

審査の結果の要旨

氏名 寺澤 麻子

近年の電子デバイスの一層の微細化によって、ナノスケール構造体の電気伝導特性の理解がますます重要になってきている。この中で、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へと応用する試みも進められている。しかしナノ構造の4端子抵抗は、4端子抵抗値のゲート電圧に対する振動や負の4端子抵抗値の出現など、マクロな系では見られない特異な振舞いを示すことがある。ナノスケールにおける負の4端子抵抗の出現自体は理論的に既に可能性が指摘されていたものの、具体的なナノ構造に即して4端子抵抗の特異な振舞いを評価するための明確な指針は得られていなかった。本論文は、ナノスケール多端子電気伝導シミュレータを開発し、ナノ構造の電気特性、特に4端子抵抗の振舞いの解明を目指したものである。本論文は6章からなる。

第1章は緒言であり、4端子抵抗測定の原理を述べた後、ナノスケール4端子抵抗測定および極低温でのカーボンナノチューブの4端子抵抗測定の実験研究を概観し、負の4端子抵抗の出現をはじめとする特異な振舞いが見られることを指摘している。次に4端子抵抗に関する理論研究について概観し、負の4端子抵抗の出現の可能性が指摘されており、また4端子抵抗のシミュレーションが可能な計算方法・プログラムがいくつか開発されているものの、具体的な系に即して4端子抵抗の振舞いを解析する上では信頼性等の点で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密度汎関数強束縛法および非平衡グリーン関数法を述べている。まず基盤となる密度汎関数法の概略を述べた後、密度汎関数強束縛法とこの方法における電荷の自己無撞着な決定法について説明している。その後、非平衡グリーン関数法の概略を説明すると共に、効率的な非平衡グリーン関数法計算のために導入したモードマッチング法を説明している。最後に自己無撞着な密度汎関数強束縛法を有限バイアスに拡張する方法を、多端子系における静電ポテンシャルの決定法に特に注意を払いながら説明している。

第3章では、炭素原子鎖からなる単純な4端子系に対してゼロバイアス極限での4端子抵抗の電子エネルギー依存性（以下、4端子抵抗スペクトルと記す）の計算を行った結果とそれに対する考察を述べている。4端子抵抗スペクトルが試料-プローブ間の相対的位置関係に依存した振動を見せ、極小点では負の値を生じる場合が見られた点で実験事実を再現していること、およびこれらの挙動がプローブ間の電子波の多重反射による干渉から理解できることを述べている。さらに、この電子波干渉モデルに基づいてより詳細な解析を行う目的で、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。そして、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、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両者の間のずれとして現れることを明らかにした。以上に加えて、電子-フォノン散乱等によるデコヒーレンスが4端子抵抗スペクトルの振舞いに及ぼす

影響についても現象論的なモデルを用いて解析し、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ほとんど変化しないことを示した。

第 4 章では、より複雑な系に対する多端子伝導特性のシミュレーションとして (5, 5)-カーボンナノチューブからなる 4 端子系についてゼロバイアス極限での 4 端子抵抗スペクトルを計算した結果について述べている。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。またピーク間隔スペクトルの解析においては、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現れた。この落ち込みがプローブ・試料の接触位置における共鳴状態と関連していることを、接点における射影状態密度との比較より明らかにした。

第 5 章では、有限バイアスの影響を陽に考慮して多端子伝導特性を考察した結果を述べている。まず一直線上に並んだ 2 本の炭素原子鎖について 2 電極系の計算を行い、原子鎖間の隙間における電界集中や系の静電容量に関して物理的に妥当な振舞いを得、これにより開発したシミュレータへの有限バイアス効果の導入が適切になされていることを確認した。次に、ランダウア・ビュティカーの公式とゼロバイアス極限での透過関数スペクトルから有限バイアスでの 4 端子抵抗を見積る評価式を導出した。さらに、この評価式によって決定した電圧プローブの化学ポテンシャル値を用いて数値計算を行った結果、電流端子間の電流よりはずっと小さいが有限の電流が電圧プローブに流れることを示し、この電流が透過関数スペクトルのバイアス電圧印加による変化に起因するものであることを明らかにした。この結果から、導いた評価式が有限バイアスでの 4 端子抵抗の粗い評価に有用である一方、精密な評価のためには電圧プローブ中の電流がゼロという条件を満足するための自己無撞着計算が必要であると述べている。

第 6 章は総括である。

以上のように、本論文は、ナノスケール多端子電気伝導シミュレータを開発し、これを用いて 4 端子抵抗スペクトルの振舞いを解析した。電子波の干渉やプローブ-試料間接点での散乱、印加バイアス電圧等がナノスケール 4 端子抵抗の振舞いに及ぼす影響を明らかにし、ナノスケール電気特性計測を解析する上で有用な知見を得た。よって本論文のナノスケール電子物性学、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。