

## ナノ構造における伝導現象に関する理論的研究

○渡邊 聡\*

東京大学工学系研究科

### Theoretical study on transport phenomena in nanostructures

○Satoshi Watanabe\*

The University of Tokyo

#### 1. はじめに

ナノ構造では、量子力学的な振舞いが現れやすく、また原子構造の違いによる局所物性の違いも現れやすい。これらを検出・解析するための実験計測手法は進歩し続けているが、同時に予測精度の高い理論計算への期待も、実験計測を補完する強力な研究手法として常に高い。そこで講演者は、主に第一原理計算を用い、伝導現象を中心にナノ構造の物性とそこに現れる諸現象の研究を進めてきた。

この度、光栄にも日本表面真空学会学会賞をいただいた。本講演では、講演者が多くの共同研究者と進めてきたナノ構造における伝導現象に関するこれまでの理論計算の研究を紹介する。

#### 2. 電子伝導

水素終端シリコン表面上の原子細線の研究を端緒としてナノ構造の電子伝導特性の研究に取り組んだ。表面ナノ構造からの電界電子放出特性、2 電極間のナノ構造の伝導特性、さらには多電極間の伝導特性を計算する独自の方法論を開発し、これを用いて金属表面上の微小突起構造からの電界放出電流のエネルギースペクトルの特異な振る舞いの解析、ナノ構造における負の4端子抵抗の振舞いの解析等を行った<sup>1)</sup>。

その後、多くの研究者が定常電流のみに注目する中で交流応答特性等のより動的な過程を中心に研究を進めた。カーボンナノチューブの直径による交流応答特性の変化や溶液中の分子架橋における溶媒水分子の伝導度への影響を明らかにした<sup>2)</sup>。

#### 3. 原子移動が鍵となる記憶素子

新規情報素子の探索のための基礎研究として上記の研究を進めている間に、金属電極間への電圧印加によりその間の絶縁層中に導電性のフィラメントが成長・

破断することで電気抵抗値をスイッチする「原子スイッチ」の研究に足を踏み入れることになった。導電性フィラメントの構造の特徴の解明を進めるとともに、スイッチングの素過程への興味からイオン移動挙動の研究にも着手した<sup>3)</sup>。

この後、固体中のイオン移動挙動と共に金属-絶縁体-金属積層構造における界面近傍の局所物性へも研究の幅を広げた。これらについては、主にアモルファスリン酸リチウムを絶縁層とし、開回路電圧値をスイッチングする新規素子の研究を例に講演中で紹介する。

#### 4. 機械学習ポテンシャル

上記3.の研究では、実際に即したモデルで解析するには第一原理計算の計算量が多すぎるという問題にぶつかった。そこで、(電子は陽に考慮しない) 原子レベルで第一原理計算と同等の予測精度と軽い計算負荷の両立が期待できる機械学習ポテンシャルに注目し、イオン伝導や熱伝導の解析に適用可能な機械学習ポテンシャルの開発を進めた。アモルファスリン酸リチウム中のリチウムイオン拡散の活性化エネルギーや窒化ガリウム結晶の熱伝導率について、開発したポテンシャルが期待通りの予測性能を有することを確認した<sup>4)</sup>。

講演では、上記2.~4.の研究を踏まえ、今後の展望についても述べたい。

#### 文 献

紙面の都合上、総説を少数挙げるにとどめる。

- 1) 渡邊聡 他、応用物理 **74**, 1075 (2005).
- 2) 渡邊聡 他、ナノ学会誌 **8**, 21 (2009).
- 3) S. Watanabe and B. Xiao, in M. Aono (ed.), “Atomic Switch” (Springer Nature, 2020), p. 95.
- 4) S. Watanabe et al., J. Phys. Energy **3**, 012003 (2021).

\*E-mail: watanabe@cello.t.u-tokyo.ac.jp