

審査の結果の要旨

氏名 古家 真之介

将来の超微細素子の可能性を探索するために、ナノ構造の電気特性の研究が盛んに行われている。電極間原子鎖はもっとも簡単なナノ構造として実験・理論両面で活発に研究が進められているが、その電気特性はまだ十分明らかになったとはいえない。特に、構造と電気特性との関連を明らかにすることが強く望まれている。本論文は、電極間 Al 原子鎖の電気特性について、電極-原子鎖接合構造と原子鎖中の不純物の影響に着目して第一原理計算により解析し、ナノ構造およびナノスケール素子の電気特性の制御・設計に役立つ指針を導出しようとしたものである。本論文は 6 章からなる。

第 1 章は緒言であり、量子効果の顕現等の観点から電極間原子鎖の電気特性の研究の意義を述べると共に、電極間原子鎖に関するこれまでの実験および理論研究をまとめている。そして、理論計算間に見られる不一致の原因が明確にされていないこと、有限バイアス電圧を印加した際の原子鎖内でのポテンシャル変化の振る舞いが十分には理解されていないことを指摘して、本研究の目的を明確にした。

第 2 章では、本研究の計算方法を述べている。電極間にバイアス電圧が印加され定常電流が流れている非平衡開放系の電子状態を自己無撞着に決定することが本研究においては本質的に重要であるが、このために本研究では境界マッチング密度汎関数法を用いている。この方法の概要を述べるとともに、その基盤となる密度汎関数法の概略を述べている。

第 3 章では、Al(100)表面に接続された Al 原子鎖の電気特性について、電極と原子鎖との接合部の構造に注目して第一原理計算で解析した結果を述べている。Al 原子 3 個から成る原子鎖が Al(100)表面の 4 個の Al 原子の中央（以下 hollow サイトと記す）および 1 個の Al 原子の真上（ontop サイトと記す）に接続された場合を比較し、0 V におけるコンダクタンスの値が両者で大きく異なること、前者の電流-電圧特性が直線的であるのに対し後者のそれには著しい非直線性が見られること等を明らかにした。さらに、両者の電気特性の違いに対応して原子鎖内のポテンシャル変化にも顕著な違いが見られ、またポテンシャル変化のバイアス電圧依存性が原子鎖の微分コンダクタンスの変化とよく対応することを見出した。さらに、原子鎖部分の局所状態密度に見られるピークの位置の振る舞いもポテンシャル変化の振る舞いとよく対応すること、ontop サイトに接続した場合の方が hollow サイトに接続した場合よりも局所状態密度のピークが鋭いことを見出した。以上の結果を原子鎖と電極との相互作用と関連付けて考察するとともに、既報の理論計算に見られた Al 原子鎖のコンダクタンスの計算値の不一致が接合部の構造の違いから理解できることを示した。

第 4 章では、Al 原子鎖中の 1 原子を Na 原子に置換することによる電気特性の変化を第

一原理計算により解析した結果を述べている。不純物の導入によるコンダクタンス低下という予想された結果が得られただけでなく、不純物をどの位置に導入してもバイアス電圧印加によるポテンシャル変化が Na 原子位置に局在するというところを見出した。さらに、3章の場合と同様に、ポテンシャル変化の振る舞いと局所状態密度のピークの振る舞いとがよく対応することを見出した。以上のことから、3章と4章の結果を隣接部分間の相互作用の観点から統一的に理解できる可能性を示した。以上の結果は、ナノ構造をデザインすることによってバイアス電圧によるポテンシャル変化を制御し、ひいては電気特性を制御する可能性を示したものであり、超微細素子を目指したナノ構造の設計に有用な知見と考えられる。

第5章では、より多様な原子種に対応するためにノルム保存型擬ポテンシャルを境界マッチング密度汎関数法に組み込むための方法論の概要と、これを組み込んだプログラムのテスト計算の結果を述べている。Al 原子鎖については、境界マッチング密度汎関数法と原理的に同等の精度が期待できノルム保存型擬ポテンシャルが既に組み込まれている他の方法論による既報の結果とよく一致する結果を得た。d 軌道を含む原子種についてはまだ問題が残っているものの、方法論とプログラムの妥当性を検証することができたといえる。

第6章は総括である。

以上のように、本論文は、電極間 Al 原子鎖の電気特性を第一原理計算により解析した。電極-原子鎖接合部の構造および原子鎖中の不純物の効果に注目し、原子鎖内のポテンシャル変化や局所状態密度の観点から解析を行うことにより、ナノスケール構造の電気特性を制御・設計する上で有用な知見を得た。よって本論文のナノ物性工学、計算マテリアル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。