

Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor (MOSFET)

ナノ構造体 < 電子の平均自由行程 例) 格子定数 平均自由行程 Si 5.428 << 約400 (室温) Au 4.078 << 約500 (室温)	特異な電子輸送特性が観測される 電子の運動 弾道(Ballistic)伝導 電子の量子的性質があらわになる		
このようなナノ構造体は第一原理計算の対象モデル			
第一原理計算による電子輸送シミュレーションやデバイスシミュレーションの実現			
次世代のナノナハイスの機能予測、超局性能電子ナハイスの開発			

電子輸送(電気伝導)の第一原理計算手法 ~ Overbridging Boundary-Matching (OBM) method ~

ナノ構造体の電気伝導特性を正確に、かつ効率よく計算する方法 ~ 実空間差分法に基づく計算手法 ~

散乱問題としてのアプローチ: 波動関数 ¥を散乱問題の解として求める





ここに、 N_{μ} は μ 方向のグリッドの数.

C₆₀鎖における入射電子の電荷分布



Li@C₆₀ dimerのコンダクタンス



Si/SiO₂界面の第一原理電子輸送計算 ~ 界面欠陥がリーク電流に及ぼす影響 ~



リーク電流に起因する諸問題・・・





実験による考察に加えて、理論による研究も非常に有効

計算モデル

"SiO₂のα-quartzモデル"と"Si/SiO₂界面近傍の1つの酸素原子を水素原子で置換したモデル"



入射電子の電荷分布



界面に欠陥のあるモデル



絶縁膜の実効膜厚が薄くなっている

半導体デバイス研究領域の未来は?



コストパフォーマンスをさらに上げる計算手法の開発



Lippmann-Schwinger Equation

$$\Psi(z_l) = \phi^0(z_l) + \sum_{l'} G^0(z_l, z_{l'}) \delta V(z_{l'}) \Psi(z_{l'}).$$

ここに、 は求めたい散乱解、 φⁱⁿはJellium電極内(自由電子)の進行波、 G⁰はJellium電極内(自由電子)のGreen関数、そして、



Jellium電極内(自由電子)のGreen関数は解析的に次式で表される:

$$G^{0}(z_{l}, z_{l'}) = \begin{cases} P^{l'-l}W & \cdots & \text{for } z_{l} \leq z_{l'} \\ P^{l-l'}W & \cdots & \text{for } z_{l} \geq z_{l'} \\ & & \text{factorizable form} \end{cases} \qquad \begin{cases} P = \sum_{n} \exp\{i\mathbf{G}_{//n}(\mathbf{r}_{//i} - \mathbf{r}_{//j})\} \cdot \exp(ik_{z}h_{z}) \\ W = \sum_{n} \exp\{i\mathbf{G}_{//n}(\mathbf{r}_{//i} - \mathbf{r}_{//j})\} \frac{h_{z}^{2}}{i\sin(k_{z}h_{z})}. \end{cases}$$

(h_z: z方向のgrid spacing)

Lippmann-Schwinger方程式:

$$\Psi(z_l) = \phi^0(z_l) + \sum_{l'} \underbrace{G^0(z_l, z_{l'}) \delta V(z_{l'})}_{\text{factorizable kernel}} \Psi(z_{l'}).$$

計算対象の系の散乱解{ $\Psi(z_l)$ }はconjugate gradient(CG)法によって求まる.

演算量の比較 (1イタレーションあたり): ◆ Overbridging Boundary-Matching (OBM) 法→ $(N_x \times N_y)^2 \times N_z$ ◆ Lippmann-Schwinger equation法 → $M_{in} \times N_x \times N_y \times N_z$ (注: Jellium電極の場合に限る.) ここに、 N_μ は μ 方向のグリッドの数、 M_{in} は入射波の数. ところで、 $M_{in} \cong \sqrt{N_x \times N_y}$. 例えば、 $N_x = N_y = 50$ のとき $\begin{cases} N_x \times N_y = 2500 \\ M_{in} \cong 50 \end{cases}$.

First-Principles Calculations in Real-Space Formalism

Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures



by Kikuii Hirose

(Osaka University, Japan)

Tomoya Ono (Osaka University, Japan)

Yoshitaka Fujimoto (University of Tokyo, Japan)

Shigeru Tsukamoto (National Institute for Materials Science, Japan)



Whith cutting-edge materials and minute electronic devices being produced by the latest nanoscale mathematication technology, it is essential for scientists and engineers to rely on first-principles (ab initio) calculation methods to fully understand the electronic configurations and transport properties of nanostructures. It is now imperative to introduce practical and tractable calculation methods that accurately describe the physics in nanostructures suspended between electrodes.

This timely volume addresses novel methods for calculating electronic transport properties using real-space formalisms free from geometrical restrictions. The book comprises two parts: The first details the basic formalism of the real-space finite-difference method and its applications. This provides the theoretical foundation for the second part of the book, which presents the methods for calculating the properties of electronic transport through nanostructures sandwiched by semi-infinite electrodes.

Contents: Real-Space Finite-Difference Method for First-Principles Calculations: Foundations of Methodology; Solvers of the Poisson Equation and Related Techniques; Minimization Procedures of the Energy Functional; Timesaving Double-Grin Technique; Implementation for Systems under Various Boundary Conditions; Electronic Transport Through Nanostructures Between Semi-Infinite Electrodes: Basic Scheme of the Overbridging Boundary-Matching Method; Inclusion of Norm-Conserving Pseudopotentials; Jellium Electrode Approximation; Green's Function Formalism and the Overbridging Boundary-Matching Scheme; Calculation Method Based on the Lippmann–Schwinger Equation; Appendices: Formulas for Long-Range Potentials under Various Boundary Conditions; Tight-Binding Approach Based on the Overbridging Boundary-Matching Scheme.

Key Features

- Presents details of methods, as well as some applications, using accurate schemes for examining electronic configurations and conduction properties
- Information and insight about nanoscale electronic transport using a newly developed method based on first-principles

Readership: Graduate and post-graduate students and researchers in computational, quantum and condensed matter physics, and nanoscience.

264pp Jan 2005 1-86094-512-0 US\$68 £41



First-Principles Calculations in Real-Space Formalism
Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures - (Imperial College Press, London, 2005)

周波数解析による散乱波動関数の計算手法



計算結果:パルス関数の時間発展計算



周波数解析による散乱解の計算結果









透過率のエネルギー依存性



ひとつの時間依存の解から任意のエネルギーの定常状態の波動関数を計算できるので、 定常状態の波動関数を直接計算する手法より効率がよい。

2次元Jelliumワイヤーモデル



系を2次元に拡張し

左のようなJelliumモデルの

散乱問題を解く。

_				
/	av	н	e	
4	an		0	

時間ステップ t(a.u.)	0.2	
グ リッド幅 h (a.u.)	0.5	
x方向の大きさ Lx	4.0	
x方向のグリッド数 Nx	8	
z方向の大きさ Lz	500.0	
z方向のグリッド数 Nz	1000	
積分の上限 T (a.u.)	200	
入射電子のエネルギー (a.u.)	0.05 ~ 1.10	

1 a.u.=0.024fs 1 a.u.=27.211 eV 1 a.u.= 0.52918

計算結果



に計算できる

LOW + → HIGH (a):E=0.675(a.u) (b):E=0.73(a.u) (c):E=0.81(a.u) (d):E=0.91(a.u) (e):E=1.04(a.u)