

審査の結果の要旨

氏名 田中 倫子

静電容量は、電子デバイスの動作を大きく左右する重要な物理量である。近年の半導体デバイス微細化に伴い、ナノスケールでの静電容量の振る舞いへの関心が高まってきており、走査プローブ顕微鏡等を用いてこれを計測する試みも活発化している。しかし、静電容量が測定条件などに敏感であることや、計測量と静電容量との関連が必ずしも明確になっていないこと等から、ナノスケールでの静電容量についての理解はまだ十分でない。理論的にも、メゾスコピック系において量子効果まで考慮した静電容量の理論が確立しているものの、ナノスケールでの振舞いは十分調べられてはいない。本論文は、このような現状に鑑み、近年可能になってきた電圧印加第一原理計算を用いてナノ構造の静電容量を原子レベルで解析し、電極表面の原子・電子構造と静電容量の関係および走査プローブ顕微鏡を利用した物性計測結果と静電容量との関係を解明しようとしたものである。本論文は7章からなる。

第1章は緒言であり、静電容量について、走査容量顕微鏡を用いた試料中キャリア分布の評価、原子間力顕微鏡を用いた探針-試料間静電容量の評価等の実験的研究、およびメゾスコピック系の静電容量理論やカーボンナノチューブの静電容量計算等の理論的研究を概観し、実験データ解析の困難さと既存の理論計算の方法論等の不十分さを指摘して、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。静電容量の振舞いを原子レベルで評価するために、半無限電極とバイアス電圧印加とを考慮した自己無撞着計算法である境界マッチング密度汎関数法を用いている。この手法を用いた計算により、バイアス電圧印加による誘起電荷量を評価し、これを用いて静電容量を計算している。この静電容量評価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および境界マッチング密度汎関数法の概略を述べている。

第3章では、本論文の研究の前段階として行われ、本論文研究の理解に重要な、平行平板キャパシタの静電容量評価の研究について概観している。前章で述べた方法論を用い、ジェリウム電極が対向している系について静電容量の電極間距離依存性を評価した。その結果、距離がナノメートル程度になると古典電磁気学で得られる値と明らかな違いが生じたが、この結果が電極中の電子の真空領域へのしみ出しと対向電極への電子の透過による実効的な誘起電荷量の減少とから理解できることを述べている。

第4章では、非接触原子間力顕微鏡を用いた探針振動エネルギーの散逸量計測について解析した結果を述べている。この計測では通常探針-試料間の接近とともに散逸量が増加するのに対し、ごく短距離で散逸量が急激に減少するという結果が最近報告されているが、

その原因は未解明である。そこで、第 3 章の結果を基にその原因を考察した。すなわち、散逸の起源として探針振動による探針-試料間静電容量の変化から生じる変位電流が誘起するジュール熱が挙げられるが、静電容量における前記の量子的振舞いを考慮してこのジュール熱を評価した。その結果、探針の振動振幅が小さい場合には、距離が極端に短い領域で距離の減少とともにジュール熱が減少するという非古典的振舞いが現れることを見出した。問題としている実験結果の振舞いにおいてこのジュール熱の寄与が支配的であるか否かについてはさらに検討が必要であるものの、ジュール熱散逸がこのような非古典的振舞いを示す可能性を初めて指摘した。

第 5 章では、STM 探針-試料間の静電容量について検討した結果を述べている。第 3 章で述べたものと同様の静電容量の振舞いを、一方の電極に微小な突起を乗せた対向電極系に対する計算で得ている先行研究があるが、この先行研究では電圧印加時の電子状態を自己無撞着に計算していなかった。そこで本研究で同様の計算を試みたところ、距離が非常に短い領域でも距離減少とともに静電容量が増加し続けるという、先行研究とは定性的に異なる振舞いを得た。この違いの原因を検討し、非自己無撞着な計算で先行研究を定性的に再現する結果を得て、先行研究が不十分な方法論を用いたために定性的に誤った結果を得ている可能性を指摘した。

第 6 章では、第 3 章と第 5 章とで静電容量の距離依存性に定性的に異なる振舞いが見られること等を受け、量子点接触について静電容量の評価を行った。この系については伝導度について実験・理論の先行研究多数あることを踏まえ、伝導度の振舞いについてもあわせて評価している。その結果、静電容量については電極表面の形状により非古典的振舞いが見られる場合とそうでない場合があることを見出し、その違いの原因について誘起電荷量分布から説明を試みている。伝導度については、電極間距離を引き伸ばしていった際に、伝導度が一旦上昇してからゼロに落ちる場合があることを見出した。これは実験で見られる振舞いとも一致するが、この振舞いを説明するために先行理論研究では湾曲した原子鎖構造が引き伸ばしとともに直線的になると考えていた。本研究は、より自然な過程で実験結果を説明しうることを示した点で重要である。

第 7 章は総括である。

以上のように、本論文は、ナノ構造の静電容量を第一原理計算により解析した。静電容量の電極間距離依存性とその電極表面構造による変化、および走査プローブ顕微鏡等による実験計測との対応に注目した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マテリアル物性工学、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。