

審査の結果の要旨

氏名 劉 偉

ナノスケール構造体の電子輸送特性の研究は、電子デバイスの微細化とともにその重要性が一段と増していることから、盛んに研究されている。しかし、これまでの研究の多くは定常状態における電子輸送特性に関するものである。実用的なデバイスが既に GHz オーダーの周波数で動作していることを考えれば過渡的輸送特性の理解の重要性は明らかであるにもかかわらず、これまでナノスケール構造体の過渡的電子輸送特性の研究は少なく、あまり理解が進んでいなかった。本論文は、ナノスケール構造体の過渡的電子輸送特性のいくつかの重要な側面について理論計算による解析を行い、そ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、ナノスケール電子輸送特性に関するこれまでの実験的・理論的研究を概観している。定常状態の研究に比べて過渡応答特性の研究は少なく、理論計算についてはコヒーレント輸送特性についても複数準位を持つ構造については理解が十分とは言えないこと、電子輸送特性への電子-フォノン散乱の影響については過渡応答特性に関しても先行理論研究はあるものの、エネルギー移動に対する考慮が不十分で非物理的な振る舞いが見られていること、電子-フォノン散乱による温度変化まで含めた過渡応答特性の理論解析はまだなされていないこと等を指摘して、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非平衡グリーン関数法を述べている。まず本研究で対象とする 2 つの電極に接続したナノ構造体の計算モデルを説明し、またある時刻に両電極にバイアス電圧を印加し、この印加電圧の立ち上がり時間が無限小である場合を考えることを述べた後、非平衡グリーン関数法の概略を述べている。さらに、この方法での電流およびエネルギー流の表式を、定常状態と過渡状態、電子-フォノン散乱を考慮しない場合とした場合のそれぞれについて提示している。

第 3 章では、複数準位から成るナノ構造体における過渡応答特性を計算した結果とそれに対する考察を述べている。また、この場合の過渡電流をほとんど独立な電流成分に分解する手法を提案している。この方法は電極とナノ構造体との結合が弱い場合に特に有効であり、複雑な挙動を示す過渡電流を、より単純な振る舞いを示す電流成分の和として理解することを可能にする。この方法をナノ構造体が水素分子およびオクタテトラエン分子の場合に適用し、過渡電流が単純な減衰振動挙動を示す成分に分解できることを示した。さらに、オクタテトラエンの場合には、8 個の成分全部でなく、その中の数個が全電流の挙動を決めていることを明らかにした。

第 4 章では、弾性的な（すなわち電子-フォノン非弾性散乱のない場合の）エネルギー流の過渡特性を、ナノ構造が単一準位の場合に対して考察している。エネルギー流が電流

と同じ緩和時間と振動周期を持つ一方、その位相は電流と逆になる場合があることを示した。また、定常状態においては 2 つの電極におけるエネルギー流は必ず釣り合っているのに対し、電圧印加直後の過渡応答領域では、電圧印加に伴う電子エネルギー分布の変化によりこのバランスが崩れ得ることを明確化した。

第 5 章では、電子 - フォノン散乱を考慮した過渡応答特性を、電子 - フォノン散乱による温度変化も含めて計算し、考察している。温度変化を考慮するためには電子系とフォノン系との間のエネルギー移動を正しく考慮する必要があるが、バイアス電圧印加による電子エネルギーの変化があるため、この評価は容易ではない。ここでは、第 4 章の結果をもとに、このエネルギー移動について、平衡状態（電圧印加前の状態）で正しい表式と定常状態（電圧印加から十分時間が経過した後の状態）で正しい表式とを導いた。そして、これらの表式を用いることにより、先行研究でみられた、フォノン数がゼロであってもフォノン系からのエネルギー放出が起ってしまうという非物理的な振る舞いを除去することができることを示した。さらに、2 つの表式で得られる結果の差が数%にとどまることから、これらの表式によって少なくとも定性的には過渡応答特性や局所温度上昇を評価できることを示した。また、定常状態ではフォノンエネルギーより低いエネルギーに対応するバイアス電圧では電子 - フォノン散乱が起りえないのに対し、過渡領域においてはこのようなバイアス電圧に対しても電子 - フォノン散乱とそれによる温度上昇が起こること、そしてこの温度上昇により過渡電流が抑制されることを示した。

第 6 章は総括である。

以上のように、本論文は、ナノ構造体における過渡的電子輸送特性を理論計算により解析した。複雑な挙動を示す過渡電流をより単純な挙動の成分に分解する手法を提案し、またエネルギー流および電子系 - フォノン系間のエネルギー移動を正しく考慮した上で電子 - フォノン散乱とそれによる温度変化が過渡的電子輸送特性に及ぼす影響を明らかにし、ナノスケール電気特性を理解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。