

論文の内容の要旨

論文題目

Development of Multi-probe Electron Transport Simulator
and Simulation of Four-probe Measurement at the Nanoscale
(ナノスケールにおける多端子電気伝導シミュレータの開発及び
ナノ構造系の4端子抵抗の理論解析)

氏名 寺澤 麻子

1. 緒言

近年の電子デバイス微細加工技術の発展によって、電子デバイスの最小加工サイズは数十ナノメートルの領域にまで至っており、今後更なるデバイスの微細化が期待される。しかし、ナノスケールでは、バリスティック伝導や位相干渉等の影響のため、マクロスケールにおけるオーミックな伝導モデルに基づいた電気伝導理論をそのまま適用することはできず、今後更なる微細化が期待されるナノデバイスにおいて、その設計指針を立てることが難しいという問題が生じてくる。このため、ナノデバイス及びナノ構造体の特異な電気伝導特性を知ることは、今後のデバイス技術の発展において非常に重要である。

ナノ構造体の電気伝導特性を明らかにしようとする試みは、これまでに実験と理論の両面からなされてきている。実験手法の中で注目されるものの1つが、接触抵抗に影響されない電気伝導特性の計測手法である4端子抵抗測定法をナノ構造体へと応用する試みである[1-4]。しかし、ナノ構造体の4端子抵抗は、オーミックな伝導モデルから予想できない振る舞いを見せることがある。例えば、Gaoらによる単層カーボンナノチューブ(SWNT)の4端子計測[5]では、極低温において4端子抵抗がゲート電圧に対して振動し、局所的に負の値が観測されている。また、Makarovskiらは、同じく低温におけるSWNTの4端子計測において、オーミックな伝導モデルでは考えられない非局所抵抗の存在と、この非局所抵抗のゲート電圧に対する振動を報告している[6]。ナノ構造体の多端子伝導がこのような振る舞いを見せることに関しては、ナノスケールにおける負の4端子抵抗の出現の可能性が指摘されているものの[7]、電子波干渉の存在下での4端子抵抗の特異な振る舞いを評価するための明確な指針は得られていない。

ナノ構造体の多端子伝導の研究における上記のような背景を踏まえ、本研究は信頼性の高い電子状態計算・電気特性計算手法を用いてナノスケール多端子電気伝導シミュレータを開発し、ナノスケールの物理現象と計測される物理量との関係の解明を目指した。

2. 研究手法

目的とする多端子電気伝導シミュレータ開発のため、本研究では非平衡Green関数法及び自己無撞着密度汎関数強束縛(SCC-DFTB)法を用いた[8-10]。Green関数法においては、電子状態を陽

に計算する領域（以下では「散乱領域」とする）に接続した半無限プローブの影響を Green 関数における自己エネルギーの形で考慮することができる。また、散乱領域の Green 関数 $\mathbf{G}(E)=[\mathbf{E}\mathbf{S}-\mathbf{H}-\Sigma(E)]^{-1}$ の計算においては、SCC-DFTB法による原子軌道基底表現を用いた。SCC-DFTB法は、電荷分布が作る静電ポテンシャルを考慮し、強束縛法の枠内で自己無撞着にハミルトニアン行列 \mathbf{H} を決定する手法である。また、プローブ p の自己エネルギー $\Sigma_p(E)$ の計算にはモードマッチング法を用いた[11,12]。

3. 低温・低バイアス極限における4端子抵抗の解析

開発した多端子電気伝導シミュレータを用い、様々なナノ構造系の4端子抵抗の、低温・低バイアス極限における電子のエネルギーに対する依存性を調べた。[13,14]

a) 炭素原子鎖の4端子抵抗スペクトルにおける干渉効果の解析

まず一般的な特性を調べるため、炭素原子鎖からなる単純な4端子系についてエネルギーに対する4端子抵抗スペクトルの計算を行った。この4端子抵抗スペクトルは電子のエネルギーに対する振動を見せ、極小点では負の値を生じる場合が見られた。さらに、この振動の様子は試料-プローブ間の相対的位置関係により変化した。このような4端子抵抗の挙動について電子波干渉モデルを用いて考察した結果、異なる伝導経路における多重反射過程の違いによる強い干渉が、4端子抵抗の振動および負の4端子抵抗をもたらすことがわかった。

このような電子波干渉モデルに基づく4端子抵抗スペクトルの解析を目的として、4端子抵抗スペクトルに現れる振動のピーク間隔の入射エネルギー依存性である「ピーク間隔スペクトル」を導入した。数値計算から得られた4端子抵抗のピーク間隔スペクトルと、電子波の間の位相差がその行路差のみから決まるとした単純な干渉モデルから予測されるピーク間隔スペクトルとを比較した結果、両者の間のずれとして、試料-プローブの接点における散乱の際の位相シフトの効果がピーク間隔スペクトルに現れることがわかった。

b) より複雑な系に対する解析

(5,5)-カーボンナノチューブからなる4端子系について4端子抵抗スペクトルを計算した結果として、炭素原子鎖の場合と同様に、試料-プローブの位置関係に依存した4端子抵抗スペクトルの振動および負の4端子抵抗を得た[13]。この4端子抵抗スペクトルに対してピーク間隔スペクトルの解析を行ったところ、異なるプローブ間隔で共通の位置にピーク間隔スペクトルに落ち込みが表れた。この落ち込みはプローブ・試料の接触位置における共鳴状態と関連していることが、接点における射影状態密度との比較より明らかになった。

次に、炭素原子鎖からなる4端子系に水素原子を配した系についても、同様に4端子抵抗スペクトル、およびそのピーク間隔スペクトルの解析を行った。その結果、水素原子と炭素原子鎖の距離に応じてピーク間隔スペクトルは複雑に変化するが、ピーク間隔スペクトルの解析によって接点における共鳴状態の影響と水素原子の吸着による共鳴状態の影響を分離することができた。

c) デコヒーレンスの影響の現象論的解析

上述の解析では電子・フォノン散乱等の影響によるデコヒーレンスの影響を無視していた。そ

ここで4端子抵抗の振動的振る舞いへのデコヒーレンスの影響について、現象論的なデコヒーレントモデルを導入し解析を行った、その結果デコヒーレンスによって4端子抵抗の振動の振幅は小さくなるが、ピーク間隔スペクトルはデコヒーレンスの影響を殆ど受けないことを示した。

4. 有限バイアスの存在下における多端子伝導シミュレーション

上記の計算結果は実験と定性的に対応しており、実験における干渉効果の影響を強く示唆していると考えられる。しかし上記の計算が低温、低バイアス極限において行われているのに対し、実験における電圧印加はナノスケール系では強い電場勾配となる。そのため、現実的な系では小さな電圧印加であっても電子状態に対する影響が無視できるとは限らない。そこで、原子-電子の相互作用ポテンシャルを扱うSCC-DFTB法に、バイアス電圧に由来するポテンシャル勾配を導入し、有限バイアス印加時の2端子および多端子に対するシミュレーションを行った。

炭素原子鎖からなる4端子系に対して、電流プローブ間に有限のバイアス電圧 V_{14} を印加し、電圧プローブ間の電位差 V_{23} は、線形応答近似の範囲内で電圧プローブの電流ゼロの条件を満たす様に、 $V_{23} = [R_{4pt}/R_{2pt}]_0 V_{14}$ とした。ここで、 $[R_{4pt}/R_{2pt}]_0$ は低温・低バイアス極限における4端子抵抗/2端子抵抗である。このような条件のもとで計算したところ、電圧プローブに流れる電流は電流プローブに流れる電流に比べごく小さくなったものの、有限の値を取っており、バイアス電圧変化に対し非線形に変化した。従って、電圧プローブの電流ゼロの条件を満たすためには、再帰的なバイアス電圧決定が必要になる。

5. まとめ

本研究では、複雑なナノ構造系の低コストかつリアルスティックな電気伝導計算を目的とした多端子伝導シミュレータを開発し、様々なナノ構造系の状態が4端子抵抗にどのように現れるかを解析した。本研究において得られた結果は実験と定性的に対応しており、実験で見られた一見奇妙な4端子抵抗の振る舞いがナノスケール系の特異な伝導現象から説明できることを示している。このように本研究で得られたナノスケールの多端子伝導に対する新たな知見は、今後さらなる発展が見込まれるナノスケール系の多端子電気伝導の実験・理論において重要性を増していくことが期待される。

6. 参考文献

- [1] Y.-F. Hsiou *et. al.*, Jpn. J. Appl. Phys., **44**, 4245 (2005).
- [2] Y. Noshio *et. al.*, Jpn. J. Appl. Phys., **46**, L474 (2007).
- [3] S. Yoshimoto *et. al.*, Nano Lett. **7**, 956 (2007).
- [4] Y. Kitaoka *et. al.*, Appl. Phys. Lett. **95**, 052110 (2009).
- [5] B. Gao *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **95**, 196802 (2005).
- [6] A. Makarovski *et. al.*, Phys. Rev. B, **76**, 161405(R) (2007).
- [7] S. Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic systems" (Cambridge University Press, New York, 1995).
- [8] D. Porezag *et. al.*, Phys. Rev. B **51**, 12947 (1995).

- [9] M. Elstner *et. al.*, Phys. Rev. B **58**, 7260 (1998).
- [10] Th. Frauenheim *et. al.*, Phys. Stat. Sol. (b) **217**, 41 (2000).
- [11] T. Ando, Phys. Rev. B **44**, 8017 (1991).
- [12] P. A. Khomyakov *et. al.*, Phys. Rev. B **72**, 035450 (2005).
- [13] A. Terasawa *et. al.*, Phys. Rev. B, **79**, 195436 (2009).
- [14] A. Terasawa *et. al.*, New J. Phys., **12**, 083017 (2010).