



*Univ Tsukuba*



# ナノスケール系の量子伝導シミュレーション

小林伸彦

筑波大学 電子・物理工学専攻(物理工学系)

# 原子分子レベルからの電子状態研究

computational material science  
nano simulation  
computational nanotechnology

基礎物理  
固体物理学  
ナノサイエンス  
物質科学  
ナノ構造の基礎物性

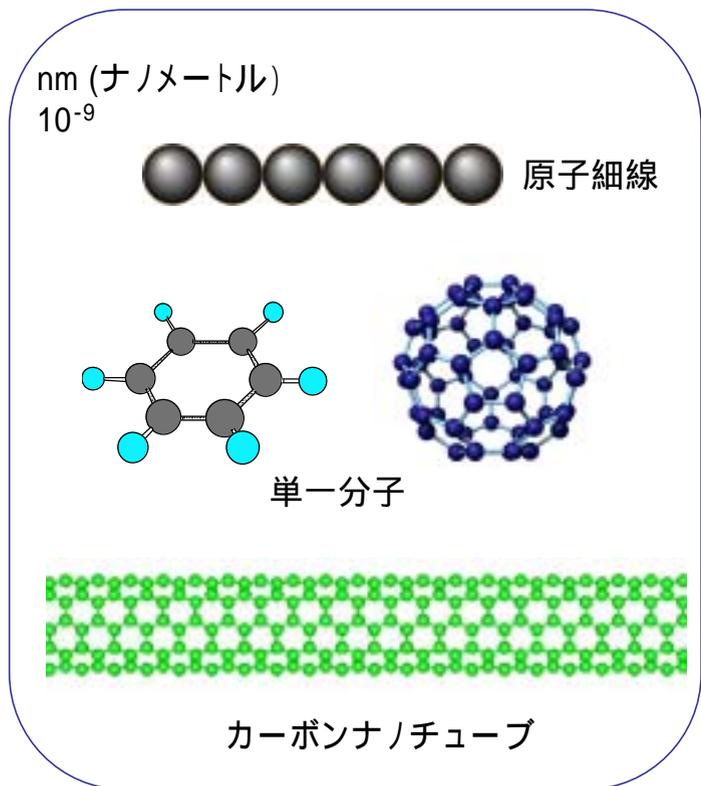
ナノテクノロジーへの  
応用研究  
ナノエレクトロニクス  
分子エレクトロニクス

計算物性物理学  
計算科学・シミュレーション研究  
電子状態計算理論  
大規模数値計算

# ナノスケール系の電気伝導の理論シミュレーション

ナノスケール系

電気伝導



マクロ系

オームの法則

$$V(\text{電圧}) = I(\text{電流}) \times R(\text{抵抗})$$

粒子性



ナノスケール系

波動性

量子論に基づいた理論による  
電気伝導特性解析

量子効果

# ナノスケール系の電子状態・電気伝導の理論シミュレーション



スーパーコンピュータシステム



PC Cluster



ナノ構造体(原子細線、単一分子)



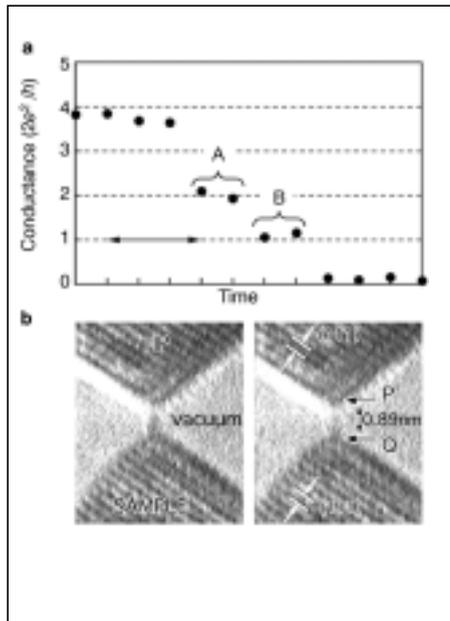
電気伝導特性？  
抵抗？  
電流電圧特性？  
スピン伝導特性？

ナノスケールトランジスタ  
ナノスケール配線  
ナノスケールスイッチ

理論設計

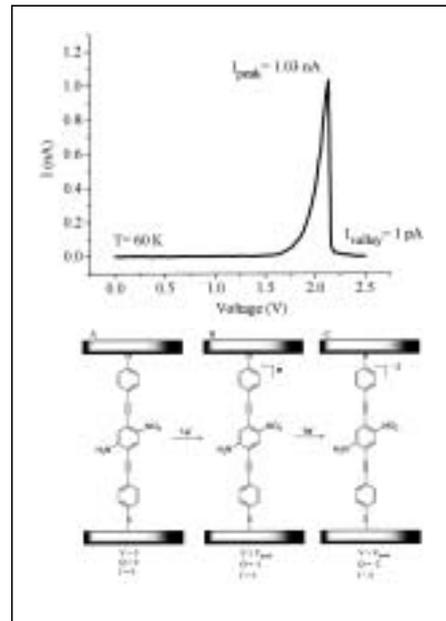
# Experiments : Transport in nanostructures

## Atomic wire



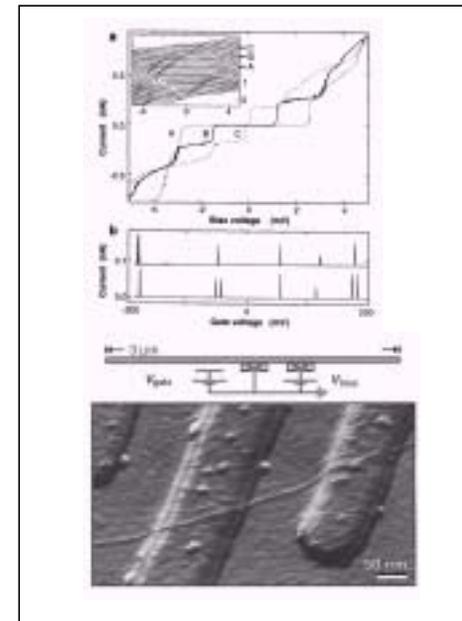
H.Ohnishi, Y.Kondo, K.Takayanagi,  
Nature 395 780 (1998)

## Molecule



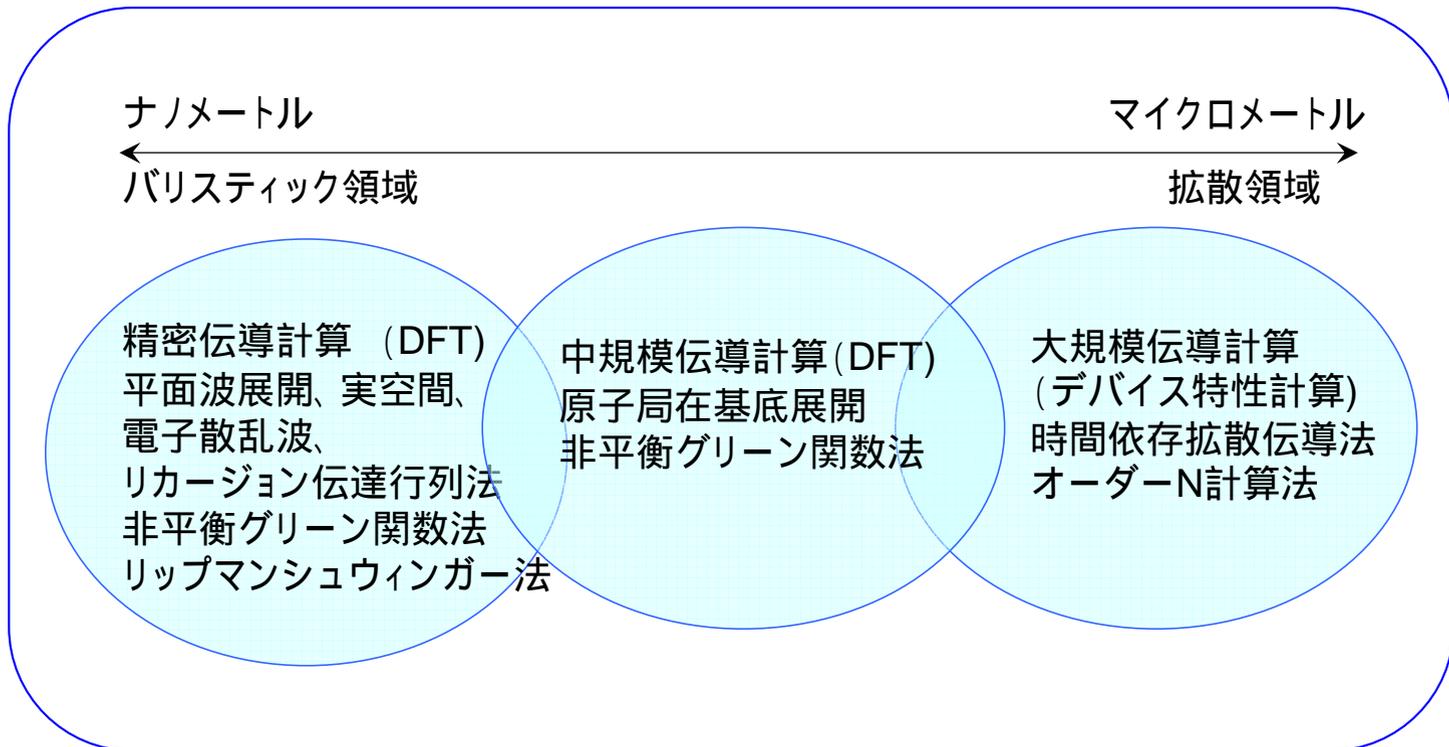
J.Chen, M.A.Reed, A.M.Rawlett,  
J.M.Tour, Science 286 (1999) 1550

## Nanotube

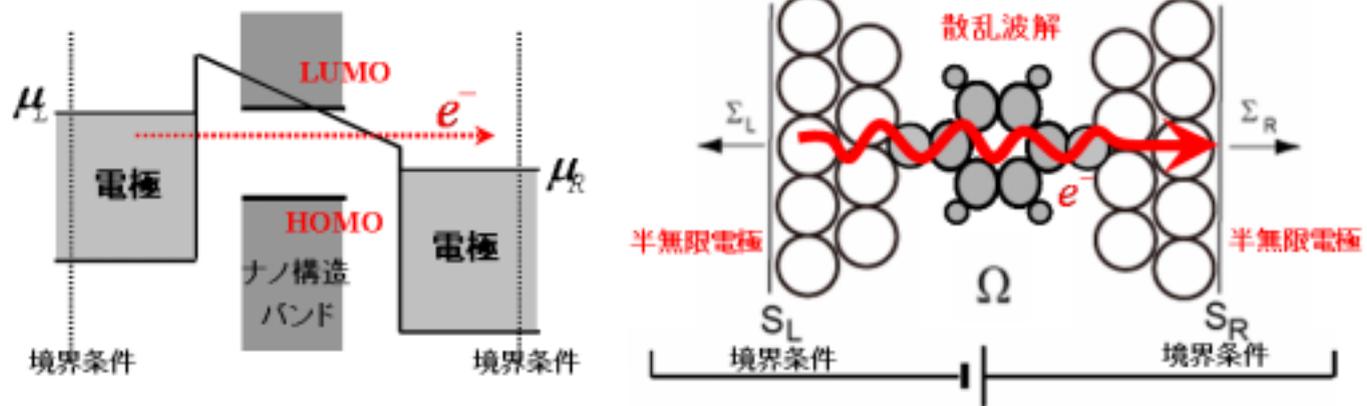


S.J.Tans, M.H.Devoret, H.Dai, A.Thess,  
R.E.Smalley, L.J.Geerligs, C.Dekker,  
Nature 386 (1997) 474

# 原子分子レベルからのマルチスケール量子伝導シミュレーション



# 非平衡開放系の第一原理伝導計算



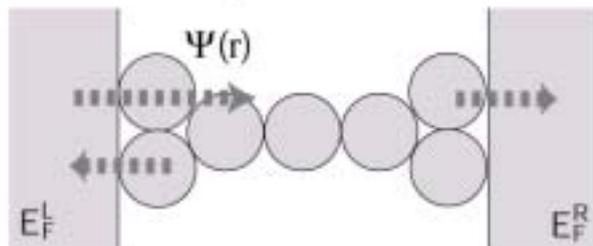
# First-Principles Quantum Transport Calculation with Lippmann-Schwinger Equation

bimetallic electrode system  $H^0$



$$(E-H^0)G(r,r')=\delta(r-r')$$

atom/molecule system  $H=H^0+V$



Lippmann-Schwinger equation

$$\Psi(r)=\Psi^0(r)+\int dr'dr''G(r,r')V(r',r'')\Psi(r'')$$



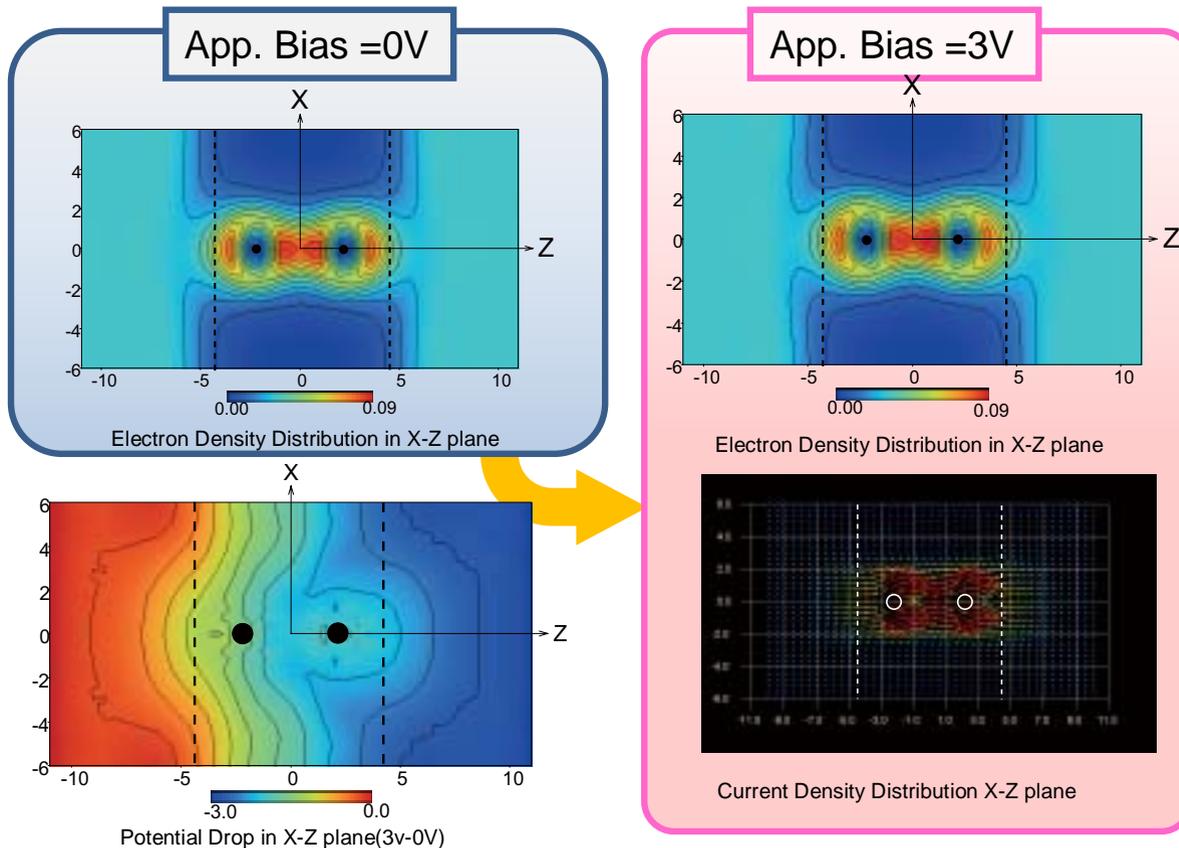
matrix Eq.  $\underline{C}\underline{\Psi}=\underline{\Psi}^0$

Basis: 2D plane waves 1D real mesh

*N.Kobayashi, M.Aono, M.Tsukada, PRB 64 121402R (2001)*

# Quantum Transport in Si Atom Wire

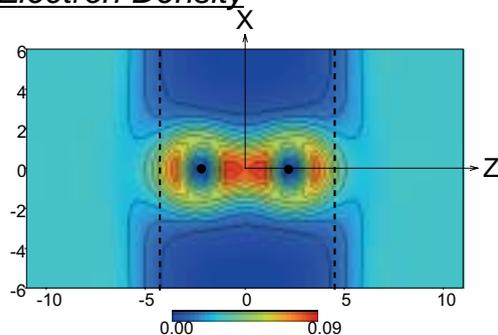
## Effective Potential, Electron Density and Current Density



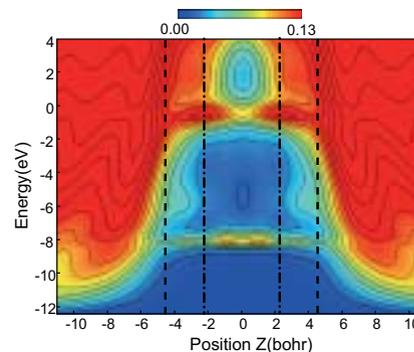
*H.Kusaka, N.Kobayashi, J. Vac. Sci. Technol. B 27 (2009) 810*

# Quantum Transport in Si Atom Wire

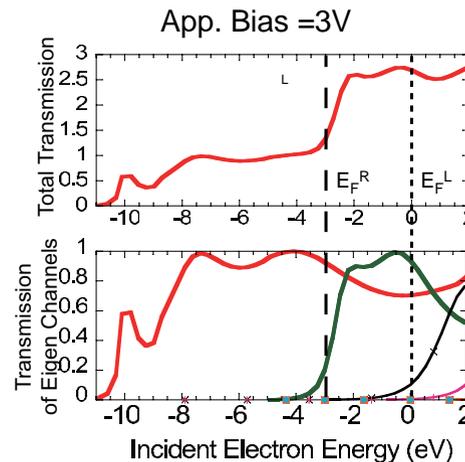
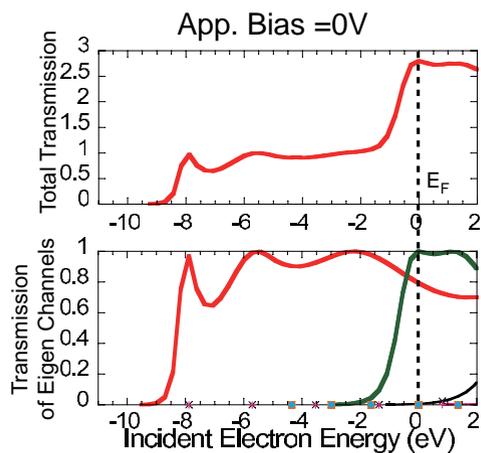
Electron Density



Local Density of States



Eigen Channels and Conductance



Three channels contribute to transport in Si atom wire.

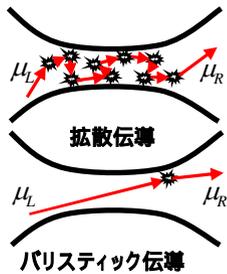
*H.Kusaka, N.Kobayashi, E-J. Surf.Sci. Nanotech 7 (2009) 17*

# 時間依存拡散伝導法による $O(N)$ 量子伝導計算

## 拡散伝導からバリスティック伝導までの統一量子伝導計算

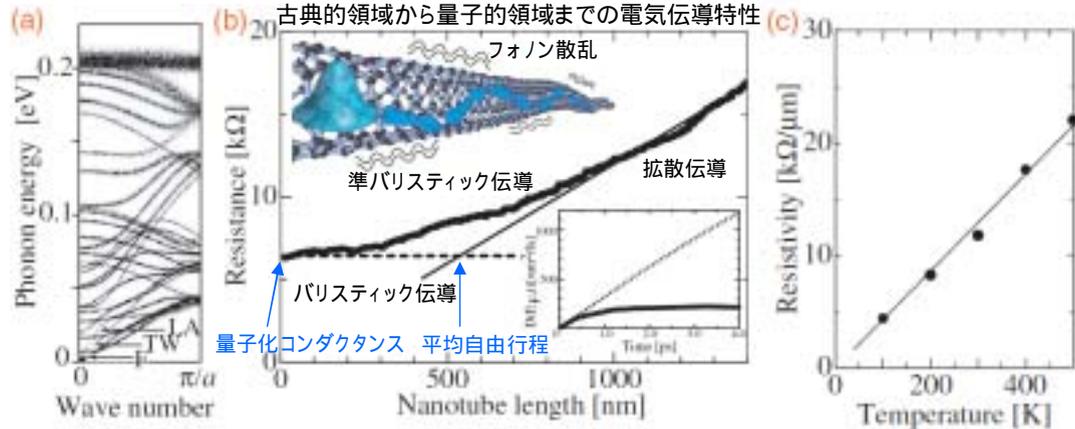
原子論に基づいた量子伝導計算  
 拡散伝導からバリスティック伝導までの統一計算

フォノン散乱効果・不純物散乱効果を取り入れ、  
 平均自由行程、移動度、位相緩和長、および  
 その温度依存性などが解析可能



例)カーボンナノチューブ

古典的領域から量子的領域までの電気伝導特性

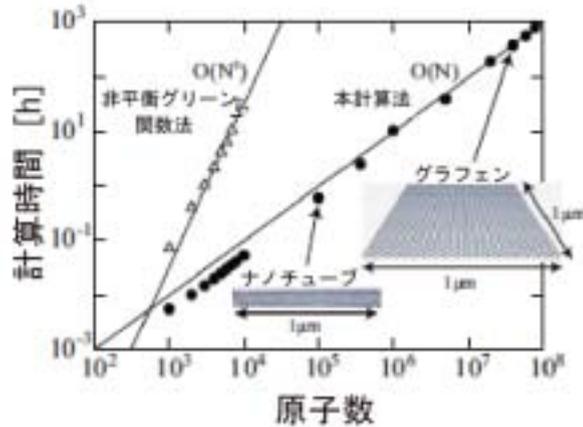


H.Ishii, N.Kobayashi, K.Hirose, *Appl.Phys.Express* **1**, 123002 (2008).

# 時間依存拡散伝導法による $O(N)$ 量子伝導計算

拡散伝導からバリスティック伝導までの統一量子伝導計算

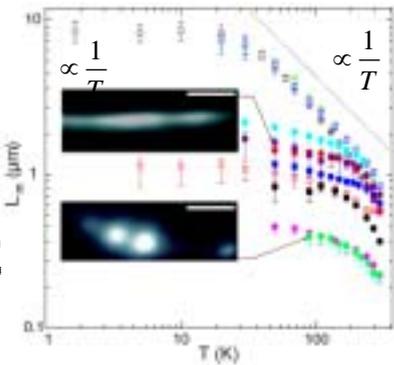
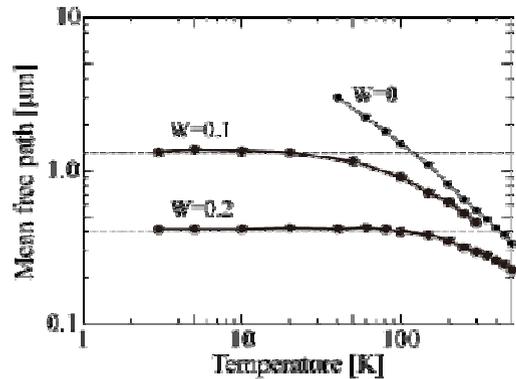
8,000万( $8 \times 10^7$ )原子数の  
 $O(N)$ 量子伝導計算を実証



平均自由行程の温度依存性

シミュレーション

実験



フォノン散乱と不純物散乱の競合

M.S.Purewal et al.,  
PRL **98**(2007)186808

H.Ishii, S.Roche, N.Kobayashi, K.Hirose, *Phys. Rev. Lett.* 104 116801 (2010)