

# 実空間計算手法に基づく大規模第一原理分子動力学および電気伝導特性シミュレーション用大規模並列化プログラムの開発

広瀬喜久治 後藤英和 稲垣耕司 小野倫也  
大阪大学 大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻

われわれは、量子力学に基づくコンピュータシミュレーションプログラムを開発し、これを新しい電子デバイスや製造プロセスの研究に役立てようとしている。特に、ナノ構造体の電気伝導特性の解析を高速に行うためのプログラミングを行い、従来できなかった規模のモデルの計算を可能にした。

## 1. はじめに

近年、電子デバイスの微細化が進むにつれ、その大きさはすでに数 10 ナノメートルのレベルにまで到達している。このような領域では、従来使用されていたような MOS 構造は、単純なサイズ縮小効果による特性向上だけでなく、トンネル電流によるリーク電流の発生など量子的な効果による特性悪化も問題となる。一方で、特徴的なナノスケール構造体を作製することにより、これまでとは違った特異な電気・磁気特性を発現させることができるのではないかと、という期待も高まっている。しかし、それらを探索する実験的手法は非常に手間がかかるため、シミュレーションに基づく手法を用いて効率的に研究開発を進めることが不可欠である。近年の計算機および計算手法の発展により、このようなナノスケールでの電子輸送現象を量子力学の第一原理から計算で予測することが可能になってきたが、規模の大きい計算を実現するのは困難であった。本稿では、われわれが開発した **Overbridging boundary-matching (OBM) 計算法<sup>1-3)</sup>**とそのプログラミングについて述べるとともに、最近の研究から、らせん状金ナノワイヤーの電気伝導および磁気特性を例として紹介したい。

## 2. ナノスケール構造体における電気伝導の解析プログラム

金属や半導体のナノ細線における電気伝導の基礎理論は、久保<sup>4)</sup>およびランダウアー<sup>5)</sup>によってほぼ同時期に発表された。ナノスケールの電気伝導特性解析に限れば、ランダウアーの公式の方が使い勝手がよく、この公式によれば、電気伝導は次式で与えられる。

$$G = G_0 \sum_i T_i \quad (1)$$

ここで、 $T_i$ は透過確率と呼ばれる量である。われわれは、散乱波動関数を直接計算し、透過確率を求める方法を採用し、OBM法<sup>1-3)</sup>を開発した。本手法は半無限の結晶電極に挟まれたナノスケール構造体の電子輸送現象を高精度にかつ能率的に計算できる第一原理計算手法である。

スーパーコンピュータにおけるOBM法のプログラミングについては、すでに述べている<sup>6)</sup>が、まだ高速化を完全に終えたわけではなかった。このため引き続き東北大学情報シナジーセンターとの共同研究を活用することにより、プログラム開発を行うことにした。最終的にプログラム要素として活用された手法は、これまでに発表されているものの延長線上であるため、テクニックの詳細は他の記事を参照されたい<sup>7)</sup>。

### 3. マルチシェルらせんナノワイヤーの電気伝導および磁気特性<sup>8)</sup>

電子デバイスの小型化の進展に従って、原子スケールの構造物の作製やそれらの電気特性の解明に大きな注目が集まっている。数ナノメートルの大きさの原子細線の電気伝導特性について多くの実験的研究がなされてきたが、中でも興味深い発見は、Kondo と Takayanagi が TEM を用いて発見した直径 1nm 長さ 5nm のヘリカル金ナノワイヤー (HGN; Helical Gold Nanowire) である。HGN は、ねじれてからまっているいくつかの原子鎖により形成されている。このような微小な構造においては電気伝導には驚くような量子効果が発現するが、その理解のために理論的解析を行った。特に、半無限の電極で挟み込んだ状態のナノ構造体の計算を実行することによって、初めて電極との間の作用 (しばしば重要な効果をもたらす) を正しく計算にいった結果が得られた。

この研究では、開発したプログラムを用いることにより、初めて実用的な時間内で、原子数が 100 個を超えるモデルについて計算することが可能になった。計算のモデルは次のようなものである。HGN は、図 1 のようにフェルミ球半径  $r_s=3.01a.u.$  のジェリウムで模擬された半無限金電極の間に挟まれている。表 1 は計算した HGN に含まれる原子数を示している。片方の電極からもう一方の電極にまで広がるグローバルな波動関数を over-bridging boundary matching (OBM) 法により計算した。温度ゼロおよびゼロバイアス極限でのナノワイヤーの電気伝導率は上記の方法により計算した。表 2 は、金電極に挟まれた単原子、7-1、15-8-1 (これらの数字は、外殻 (中殻) 内殻を構成するワイヤーの数、すなわち断面に見える金の原子数、を示している) のナノワイヤーのチャンネル透過率を示している。チャンネル番号は、透過率の強度順に振ってある。単原子ナノワイヤーの伝導チャンネル数が 1 に対応しているの

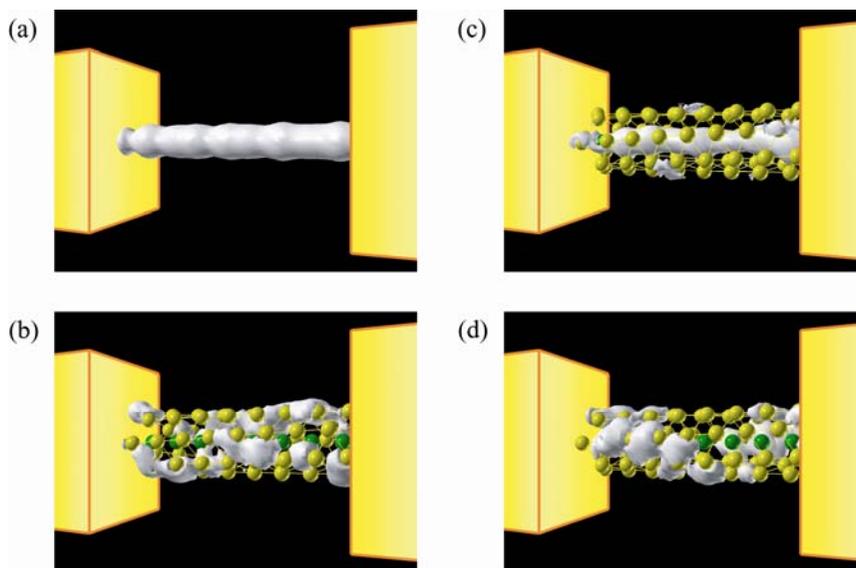


図 1 単原子ワイヤーおよび 7-1 ナノワイヤーのチャンネル電子の分布の等密度面。(a)単原子ワイヤーの第一チャンネル。7-1 ナノワイヤーの(b)第 1 チャンネル、(c)第 3 チャンネル、(d)第 4 チャンネル。左側の電極から注入された電子のチャンネルを示す。黄と緑の球は外殻と内殻の原子をそれぞれ示す。ワイヤー両端の角体は電極。

表 1 ナノワイヤーに含まれる原子数

	内殻	中殻	外殻
単原子	9		
7-1	9	63	
11-4	24	101	
15-8-1	9	76	139

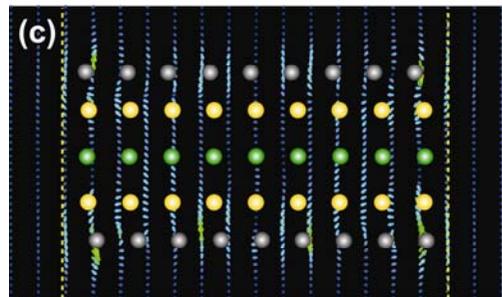
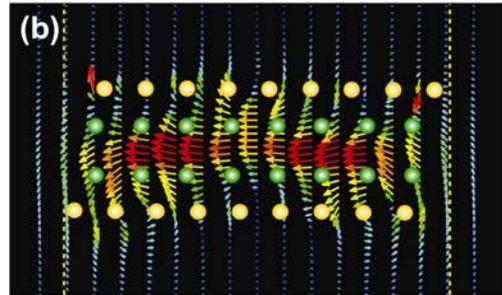
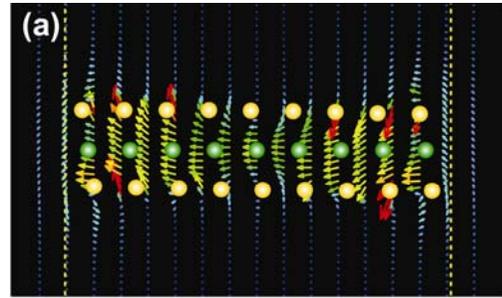
表 2 伝導率とチャンネル透過率

	単原子	7-1	15-8-1
伝導率 (G <sub>0</sub> )	0.96	5.19	14.44
1 ch	0.958	0.997	1.000
2		0.995	0.996
3		0.970	0.991
4		0.938	0.982
5		0.653	0.975
6		0.640	0.954
7			0.942
8			0.931
9			0.899
10			0.891
11			0.841
12			0.834
13			0.732
14			0.691
15			0.645
16			0.595
17			0.537

に対して、HGN の伝導チャンネル数は HGN に含まれる原子ワイヤーの数に一致しないことがわかる。

また、透過率は、単原子ワイヤーの場合には 1 に近いが、HGN のいくつかのチャンネルは 1 よりかなり小さい。これは、電極からナノワイヤーに電子が入らない場合があることに関係しており、電極をもつモデルによってはじめて示される結果である。最近の実験結果と比べると、伝導率の計算結果は 20%程度の誤差に収まっている。

図 1 に 7-1 ナノワイヤーの左の電極から入射された電子の伝導チャンネルを示す。比較のため単原子ナノワイヤーのものも示してある(a)。伝導チャンネルは必ずしも 7-1 ナノワイヤーの原子鎖に沿って形成されているわけではないことがわかる。特に、



Magnetic flux density per bias voltage (T/mV)



誘起された磁場密度。(a)7-1、(b)11-4、(c)15-8-1 ナノワイヤー。緑、黄、灰の球は、内殻、中殻、外殻に含まれる原子をそれぞれ表す。破線はジェリウム電極の端面である。

(d)に示すように、7-1 ナノワイヤーの第4チャンネルは、外側の殻を通り、ワイヤーのねじれの方向とは逆の方向にねじれている。われわれは次に、HGN を流れる電流により形成される磁場を調べた。いくつかのチャンネルはナノワイヤーの軸に対してねじれているので、ナノワイヤーを流れるらせん状電流はナノワイヤー内に磁場を引き起こすことがわかった(図2)。細いHGNと太いHGNとでは、細いHGNのほうが太いものよりも形成される磁場が強いという顕著な違いがある。

このようなHGNの電気伝導(伝導度、電流分布など)の挙動やらせん状電流により形成される磁場は、理論的手法に基づいて初めて明らかにされたことである。これはHGNがナノメートルスケールでのソレノイドの候補であることを示しており、今後の実験的手法による確認が望まれる。

#### 4. おわりに

本稿では、特にナノ構造の電子輸送特性解析のシミュレーション例として電極にはさまれたらせんナノワイヤーの解析について述べた。この例より、開発したシミュレーションプログラムはナノ構造の特性をよく解析できることが明らかとなるとともに、新しいデバイスの提案に活用できることが明らかとなった。今後、さらなる高速・大規模化により、効率的なナノ構造デバイスの探索に活用できるものと期待される。

本研究は文部科学省21世紀COEである大阪大学・原子論的生産技術創出拠点超精密加工研究拠点における共同研究の一環として行われた。また、計算ソフトウェアの並列化・高速化については東北大学情報シナジーセンターとの共同研究として行われ、多大な協力をいただいた。

#### 参考文献

- [1] K. Hirose (ed.): First-Principles Calculations in Real-Space Formalism - Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures - (Imperial College Press, in press). OBM法の詳細が解説されている。また、OBM法と他の計算手法(LS法、RTM法、およびグリーン関数法)との関連も述べられている。
- [2] Y. Fujimoto and K. Hirose: Phys. Rev. B **67** (2003) 195315.  
N. D. Lang and M. Di Ventura: Phys. Rev. B **68** (2003) 157301.  
Y. Fujimoto and K. Hirose: Phys. Rev. B **69** (2004) 119901.
- [3] T. Ono and K. Hirose: Phys. Rev. B **70** (2004) 033403.
- [4] R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957) 570.
- [5] R. Landauer: IBM J. Res. Dev. **1** (1957) 223.  
M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer and, S. Pinhas: Phys. Rev. B **31** (1985) 6207.
- [6] 広瀬、後藤、稲垣、小野: 本誌 **37-4** (2004).
- [7] 広瀬、後藤、稲垣、小野: 本誌 **37-1** (2004).  
広瀬、後藤、稲垣、小野、塚本: 本誌 **35-3** (2002).  
広瀬、後藤、稲垣、小野: 本誌 **34-3** (2001).  
稲垣、山内、杉山、広瀬: 本誌 **33-3** (2000).
- [8] T. Ono and K. Hirose: Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 206806.