

審査の結果の要旨

氏名 胡 春平

近年様々なナノ構造を作製する技術が発展してきたため、超微細素子の可能性を念頭にナノ構造の電気特性の研究が盛んになってきている。ナノ構造の電気特性計測や将来の応用においては局所領域に強いバイアス電圧や電場が印加されるため、理論研究の面では、強電場中の電子状態を計算するための手法と計算プログラムの開発が盛んになりつつある。このような手法を用いた理論計算例も増えているが、その大部分は原子位置を固定して解析しており、ナノ構造形成や電場印加による構造緩和、あるいは電界場中の原子振動など、原子に働く力の評価が必要な現象はまだあまり調べられていない。本論文では、強電場中ナノ構造の各原子に作用する力を第一原理計算するモジュールを作成し、これを用いて印加電場による Al 表面上の吸着 Al 原子の安定位置と振動特性の変化、Na 原子鎖の電気抵抗の振動に対する原子緩和の効果、Na 原子鎖の安定構造のバイアス電圧依存性を理論解析した。本論文は7章からなる。

第1章は緒言であり、ナノ構造での電界・電気伝導関連現象の重要性を述べ、これに関する既存の研究をまとめている。さらに、ナノ構造の電界・電気伝導に対する第一原理計算において原子に働く力の考慮が不十分であることを指摘して本研究の目的を明確にした。

第2章では、本研究の計算手法である境界マッチング密度汎関数法と、この方法において原子に働く力を計算する方法について述べている。Hellmann-Feynman の定理に基づき、境界マッチング密度汎関数法の定式化に合わせて、ナノ構造の各原子に作用する力の表式を導いた。またプログラム作成においては、Richardson 補外法を用いて計算精度を高めた他、複数のアルゴリズムによる力計算を比較してプログラムの信頼性をチェックした。

第3章では、作成した力計算モジュールの妥当性を検証するため、比較しうる計算結果があるモデル系に対して計算を行った。ジェリウム電極間に Na 原子1個を配置した系において Na 原子に働く力の原子位置およびバイアス電圧による変化を調べた結果と、ジェリウム表面上の Na 原子の安定吸着位置について調べた結果が、いずれも既報の計算結果とよく一致することを確認した。これにより作成した力計算モジュールの妥当性が示された。

第4章では、作成したモジュールを用いて Al 表面上の吸着 Al 原子の安定位置と振動特性とを調べた。 $\pm 5\text{V/nm}$ の電場を印加することにより表面 - 吸着原子間の安定距離が $\pm 6.7\%$ 変化するとの計算結果を得、これが誘起電荷とイオン芯との間のクーロン相互作用から理解できることを示した。次に上記の範囲では力が安定位置からの変位に比例していること、また表面 - 吸着原子間伸縮振動の振動数が電場にほとんど依存しないことを示した。

第5章では、ジェリウム電極間 Na 原子鎖の電気抵抗の鎖長依存性に対する原子緩和の効果をバイアス電圧 0V の場合について解析した。鎖長 $1\sim 4$ 原子の原子鎖の安定構造がいずれも対称的な直線構造であること、および安定構造における Na - Na 原子間距離がバルク

結晶中より短いことを示した。次に構造緩和の電気抵抗への影響を調べてみると、鎖長 2～4 原子の場合に初期配置では鎖長による電気抵抗の振動が見られたが、構造緩和後には鎖長による変化が非常に小さくなり、その抵抗値は量子化された値 (12.9k Ω) に近づいた。電気抵抗の振動現象は既存の理論研究で予言されているものであるが、構造緩和によりその程度が大幅に減るということは重要な知見である。

第 6 章では、前章の計算に引き続いて、バイアス電圧の影響を 3 原子鎖の場合に対して調べた。ゼロバイアス時には対称的な構造が安定であったのに対し、バイアス電圧印加により中央の Na 原子に左右の Na 原子とは逆方向の力が働き、非対称な構造が安定になることを示した。また、各原子の変位が約 1V までは印加電圧に比例し、これを超える電圧では非線形な振舞いを示すことを見出した。次に、各原子の変位の方向は、この系でも誘起電荷とイオン芯とのクーロン相互作用で理解できることを示した。また、1V 付近を境に変位の振舞いが大きく変化することは誘起電荷の分布の変化とよく対応していることを示した。さらに、初期配置と構造緩和後の電流－電圧特性を比較したところ、高バイアス電圧印加時には構造緩和により有意な電流現象が見られることを示した。

第 7 章は総括である。

以上のように、本論文は、表面ナノ構造における電子輸送現象を密度汎関数法に基づいて理論解析するための境界マッチング密度汎関数法に基づき、電界下のナノ構造において原子に働く力を第一原理計算するモジュールを開発した。さらに、このモジュールを用いて、印加電場による原子構造の変化とこの変化が電気特性におよぼす影響とを理論解析し、多くの場合に原子構造緩和が大きな影響を及ぼすことを明らかにした。よって本論文の表面物性工学、電子物性工学への寄与は大きい。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。