first-principles calculations and its application to nano-capacitance, The High Performance Computing and Applications Workshop, December 3, 2010, Beijing (China)

K. Uchida and A. Oshiyama, Structure, spin, and charge of

decavacancy V10 in crystalline silicon, July 27, 2010, ICPS2010, Seoul (Korea)

K. Uchida and A. Oshiyama, Atomic and Electronic Structures of the Deca-vacancy V10 in Crystalline Silicon, ICDS25, July 20, 2009, St. Petersburg (Russia)

K. Uchida and A. Oshiyama, Screening of Electrostatic Field by Dielectric Carbonnanotube, The 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, June 5, 2008, Tokyo (Japan)

K. Uchida and A. Oshiyama, Multi-Walled Carbonnanotube Capacitor, QSD2008, June 2, 2008, Tokyo (Japan)

K. Uchida, Quantum Effects of Capacitance in Nano-Scale Devices, May 18-23, 2008, 2133th ECS Meeting, Phoenix, Arizona (USA)

内田和之、押山淳, h-BNシート中の原子空孔のエネルギー論, 日本物理学会, 2010年3月, 岡山大学

内田和之、押山淳, シリコン結晶中の格子欠陥V10の原子構造と電子構造の第一原理的研究, 日本物理学会, 2009年3月, 立教大学

内田和之、押山淳, ナノキャパシタの電気容量における静電遮蔽の効果, 日本物理学会, 2008年9月, 岩手大学