



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

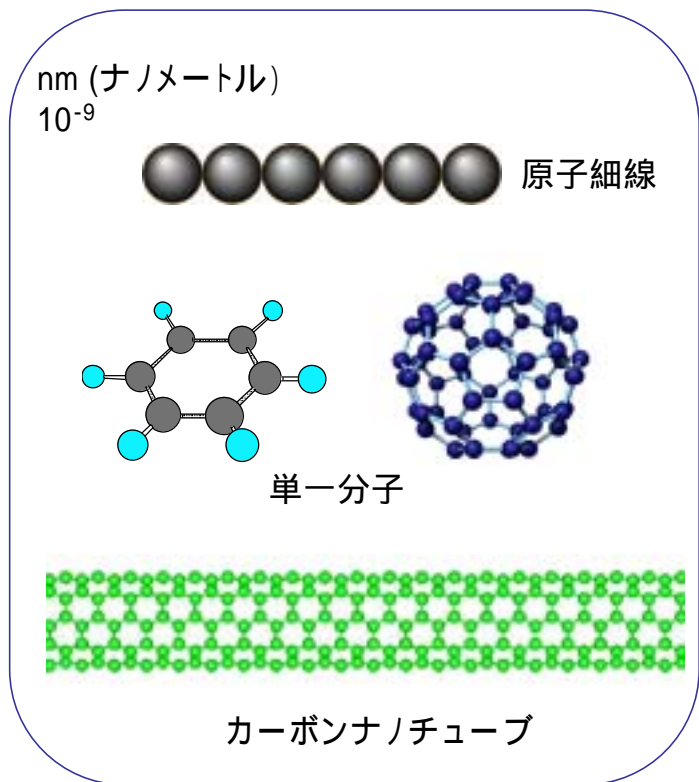
基礎物理
固体物理学
ナノサイエンス
物質科学
ナノ構造の基礎物性

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

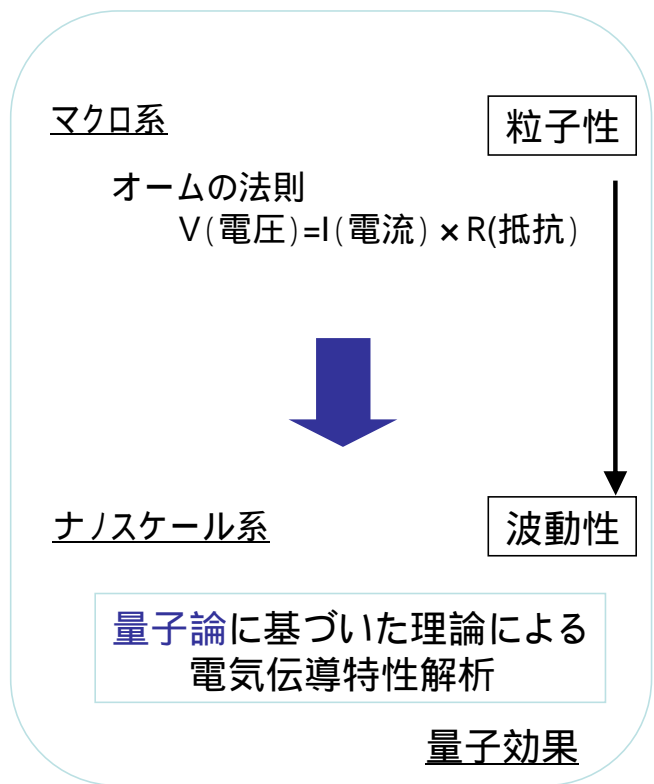
計算物性物理学
計算科学・シミュレーション研究
電子状態計算理論
大規模数値計算

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



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)



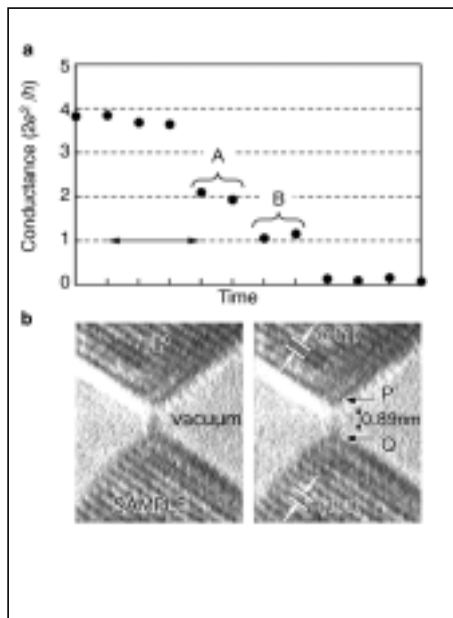
電気伝導特性？
抵抗？
電流電圧特性？
スピン伝導特性？

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

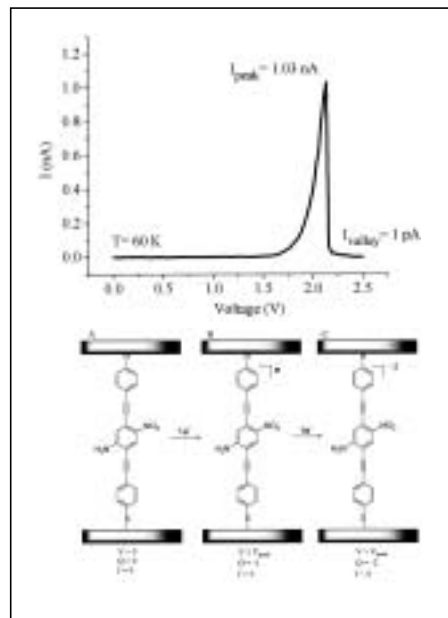
Experiments : Transport in nanostructures

Atomic wire



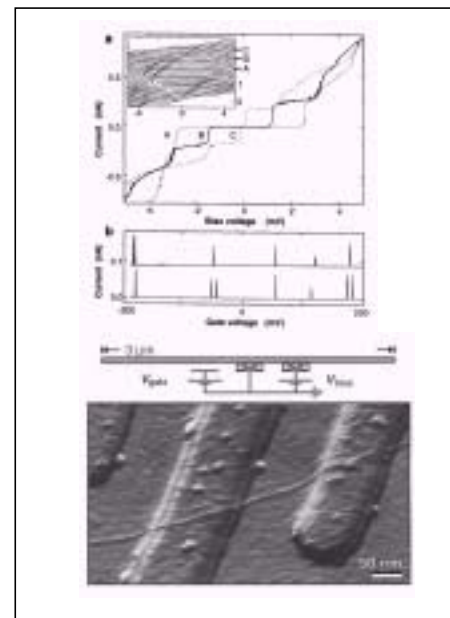
H.Ohnishi, Y.Kondo, K.Takayanagi,
Nature 395 780 (1998)

Molecule



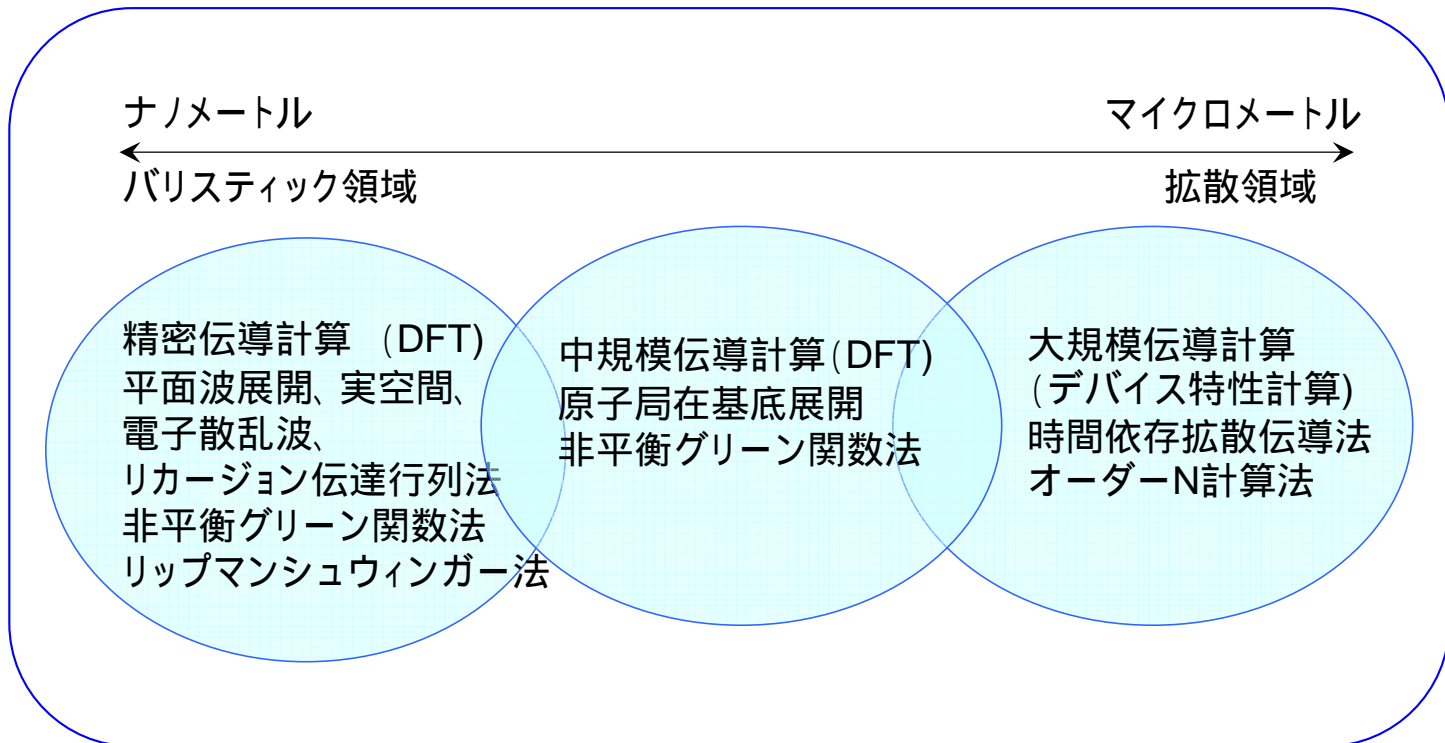
J.Chen, M.A.Reed, A.M.Rawlett,
J.M.Tour, Science 286 (1999) 1550

Nanotube

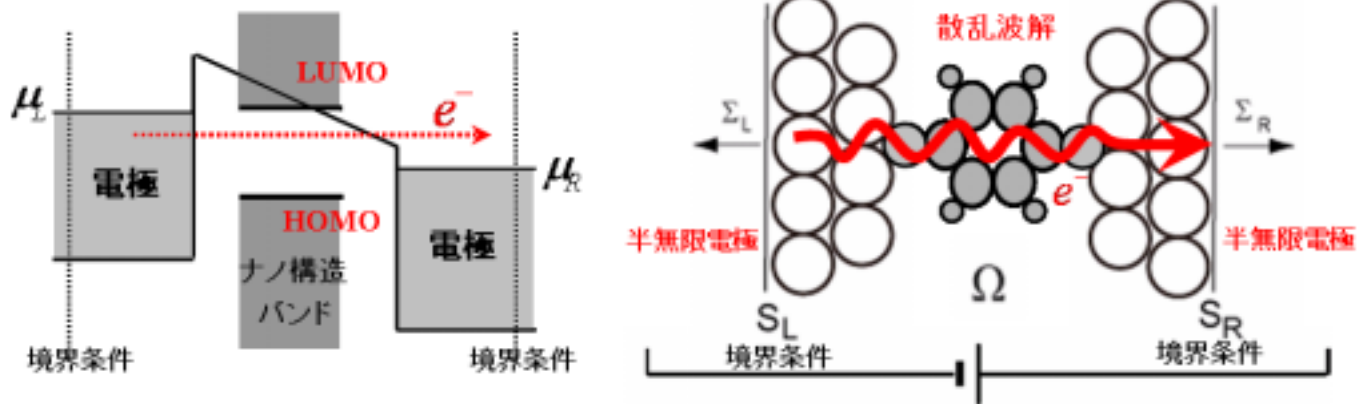


S.J.Tans, M.H.Devoret, H.Dai, A.Thess,
R.E.Smalley, L.J.Geerligs, C.Dekker,
Nature 386 (1997) 474

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



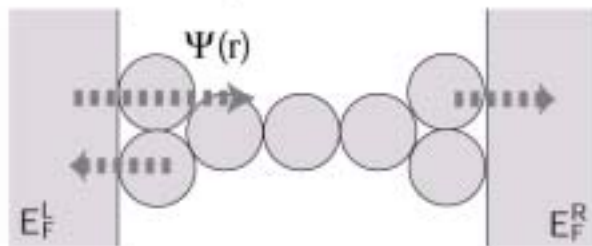
First-Principles Quantum Transport Calculation with Lippmann-Schwinger Equation

bimetallic electrode system H^0



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

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



Lippmann-Schwinger equation

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



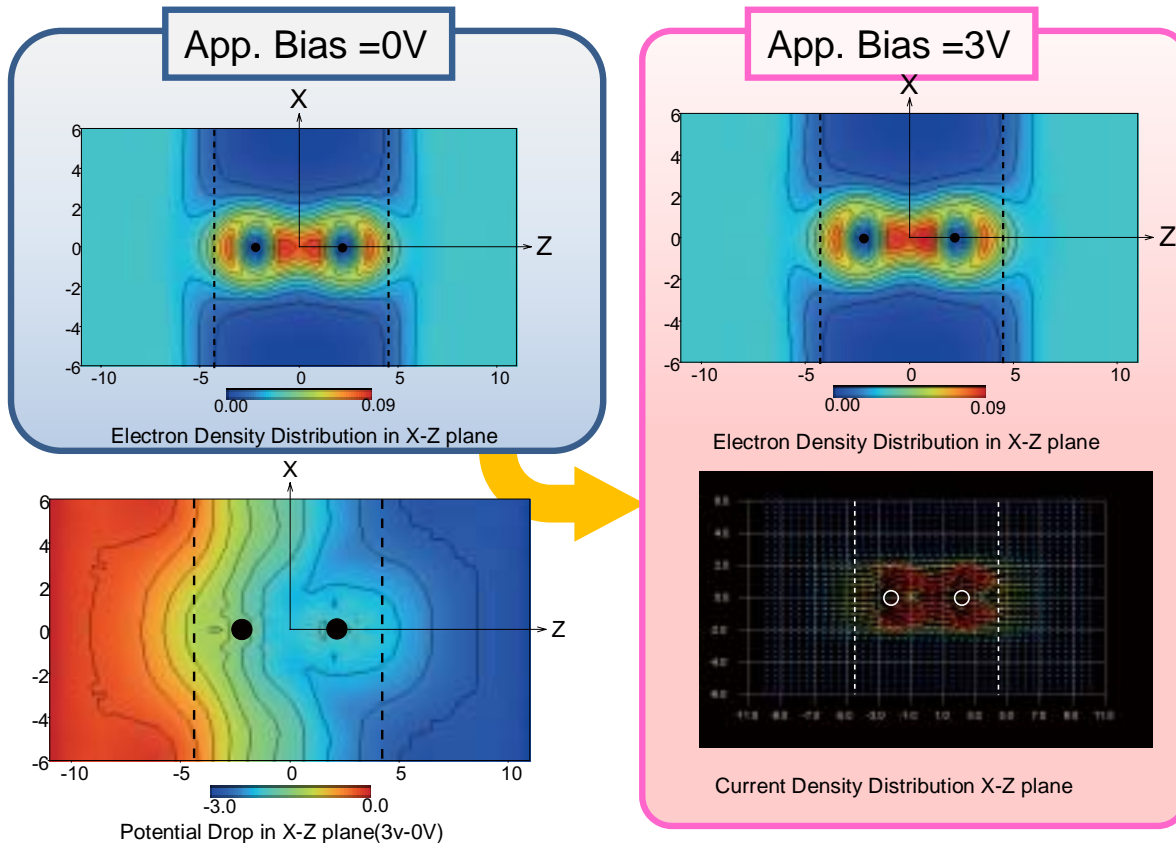
matrix Eq. $\underline{C}\underline{\Psi}=\underline{\Psi}^0$

Basis: 2D plane waves 1D real mesh

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

Quantum Transport in Si Atom Wire

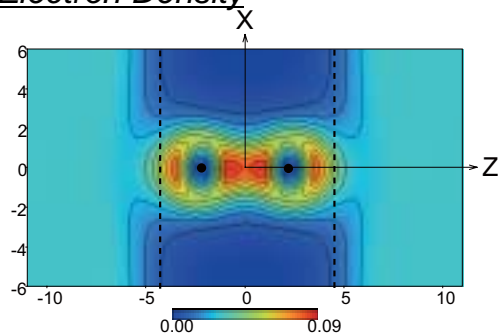
Effective Potential, Electron Density and Current Density



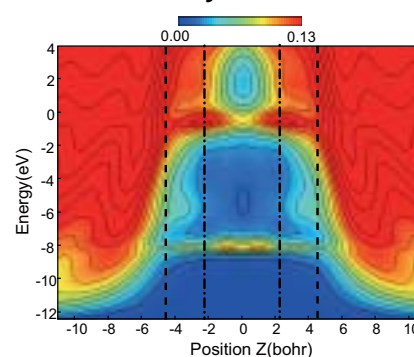
H.Kusaka, N.Kobayashi, J. Vac. Sci. Technol. B 27 (2009) 810

Quantum Transport in Si Atom Wire

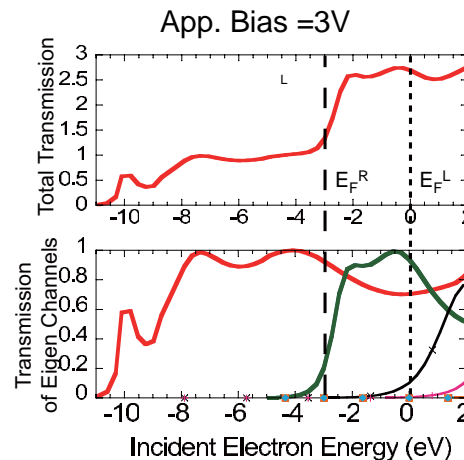
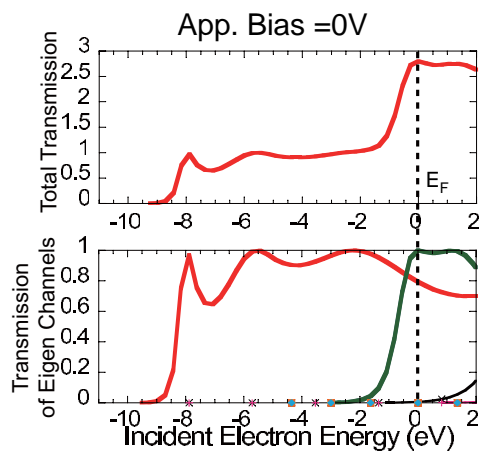
Electron Density



Local Density of States



Eigen Channels and Conductance



Three channels contribute to transport in Si atom wire.

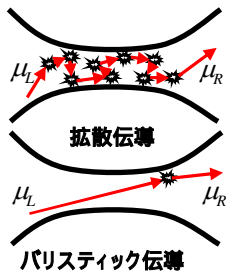
H.Kusaka, N.Kobayashi, E-J. Surf.Sci. Nanotech 7 (2009) 17

時間依存拡散伝導法による $O(N)$ 量子伝導計算

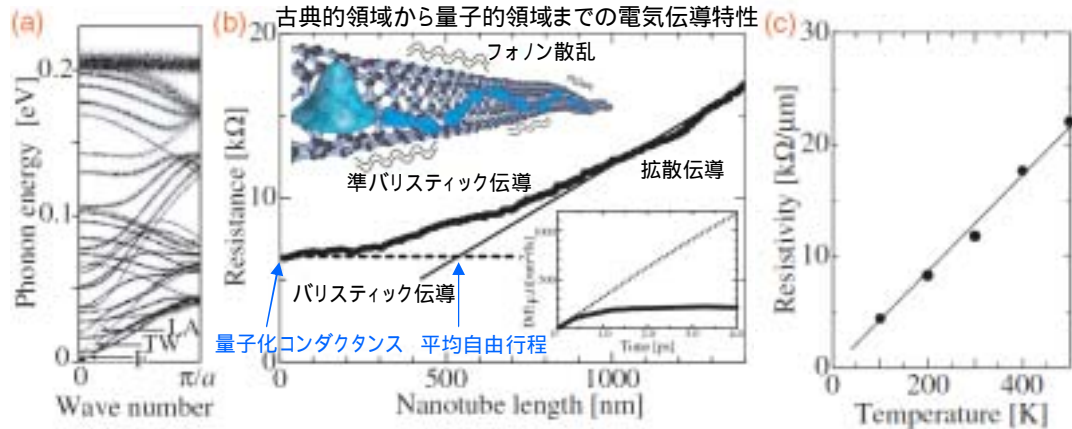
拡散伝導からバリスティック伝導までの統一量子伝導計算

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

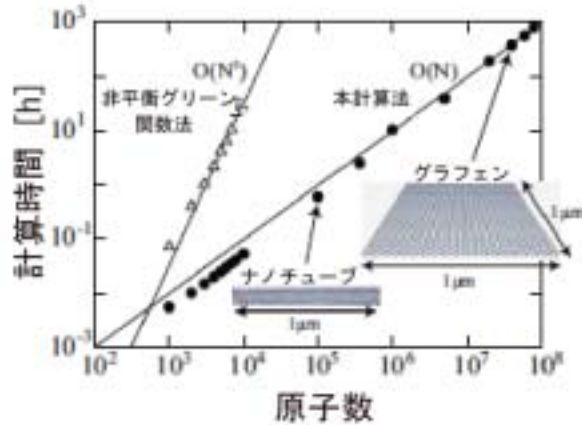


H.Ishii, N.Kobayashi, K.Hirose, *Appl.Phys.Express* **1**, 123002 (2008).

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

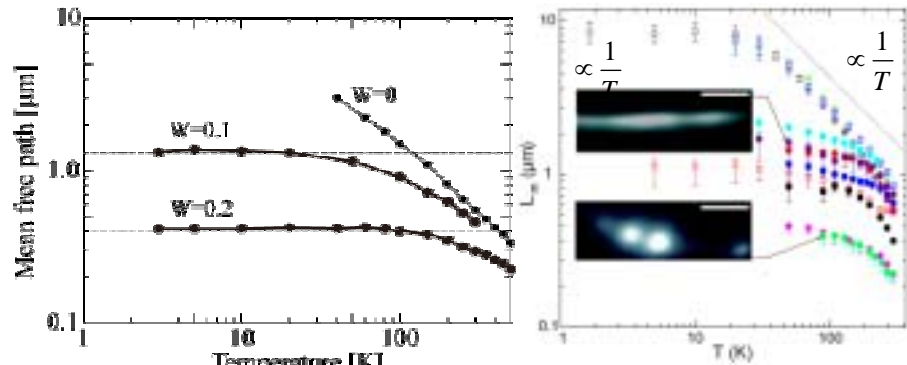
8,000万(8×10^7)原子数の
 $O(N)$ 量子伝導計算を実証



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)