

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」

平成14年度採択研究代表者

渡邊 聡

(東京大学大学院工学系研究科 助教授)

「ナノ物性計測シミュレータの開発」

1. 研究実施の概要

ナノメータスケールで物質の構造を制御して新規な素子を作製する可能性が真剣に探索されるようになってきている。原子レベル・分子レベルで制御して簡単な構造を作る試みは既に実証されている現在、作製されたナノ構造の局所的な物性を計測し(ナノ物性計測)、有用な構造を設計するための指針を導くことが重要課題の一つとなっている。しかし、ナノ物性計測の実験データの正しい解釈は、必ずしも容易でない。ナノ物性計測においては、対象とプローブとの相互作用が必然的に強くなることや計測時に印加される電場(バイアス電圧を含む)の影響が大きくなること等がその原因である。そこで本研究では、ナノ物性計測の中でも特に重要な電氣的刺激(バイアス電圧を含む)を印加する計測について、外場やプローブの影響を取り込んで電流などの計測量を理論計算によって予測するシミュレータを作成すると共に、このシミュレータを用いた解析により微視的な物理現象・ナノ構造物性と計測量との相関を明らかにし、計測量からナノ構造の物性やナノ領域での物理現象に関する情報を信頼性高く導出するための解析手法を確立する事を目指している。またその過程で、プローブ、電極、外場などとの強い相互作用が集中する局所領域における新規物理現象や新しい計測手法を探索することも視野に入れる。

このようなねらいの下、平成14年度はシミュレータ作成のための予備検討を行ってナノ構造物性と計測量との相関および計測時の微視的物理事象について考察を進めた。また効率的な研究推進のため、2回のチーム内ミーティングと関係分野の実験研究者を招いたミニワークショップを開催した。研究テーマは主に走査プローブ計測シミュレータ、多端子電気特性計測シミュレータ、キャパシタンス計測シミュレータ、および計測に影響を及ぼす局所物理事象の理論解析の4つにまとめられるが、各テーマに関して平成14年度に得られた成果は下記の通りである。

(1) 走査プローブ計測シミュレータ

このテーマでは、本研究グループで開発した試料-プローブ対向系のバイアス電圧印加時の電子状態計算プログラム(以下半無限電極法と呼ぶ)を基に、プローブ位置の微小変化による電流変化検出(局所トンネル障壁高さ計測)やバイアス電圧微小変化に対するブ

ローブ試料間力変化検出（ケルビン力顕微鏡）のような付加計算を行うモジュールを開発し、また計算速度向上のためのプログラム改良を行って、走査プローブ顕微鏡を応用した局所トンネル障壁高さ計測やケルビン力顕微鏡等のシミュレータを作成する。

まず、局所トンネル障壁高さ計測について欠陥のないA1表面と表面第2層に空孔クラスターのあるA1表面とを対象に予備計算を行ったところ、ポテンシャル分布自体から推定した障壁高さは両者で差がないのに対し、トンネル電流から推定される見かけの障壁高さには有意な差があること、見かけの障壁高さのバイアス電圧極性による変化は両表面で見られるが、変化の方向は逆であることなどの知見を得た。これらは局所トンネル障壁高さ計測の実験データを解釈する上で大変有用な情報である。さらに、試料-プローブ間距離による見かけの障壁高さの変化など、シミュレーションを効率的に行うための基礎データを蓄積しつつある。

次にケルビン力顕微鏡については、プローブに働く力を計算するサブルーチンを開発し、現在プログラムの信頼性をチェックしている。また半無限電極法プログラムの速度向上については、初期ポテンシャルの改良により若干速度を向上させることができた。が、さらに改善すべき点も明らかになったので、平成15年度に一層の高速化をはかりたい。

(2) 多端子電気特性計測シミュレータ

このテーマでは、多探針プローブやナノパターニング電極を用いた電気特性計測結果をシミュレーションするプログラムのプロトタイプを開発することを目標に、(1)で述べた半無限電極法プログラムを対向半無限電極系と異なる形状の電極や3電極以上の場合に適用できるように拡張する。平成14年度は、予備検討として強結合法を用いて2つないし3つの半無限電極と接続した分子の電気特性をヒュッケル法レベルの強結合法で計算するプログラムを開発した。このプログラムを用いてポルフィン分子の電気特性を計算したところ、既に他の分子で予測されていた分子内巨大ループ電流がこの分子でも発現することを見出した他、2電極の場合と3電極の場合とで分子内の電流分布が大きく異なることなどを明らかにした。

(3) キャパシタンス計測シミュレータ

キャパシタンスは単一電子トンネル現象などの基礎物理現象においても、また電子デバイスの動作などの応用面でも重要な物理量であるが、原子レベルでの振舞いはまだよく研究されておらず、また様々な計測法で推定された結果が一致するかどうかも明らかでない。そこでまず、実験よりも直接的な方法でキャパシタンスの値を計算し、その物理的意味を明らかにする研究に取り組んだ。

まず、距離が無限に離れた2電極のキャパシタンス値は1電極の孤立キャパシタンス値に帰着するという意味で、電極の原子構造・電子状態とキャパシタンスの本質的關係を知るために孤立キャパシタンスの性質を解析した。孤立キャパシタンス値が系の持つ電子エネルギー準位の正イオンと負イオンの各々の最高占有準位(HOMO)間のエネルギーギャップ

で与えられることを導いた後、本研究グループ内で開発された空間分割 (PRDF) 法プログラムを用いて、炭素クラスターとシリコンクラスターの孤立キャパシタンスを調べた。その結果、同じ形状のクラスターならシリコン原子の方がキャパシタンスが大きいこと、クラスターを構成する原子数が偶数か奇数かでキャパシタンス値が大きく異なるなどを明らかにした。このように、孤立キャパシタンス値そのものが原子スケール電極の原子構造と電子準位の特徴を直接反映しているという新しい知見は、キャパシタンス計測シミュレータの開発のための一つの基礎として重要な成果である。

次に、PRDF法では取り入れることができないトンネル電流の影響を解析するため、(1)で述べた半無限電極法を用いてギャップ間隔がnm程度の平行平板電極系のキャパシタンスを計算した。その結果、電極間距離がきわめて短くなるとトンネル電流のためにキャパシタンスが逆に減少することを確認したが、このキャパシタンス現象は電極間距離が1nm未満の領域ではじめて顕著になることも明らかになった。他方、系の電子密度に対するキャパシタンスの依存性を調べてみると、半無限電極法と空間分割法とでは一見不整合に見える結果が得られている。この原因については今後解明していきたい。

(4) 計測に影響を及ぼす局所物理現象の理論解析

このテーマの目標は、計測時のプローブ近接や外場印加による原子構造変化や原子振動、温度上昇などの局所物理現象が、計測量に及ぼす影響を明らかにすることである。計測に影響を及ぼす局所物理現象の中で、原子振動あるいは熱発生・熱伝導は第一に考慮すべき重要なものであるため、平成14年度は、熱伝導シミュレーション用分子動力学法プログラムを開発した。このプログラムのチェックを兼ねてダイヤモンド薄膜の熱伝導率の計算を実行したが、実験データの再現には至らなかったため、プログラムアルゴリズムの問題、実験条件とシミュレーション条件の関係等、検討すべき問題の洗い出しを行った。

以上のように、予備検討の結果ナノ物性計測実験データの解釈に有用な様々な知見を得ることができた。これらの知見は、効率よくナノ物性計測シミュレーションを行うために適切な計算条件を設定する上でも重要である。今後は、未解決の課題（特にキャパシタンス計測シミュレーションにおいて半無限電極法と空間分割法とで結果に一見不整合に見える点がある原因、熱関連現象解析のための分子動力学計算プログラムの完成）を解決し、これまでに得られた知見と平成15年度に引き続き行う予備検討の結果得られる知見とを総合し、本研究で作成するシミュレータの詳細な設計を行っていく。なお、計測に影響を及ぼす局所物理現象の解析においては、ナノ熱伝導における量子効果を明らかにするための方法論の開発にも着手する予定である。

2. 研究実施体制

半無限電極計算グループ

- ① 研究分担グループ長：渡邊 聡（東京大学大学院工学系研究科、助教授）
- ② 研究項目：小規模モデル系用シミュレータ開発（特に走査プローブ計測シミュレー

タの開発と多端子電気特性計測シミュレータの開発) とその成果に立脚した実用的
シミュレータ開発

空間分割・時間依存計算グループ

- ① 研究分担グループ長：渡辺 一之（東京理科大学理学部）
- ② 研究項目：小規模モデル系用シミュレータ開発（特にキャパシタンス計測シミュレータの開発と計測に影響を及ぼす局所物理現象の解析手法の確立）とその成果に立脚した実用的シミュレータ開発