

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 3 日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2013

課題番号：24760028

研究課題名(和文) 局所誘電率と局所電気伝導率による量子物性解析

研究課題名(英文) Analysis of quantum properties with local dielectric constant and local electric conductivity

研究代表者

瀬波 大士 (Senami, Masato)

京都大学・工学(系)研究科(研究院)・助教

研究者番号：40431770

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円、(間接経費) 1,050,000円

研究成果の概要(和文)：局所誘電率と局所電気伝導率に基づく量子物性解析に向けた基礎研究を推進した。局所誘電率の研究は、原子核の量子的時間発展を電子同様に場の理論的に取り扱う数値計算コードの開発を進めた。局所電気伝導率についての研究は、場の量子論による電流の記述についての研究を進めた。4成分光子場中のベクトル成分が非常に重要となり、ローレンツ共変性を持たない光子場の存在下では電流計算に矛盾が生じることを示した。量子力学に基づく波動関数を利用した物性研究も並行して進め、ベンゼンジチオールやシリコンナノワイヤー内の局所電気伝導状態についての研究を行った。

研究成果の概要(英文)：Local dielectric constant and local electric conductivity are studied in viewpoint of the analysis of properties of quantum condensed matter. In the study of local dielectric constant, the numerical computational code of the dynamics of quantum states of nuclei, as well as electrons, based on quantum field theory. In the study of local electric conductivity, the description of electric current in quantum field theory is studied. It is shown that the vector part in the four component photon field is important and lorentz covariance is necessary for correct current. In addition, the local conductive property of benzenedithiol and silicon nanowire is studied by using the wave functions based on quantum mechanics.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎/薄膜・表面界面物性

キーワード：局所量子物性 局所誘電率 局所分極率 局所電気伝導率 スピントルク

1. 研究開始当初の背景

近年の電子デバイスの微細化はめざましい発展を遂げナノスケールの領域に突入している。このような微細なデバイスのナノ材料では、その材料を特徴づける物性量は全体の平均的な効果としてではなく、欠陥等の不純物や界面の効果が全体の物性量の値を支配することが多い。例えば、半導体素子中のリーク電流は実験的に場所に依存することが観測されているし、酸素空孔の効果により増大する可能性が指摘されている。これを無視して素子全体の性質だけに注目して観測すると、単に材料により大きなばらつきがあるとの結論を得ることになる。すなわち、ナノ材料に対しては、その物性量に対し局所的な領域がどのように寄与するのかを理解することが重要である。この目的には第一原理計算が非常に有効である。不純物を持たせたモデルを作成し、量子状態の変化を知ることができ、全体の物性量への影響を定量的に検討することにより、どのような物理現象から物性量が影響を受けているかを理論的に明らかにできる。

このような状況から、ナノ材料の局所的な特徴を解析するために、局所的な密度量としての物性量による物性評価が普及し始めている。局所的な物性量を用いることにより、材料内の各点における物理量を知ることができ、材料内のどの領域がどのように寄与するかを理論的に明らかにできる。特に局所的な解析は、上述のような不純物や界面の影響を知るだけでなく、より物理的に基礎物性を理解するという観点に立って、均質な物質中のどの原子種のどの電子がどの程度の寄与をするか、そしてその原子からの距離に応じて物性がどう変化するか等も定量的に評価できる点が有用である。

局所物性量による解析は、現状では実際の観測データとの比較が難しい。しかし、今後のプローブの発展に伴い、実際に局所的な効果の観測を進められると予測される。

2. 研究の目的

ナノ材料の物性解析のために、マクロな物性解析に使われていた平均化された物性量ではなく、新たな局所的な密度量を用いて量子物性を解析する手法を確立する。ナノスケールの材料ではわずかな不純物や界面の効果がマクロな物性量を支配しうることが知られており、平均化された物性量による解析だけでは、不純物や界面の効果を適切に評価できないからである。局所物理量による解析の具体的な応用例として、電子デバイス材料の量子物性解析を行い、その特性を明らかにすることを通じて、局所物理量による物性解析の優位性と妥当性を示すことが目的である。

3. 研究の方法

第一原理計算の手法を用いて、次世代電子デバイス材料の解析を行う。局所物性量、特に、局所誘電率・分極率、局所電気伝導率を用いて、ナノ材料の物性を支配する物理現象を明らかにする。局所物性量の解析が特に力を発揮する不純物や界面等に注目し、それらがデバイス全体の物性量に与える影響を定量的に評価し、それらがどのような物理によって物性量への影響を与えているのかを理論的に明らかにする。具体的には半導体素子中のゲート絶縁膜として期待されるハフニウム酸化物とチャネル部への使用が期待されるシリコンナノワイヤーの研究を行う。

局所誘電率については、ハフニウム酸化物について、材料内でのどの領域がどのような効果を生み出すかの物理を明らかにする。その上で、局所的な誘電特性がどのような電子状態の特徴からどう生み出されるかを明らかにし、材料全体での誘電特性にどう影響するかを調べる。ハフニウム酸化物の構造間での誘電特性の違いは、特に原子核振動からの寄与が重要と知られているため、第一原理計算中で原子核も取り扱えるよう計算コードの拡張も行い、結晶構造とアモルファスでの違い等が原子核のどのような性質に起因するのかへの手がかりへと迫る。また、同時に時間発展を取り扱う計算コードの開発も進め、それを用いて誘電率の周波数依存性も取り扱う。

局所電気伝導率研究は、シリコンナノワイヤーの電気伝導性を明らかにする。特にナノワイヤー表面を水素処理した場合に伝導特性にどのような影響を与えるか研究する。電気伝導を担う電子そのものを第一原理計算で表現することにも取り組んでおり、この観点から材料内部の局所的な電場から定義される伝導率と外部電圧と電流の関係による電気伝導率との違いについて示し内部の局所的領域の持つ電気伝導率のあるべき姿を示す。

4. 研究成果

局所誘電率と局所電気伝導率に基づく量子物性解析に向けた基礎研究を推進し9本の論文を出版した。

局所誘電率の研究では、原子核の時間発展を電子同様に量子場として場の量子論に基づいて取り扱う数値計算コードの開発を進めた。高誘電率材料の誘電率には原子核振動の効果の寄与が重要であると知られているからである。特に相互作用光子場と統一的で系統的に取り扱う計算手法を開発した。

局所電気伝導率についての研究は、まずは場の量子論による電流の記述についての研究を進めた。静電ハミルトニアンを用いた量子力学による記述とは異なり、4成分光子場中のベクトル成分が非常に重要であること

を示した。ローレンツ共変性を持たない光子場による電流においては、その全電流と電流中の縦波成分に矛盾が生じてしまうことも示した。しかし、このような場の量子論に基づく電流記述というのは現段階では非常に難しい問題であるので、代替としての量子力学に基づく波動関数を利用した物性研究も並行して進めた。平面波状の電流を摂動的に取り入れる方法と非平衡グリーン関数法で用いられる方法とを利用する2種類の局所的な電流を表現する計算コードを開発して研究を行った。平面波を摂動的に取り扱う計算コードでは、シリコンナノワイヤー内部の複雑な電気伝導状態と不純物がどのような影響を与えるかについて研究した。非平衡グリーン関数に基づく方法では、ベンゼンジチオールとその水素置換体の内部での局所電流の様相を図示し、電子と電子の電気伝導への寄与の違いを明らかにした。

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 9 件)

1. Masato Senami, Masahiro Fukuda, Yoji Ogiso, Akitomo Tachibana, “Torque for electron spin induced by electron permanent electric dipole moment”, AIP Conference Proceedingsに掲載決定, 査読有

2. Masahiro Fukuda, Masato Senami, Yoji Ogiso, Akitomo Tachibana, “Local spin torque induced by electron electric dipole moment in the YbF molecule”, AIP Conference Proceedingsに掲載決定, 査読有

3. Masato Senami, Soujiro Takada, and Akitomo Tachibana, “Description of Photon Field in Dynamics Simulation of Bound States Based on Quantum Field Theory”, JPS Conference Proceedings 1, 016014(5), (2014), 査読有
10.7566/JPSCP.1.016014

4. Masato Senami, Youji Ogiso, Toshihide Miyazato, Fumiya Yoshino, Yuji Ikeda, and Akitomo Tachibana, “Rigged QED Analysis of Local Dielectric Response”, Transactions of the Materials Research Society of Japan, 38[4] pp. 535-544 (2013), 査読有

doi:10.14723/tmrsj.38.535

5. Yuji Ikeda, Masato Senami, and Akitomo Tachibana, “A Non-Hermitian Coupled Perturbed Hartree-Fock Method for Complex Potentials and Calculations of Electronic Structures with Electric Currents”, Transactions of the Materials Research Society of Japan, 38[3] pp. 397-404 (2013), 査読有
doi:10.14723/tmrsj.38.397

6. Masahiro Fukuda, Masato Senami, Akitomo Tachibana, “Spin Torque and Zeta Force in Allene Type Molecules”, Advances in Quantum Methods and Applications in Chemistry, Physics, and Biology Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Volume 27; Eds. Matti Hotokka, Erkki J. Brändas, Jean Maruani, Gerardo Delgado-Barrío; Springer, 2013, Chapter 7, pp 131-139, 査読有
doi:10.1007/978-3-319-01529-3_7

7. Masato Senami, Toshihide Miyazato, Soujiro Takada, Yuji Ikeda, Akitomo Tachibana, “Time Evolution of Heisenberg Operators of Nuclei and Electrons of QED System Based on Field Theory”, Journal of Physics: Conference Series 454, 012052(7), (2013), 査読有
doi:10.1088/1742-6596/454/1/012052

8. Yuji Ikeda, Masato Senami, and Akitomo Tachibana, “Coupled perturbed Hartree-Fock method for non-Hermitian Hamiltonians”, Journal of Physics: Conference Series 454, 012053(9), (2013), 査読有
doi:10.1088/1742-6596/454/1/012053

9. Yuji Ikeda, Masato Senami, and Akitomo Tachibana, “Local electric conductive property of Si nanowire models”, AIP Advances 2, 042168 (16), (2012), 査読有
doi: 10.1063/1.4769887

[学会発表](計 37 件)

1. Masahiro Fukuda, Masato Senami, Akitomo Tachibana, “Ab initio calculation of effective electric field for electron EDM

- experiments”, 7th International conference on Fundamental Physics Using Atoms (FPUA 2014) - Towards better understanding of our matter universe -, 2014/3/14-16, 日本科学未来館(東京)
2. 田川 啓太郎, 瀬波 大土, 立花 明知, 「局所電気伝導率を用いたシリコンナノワイヤーの物性解析」, 第 19 回ゲートスタック研究会, 2014/1/24-25, ニューウェルシティ-湯河原 (静岡)
3. 福田 将大, 小木曾 陽司, 瀬波 大土, 立花 明知, 「電子スピンに対する局所的トルクの理論的研究」, 第 19 回ゲートスタック研究会, 2014/1/24-25, ニューウェルシティ-湯河原 (静岡)
4. Akitomo Tachibana, Masato Senami, “Time evolution of quantum system based on QED: Formulation and Simulation” (Invited), 5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, 2013/12/2-6, 東大寺総合文化センター(奈良)
5. Masato Senami, Soujiro Takada, Akitomo Tachibana, “Time evolution of quantum system based on primary Rigged QED” (Invited), 5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, 2013/12/2-6, 東大寺総合文化センター(奈良)
6. Masato Senami, Yuji Ikeda, Yoji Ogiso, Keitaro Tagawa, Akitomo Tachibana, “Computation Method of Electronic Structures with Electric Currents and Local Conductive Property”, 2013 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ELECTRON DEVICES - SCIENCE AND TECHNOLOGY -, 2013/11/7-9, 筑波大学 東京キャンパス(東京)
7. 瀬波大土, 立花明知, 「Furry 表示の手法を用いた QED に基づく束縛系の量子状態の時間発展シミュレーション」, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 2013/9/25-28, 徳島大学 (徳島)
8. 瀬波 大土, 立花 明知, 「Rigged QED に基づくシミュレーションにおける効率的な光子相互作用の記述」, 第 7 回分子科学討論会, 2013/9/24-27, 京都テルサ (京都)
9. 高田 崇二郎, 瀬波 大土, 立花 明知, 「Rigged QED に基づく数値シミュレーションにおける光子の相互作用の効率的な計算法についての研究」, 第 7 回分子科学討論会, 2013/9/24-27, 京都テルサ (京都)
10. 田中 友貴, 高田 崇二郎, 瀬波 大土, 立花 明知, 「Primary Rigged QED シミュレーションにおける thermalization 過程の効率的な計算方法についての研究」, 第 7 回分子科学討論会, 2013/9/24-27, 京都テルサ (京都)
11. 小木曾 陽司, 立花 明知, 瀬波 大土, 福田 将大, 「電子の電気双極子モーメントのスピントルクへの寄与についての理論的研究」, 第 7 回分子科学討論会, 2013/9/24-27, 京都テルサ (京都)
12. Masato Senami, Soujiro Takada, Toshihide Miyazato, Akitomo Tachibana, “Quantum Dynamics Simulation of Bound States Based on Quantum Field Theory”, The 12th Asia Pacific Physics Conference, 2013/7/14-19, 幕張メッセ(千葉)
13. 瀬波 大土, 立花 明知, 「Rigged QED に基づく光子の相互作用と時間発展」, 第 16 回理論化学討論会, 2013/5/15-17, 福岡市健康づくりサポートセンター (福岡)
14. 小木曾 陽司, 瀬波 大土, 立花 明知, 「電気双極子モーメントとスピントルクについての理論的研究」, 第 16 回理論化学討論会, 2013/5/15-17, 福岡市健康づくりサポートセンター (福岡)
15. 高田 崇二郎, 瀬波 大土, 立花 明知, 「Rigged QED に基づく光子による相互作用についての理論的研究」, 第 16 回理論化学討論会, 2013/5/15-17, 福岡市健康づくりサポートセンター (福岡)
16. 田中 友貴, 高田 崇二郎, 瀬波 大土, 立花 明知, 「Primary Rigged QED に基づく量子状態の時間発展に関する研究」, 第 16 回理論化学討論会, 2013/5/15-17, 福岡市健康づくりサポートセンター (福岡)
17. 池田 裕治, 瀬波 大土, 立花 明知, 「電気伝導状態における電子構造の摂動論的計算手法を利用した局所的な伝導特性の解析」, 第 18 回ゲートスタック研究会, 2013/1/25-26, ニューウェルシティ-湯河原 (静岡)
18. Masato Senami, Toshihide Miyazato, Soujiro Takada, Yuji Ikeda, Akitomo Tachibana, “Effects of a surrounding medium of quantum systems on Rigged QED Simulation”, Conference on Computational Physics (CCP2012), 2012/10/14-18, ニチイ学館(兵庫)
19. Yuji Ikeda, Masato Senami, Akitomo

Tachibana, "Perturbative Approach for Calculating Electronic Structures with Electric Currents", Conference on Computational Physics (CCP2012), 2012/10/14-18, ニチイ学館(兵庫)

20. Masato Senami, Akitomo Tachibana, "Local Quantity Analysis of Nanosize Electronics and spintronics Material", Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid-State Science (PRIME 2012), 2012/10/7-12, Hawaii Convention Center, (USA)

21. Yuji Ikeda, Masato Senami, Akitomo Tachibana, "Analysis of Local Electric Conductive Property for Si Nanowire Models", Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid-State Science (PRIME 2012), 2012/10/7-12, Hawaii Convention Center (USA)

22. Masato Senami, Akitomo Tachibana, "Local Quantity Analysis of Nanosize Electronics and spintronics Material", International Union of Materials Research Societies - International Conference on Electronic Materials 2012 (IUMRS-ICEM 2012), 2012/9/23-28, パシフィコ横浜(神奈川県)

23. Yuji Ikeda, Masato Senami, Akitomo Tachibana, "Analysis of Local Electric Conductivities for Si Nanowire Models", International Union of Materials Research Societies - International Conference on Electronic Materials 2012 (IUMRS-ICEM 2012), 2012/9/23-28, パシフィコ横浜(神奈川県)

24. 瀬波大土, 宮里敏秀, 高田崇二郎, 池田裕治, 立花明知, 「Rigged QED を用いた分子系の時間発展シミュレーション」, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 2012/9/18-21, 横浜国立大学(神奈川県)

25. 瀬波大土, 宮里敏秀, 高田崇二郎, 池田裕治, 立花明知, 「Rigged QED に基づく原子核・電子の量子状態の時間発展」, 第6回分子科学討論会, 2012/9/18-21, 東京大学(東京)

26. 池田裕治, 瀬波大土, 立花明知, 「摂動法に基づいた電流存在下での電子構造計算手法の研究」, 第6回分子科学討論会, 2012/9/18-21, 東京大学(東京)

27. 宮里敏秀, 瀬波大土, 池田裕治, 高田崇二郎, 立花明知, 「外場中に置かれた原子系の Rigged QED シミュレーション」, 第

6 回分子科学討論会, 2012/9/18-21, 東京大学(東京)

28. 高田崇二郎, 宮里敏秀, 池田裕治, 瀬波大土, 立花明知, 「Rigged QED に基づいた原子核場の量子統計性とその挙動の関係の理論的研究」, 第6回分子科学討論会, 2012/9/18-21, 東京大学(東京)

29. 池田裕治, 瀬波大土, 立花明知, 「摂動法に基づいた電気伝導状態の電子構造計算手法」, 第73回応用物理学会学術講演会, 2012/9/11-14, 愛媛大学・松山大学(愛媛)

30. 瀬波大土, 福田将大, 立花明知, 「遷移金属原子内での電子スピントルク」, 第73回応用物理学会学術講演会, 2012/9/11-14, 愛媛大学・松山大学(愛媛)

31. Masato Senami, Masahiro Fukuda, and Akitomo Tachibana, "Electron spin torque in transition element atoms", The conference on Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC 2012), 2012/9/2-7, University of Pavia (Italy)

32. Masato Senami, Masahiro Fukuda, and Akitomo Tachibana, "Electron spin torque in atoms", The 17th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XVII), 2012/8/19-25, the Åbo Akademi University (Finland)

33. Masahiro Fukuda, Masato Senami, and Akitomo Tachibana, "Local spin torque of electron in atoms", ISSP-CMSI international workshop/symposium on Material Simulation in Petaflops era (MASP2012), 2012/7/2,12-13, 東京大学物性研究所(千葉)

34. 瀬波大土, 宮里敏秀, 高田崇二郎, 池田裕治, 立花明知, 「Rigged QED に基づく原子核・電子の時間発展シミュレーション」, 第15回理論化学討論会, 2012/5/24-28, 仙台市福祉プラザ(宮城)

35. 池田裕治, 瀬波大土, 立花明知, 「局所的な電気伝導特性の計算のための伝導状態の電子構造計算手法について」, 第15回理論化学討論会, 2012/5/24-28, 仙台市福祉プラザ(宮城)

36. 宮里敏秀, 瀬波大土, 池田裕治, 立花明知, 「Rigged QED に基づく原子・分子の誘電応答に関する数値シミュレーション」, 第15回理論化学討論会, 2012/5/24-28, 仙台市福祉プラザ(宮城)

37. 高田崇二郎, 宮里敏秀, 池田裕治,

瀬波 大土、立花 明知, 「Rigged QED に基づく原子核場の挙動とその統計性の関係についての理論的研究」, 第 15 回理論化学討論会, 2012/5/24-28, 仙台市福祉プラザ (宮城)

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕
出願状況(計 0 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 0 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

研究成果の一部として計算コードを以下のホームページで公開している
<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

瀬波 大土 (SENAMI, Masato)
京都大学・大学院工学研究科・助教
研究者番号：4 0 4 3 1 7 7 0

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：