

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名: ナノ物性計測シミュレータの開発

2. 研究代表者名: 渡邊 聡 (東京大学大学院工学系研究科 教授)

3. 研究概要

ナノ構造の局所的な物性の計測(ナノ物性計測)の計測量を予測するシミュレータを作成し、計測量を信頼性高く解釈する解析手法を確立することを目指し、これまで主に小規模系を対象とした方法論・プログラム開発を進めてきた。作成したプログラムによる試行計算により、局所障壁高さ像の持つ物理的意味を明確にした、分子架橋を流れる電流と分子振動モードおよび電子状態との関連を明らかにした等の顕著な成果を挙げた。

4. 中間評価結果

4 - 1. 研究の進捗状況と今後の見込み

ナノ物性計測における計測量を予測するシミュレータの作成と計測量の高信頼な解析手法の確立を目指し、操作プローブ計測シミュレータの開発をはじめとする多様研究項目の研究が進展し、多くの成果が得られつつある。走査トンネル顕微鏡 (STM) や原子間力顕微鏡 (AFM) についてはすでに多くのシミュレーションがなされているが、走査プローブ (SPM) のシミュレーションの研究はほとんどない。SPM応用計測の中ではTransiesta-Cよりも精度が高く、ギャップのある系に適用可能であり先進的であるといえる。また実験研究者からの関心を集め、当初想定されていなかった示唆を受けるなど、シミュレーションと実験のつながりが生まれつつある。

従来あまり解析が行われてこなかったナノ計測を重点的に扱おうとしている。ナノの世界では、熱伝導現象もマクロとは定性的に違っており、計測に影響を及ぼす局所的物理現象の解析も興味深い。

4 - 2. 研究成果の現状と今後の見込み

種々の解析ソフトが順に作成されていると同時に、それらを使っのシミュレーションによって、局所障壁高さ計測、キャパシタンス計測、熱伝導解析など、いくつもの新しい発見がなされている。今後、ナノ計測は大きく発展する技術であり、その測定結果はシミュレーションと比較することにより解釈が可能になるので、このようなシミュレーション技術の開発は大きなインパクトがある。

解析ソフトはまだ未完成なものや、更に高性能化すべきものがあるが、それらが実際の実験といっしょに活用されるようになるとナノ計測の意義は一層大きくなる。本プロジェクトによるこの方向への貢献が期待できる。

4 - 3. 今後の研究に向けて

今後、SPMなどのナノ計測技術はますます発展することが予想されるので、それに対応できるシミュレーション技術が必要である。今後この技術を多くの研究者が使えるように、ユーザーインタフェース等を整備し、最終的にはソフトウェアを公開することを期待する。

その他の各種シミュレータについても実験研究者と議論を深め、より有用なナノ物性計測シミュレータ群として有用なものにしていく必要がある。

4 - 4 . 戦略目標に向けての展望

本研究で扱うSPM応用計測に関してはシミュレーション研究例がほとんどない。実験データはケルビン力顕微鏡を中心に増えてきているので、本研究の重要性は増しているといえる。また多端子電気特性計測シミュレータでは密度汎関数強結合(DFTB)法以上のレベルの計算はまだ報告されておらず、この点で本研究のねらいは先進的といえる。

さらに本研究のような総括的なキャパシタンス研究は無く、第一原理計算に立脚したキャパシタンスシミュレータ開発は皆無である。またナノスケール熱伝導を量子領域(低温)から古典領域(常温、高温)まで総括的に解析する研究グループは他に無い。

以上のように本研究におけるシミュレータ開発はすべてナノ物性計測における先駆的な研究であり、近い将来、それらソフトウェアの公開という形で有益的に社会還元できると考えられる。

4 - 5 . 総合的評価

ナノ物性計測において、特に、電氣的刺激を印加する計測に関して、4つの研究項目を推進し、主として、小規模系を中心とした方法論・プログラム開発を行い、スケーラビリティや性能面などでの改善を示すと共に、これらの成果を用いて、様々な具体的対象に対するシミュレーションを実施し、いくつかの新しい知見や解釈を導いている。

また、実験研究者の関心を得て、想定外の示唆を受けることによる新しい展開を導くなど、シミュレーションが実験と結びつき好ましい方向に進んでいる。