

非平衡量子伝導理論の展開：ナノエレクトロニクスから熱マネジメント材料へ

産総研 浅井美博、中村恒夫、Marius E. Bürkle

本特別支援課題では、発表者グループの一連の研究：①非平衡量子伝導理論それ自身の開拓研究、②その第一原理化、③それらを用いた精密実験計測との協力を通じた検証研究と機構解明研究、④これらの成果を踏まえた材料探索スクリーニング研究の内、②と③の研究の一部（高速化、大規模計算）を実施している。①～③の研究の概要を以下に示す。

表題の中の【ナノエレクトロニクス】に関しては精密な実験計測研究が著しく進展しており検証研究の良いパートナーとなり得る「分子エレクトロニクス」分野及び、high-K材料を用いた抵抗変化型ランダム・アクセス・メモリ（ReRAM）をターゲットとした研究を行っている。前者の研究では分子ワイヤーや原子ワイヤーのブレイク・ジャンクションにおける量子弾道電流に対する電子・フォノン散乱効果、特にその非弾性成分の電圧特性及びその材料依存性[1]や、電子・フォノン散乱とフォノン熱伝導による局所加熱と熱散逸過程[2]、整流機構とそれに対する電子相関効果[3]などに関連した理論計算を行い、計測実験との検証研究や機構解明研究等が今まで成功裡に行われてきた[4]。ReRAMの研究では、メモリ・オン/メモリ・オフ比の低電圧領域から立ち上がり性能を向上する為の（低電圧駆動）電極材、チャンネル材の良い組み合わせを探索する為の、計算プロトコルを確立した。[5]【熱マネジメント材料】の研究に関しては数十ナノメートル程度までの膜厚材料や原子、分子ワイヤー、ナノワイヤー、ナノ接合系における精密計測実験との比較検証研究を行いながら、コンポジット材料などの実用材料への展開も視野に入れた研究も行っている。ゼーベック係数、伝導度、熱伝導度、及びそれらから見積もられる熱電変換の材料性能指数である figure of merit ZT の温度依存性、サイズ（膜厚）依存性、材料依存性等の理論計算を行っている。後者に関しては nanoscale-thermocouple integrated scanning tunnelling probes (NTISTP)における熱計測測定と詳細な一致を得ており[6]、フラレン化合物の単分子ブレイク・ジャンクションを用いた計測実験結果を定量的に説明する為にはイメージ・ポテンシャル補正を第一原理電子状態計算に加える必要がある事も見出した[7]。前者においては金属錯体の分子多層膜の ZT が中心金属種と膜厚の双方に大きく依存している事を示した[8]。原子、分子ワイヤーの場合、ワイヤの電子準位とフェルミ準位の相対位置が共鳴的になるある場合に、Widemann-Franz 則が大きく破れる事が理論的に解っている。この事と関係して変換効率は電子準位差のみならず、サイズ（長さ、厚み）に大きく依存する事が示されており[9]、第一原理計算結果はその結果と良く一致する。

文献) [1] 浅井美博、中村恒夫、島崎智実、**固体物理**、46, 777 (2011) 及びその引用文献。[2] Y. Asai, **Phys. Rev. B**, 84, 085436-1-7 (2011). [3] H. Nakamura, Y. Asai, J. Hihath, C. Bruot, and NJ Tao, **J. Phys. Chem. C**, 115, 19931-19938 (2011); Y. Asai, H. Nakamura, J. Hihath, C. Bruot, and NJ Tao, **Phys. Rev. B** 84, 115436-1-5 (2011). [4] S.K. Lee, R. Yamada, S. Tanaka, G.S. Chang, Y. Asai, and H. Tada, **ACS Nano**, 6, 5078-5082 (2012); J. Hihath, C. Bruot, H. Nakamura, Y. Asai, I. Díez-Pérez, Y. Lee, L. Yu, and NJ Tao, **ACS Nano**, 5, 8331-8339 (2011); Y. Asai, **Phys. Rev. B** 86, 201405(R)-1-4 (2012). [5] T. Miyazaki, H. Nakamura, K. Nishio, H. Shima, H. Akinaga, and Y. Asai, in preparation. [6] L. A. Zotti, M. Bürkle, F. Pauly, W. Lee, K. Kim, W. Jeong, Y. Asai, P. Reddy, and J.C. Cuevas, **New J. Phys.**, in press. [7] M. Bürkle, S.K. Lee, R. Yamada, H. Tada and Y. Asai, in preparation. [8] H. Nakamura, T. Ohto, T. Ishida, and Y. Asai, **J. Am. Chem. Soc.**, 135, 16545-16552 (2013). [9] Y. Asai, **J. Phys. Cond. Matt.** 25, 155305-1-5 (2013).