

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「シミュレーション技術の革新と
実用化基盤の構築」
研究課題「ナノ物性計測シミュレータの開発」

研究終了報告書

研究期間 平成14年11月～平成20年3月

研究代表者: 渡邊 聡
(東京大学大学院工学系研究科 教授)

1 研究実施の概要

【研究構想】

ナノメートルスケールで制御して微細な構造を作製する技術が近年進んでいる。これを用いて新規な素子を作製する可能性を探索する上では、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である。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。対象とプローブとの相互作用や計測時に印加される電場(バイアス電圧を含む)の影響がナノ物性計測においては大きくなること等がその原因である。一方本研究代表者は、局所物性測定の前段階である局所構造・電子状態測定においてさえ実験結果だけでは解釈が困難な場合があり、シミュレーションによる解析支援が大変有用であることを、走査トンネル顕微鏡(STM)像に関する理論解析の中で実感していた。しかし、ナノ物性計測に関するシミュレーションは、ごく限られた計測法についてしか研究されていなかった。そこで、ナノ物性計測に対するシミュレータを開発するという本研究の構想に至った。

「ナノ物性計測」といっても、電気的特性・光学的特性・磁気的特性等、その範囲は大変広い。そこで本研究では、中でも特に重要な、電気的刺激(バイアス電圧を含む)を印加する計測に焦点をあて、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予測するシミュレータを作成することとした。さらに、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た。そして、最終的には実験家が実験データ解析に利用できるナノ物性計測シミュレータを目指し、本研究チームがこれまでに開発してきた方法論をはじめとした、主に密度汎関数法に基づきいくつかの方法論を用いてシミュレータの作成を進めることとした。

【研究実施内容】

本研究では、以下の4つのサブテーマを設けて研究を進めた。

I) 走査プローブ計測シミュレータの開発: STM や原子間力顕微鏡(AFM)等の走査プローブ顕微鏡を応用したナノ物性計測として代表的な、局所トンネル障壁高さ計測とケルビン力顕微鏡に対するシミュレータを開発した。さらに開発したシミュレータを用い、これらの計測法における計測量と微視的電子状態との相関について解析した。

II) 多端子電気特性計測シミュレータの開発: 多探針プローブ等を用いた多端子電気特性計測をシミュレーションする方法論として、3つのアプローチを新たなプログラムの開発や既存プログラムの改良を行いつつ検討した。その中でもっとも有望な密度汎関数強結合法を用いたアプローチにより、多端子電気特性計測シミュレータのプロトタイプを開発した。

III) キャパシタンス計測シミュレータの開発: 電気特性として重要な物理量であるにもかかわらず研究例が少なかったキャパシタンスについて、電極間距離が短い場合にはトンネル電流の考慮が必須であり、他方長い場合にはトンネル電流の考慮により逆に困難が生じることを踏まえ、条件に応じ適切な方法を選択する形のシミュレータのプロトタイプを開発した。

IV) 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れを用いた理論解析: 計測時のブ

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解析した。またこのために、ナノスケール熱伝導を評価する方法論をはじめ、様々な計算プログラムと解析法を新たに開発した。

以上に加え、実験家を含む多くの研究者に使用してもらえる実用的シミュレータの開発という観点から、V) 局所トンネル障壁高さ計測について解析で得られた知見を活かして簡便なシミュレーション方法を考案した、VI) 基本プログラムの高速化・高性能化を図った他、シミュレータによっては計算コストと信頼性とのバランスの点から密度汎関数強結合法を導入したプログラム開発を行った、およびVII) 開発したシミュレータ群のグラフィカルユーザーインターフェイスを整備した、の3点も実施した。

また当初は予定していなかったが、VIII) 本研究のキャパシタンス解析に関する実験研究者から示唆を踏まえ、非接触AFMにおけるエネルギー散逸の振舞いについて解析(共同研究)、IX) プローブ間単分子架橋の電気特性計測において溶液中測定への注目が高まったことを踏まえ、溶液分子が電気特性に与える影響を解析、等についても本研究の中で実施した。

以上の研究を遂行するために、主にI)、II)に必要な半無限電極計算法(境界マッチング密度汎関数法)を開発していた本研究代表者のグループ(東京大学大学院工学系研究科)と、III)に必要な空間分割密度汎関数法およびIV)に有用な時間依存密度汎関数法・分子動力学法プログラムを開発していた東京理科大学理学部渡辺一之教授のグループとが連携して研究を進める体制をとった。グループ間で緊密に議論・情報交換を行った結果、当初から予定していたサブテーマIII)以外にも共著の成果が生まれ、また共著となっていない研究の中においてもグループ間の議論・情報交換が役立った場合が多々あった。

【研究成果】

以下にサブテーマ毎の主な研究成果を記す。

I) 走査プローブ計測シミュレータの開発

局所障壁高さ計測については、シミュレータを開発し、走査像のシミュレーションを世界で初めて行った。また、局所障壁高さ像の原子レベルの凹凸が走査トンネル顕微鏡像の凹凸と定性的に同じになり、「トンネル障壁の高いところでは電子が透過しにくい」という直感と矛盾してしまう原因を、実験で評価される局所障壁高さに絡り込まれているトンネル電子の表面平行方向の運動の観点から解明した。さらに、表面第2層の欠陥の有無、探針原子種、バイアス電圧等による局所障壁高さの変化を解析し、その振舞いを同じ観点から統一的に理解することに成功した。これらの結果は、局所障壁高さ像に対する既存の物理的意味づけの問題点を明確化すると共に、本研究で開発したシミュレータの有用性を実証したものと見える。以上に加え、より簡便な計算によって局所障壁高さのシミュレーションを行う新たな方法論を考案した。

ケルビン力顕微鏡については、量子論に基づくケルビン力顕微鏡シミュレーションを世界で初めて行った。また、トンネル電流が無視できない短距離領域では、2電極の力がつりあわず、系全体として一方向に動く力が働くことを見出した。

以上の他に、半無限電極法(境界マッチング密度汎関数法)計算プログラムの性能向上に関し

ては、SR8000 において 128 プロセッサで単一プロセッサ時の 77 倍の性能向上を達成した。これは実用のアプリケーションプログラムとして大変良好な値である。

II) 多端子電気特性計測シミュレータの開発

ヒュッケル法レベルの多電極電気特性計算プログラムにより、ポルフィリン分子内の電流分布が接続する電極の数や電極接続位置により大きく異なること、2電極を表面に接続した単純立方格子結晶の表面伝導において入射電子エネルギーにより大きな異方性が現れること等を見出した。また、密度汎関数強結合法を用いてより実用的なシミュレータを開発し、ゼロバイアス電圧における自己無撞着計算について正常な動作を確認した。このうち表面伝導の異方性については、その後の文献調査で類似の報告が見つかったが、探針まできちんと考慮した計算は本研究が初めてである。この結果は、ナノスケール多端子電気特性計測において伝導特性の顕著な探針位置依存性など興味深い新現象が生じる可能性を示唆している。

III) キャパシタンス計測シミュレータの開発

まずトンネル電流が無視できない電極間距離については、平行平板電極系で電極間距離が 1nm 程度以下の場合に距離の減少と共にキャパシタンスも減少する量子効果を確認し、またこの領域でのキャパシタンスが電極表面構造に大きく依存することを見出した。また、この解析の過程で、トンネル電流が大きくなる場合にはバイアス電圧の定義にも注意を要することを見出した。さらに、以上の成果をもとに非接触 AFM におけるエネルギー散逸を解析し、「探針振動に伴うエネルギー散逸が探針-試料間距離を短くしていくとある所までは増え、ごく近距離で逆に減少していく」という実験結果を振動に伴うキャパシタンス変化に起因するジュール熱散逸から説明できる可能性を初めて指摘した。

一方、トンネル電流が無視できる場合については、様々なナノスケール電極構造に対するキャパシタンス計算により、電極を構成する原子種・電極構造・電子構造がキャパシタンスに大きな影響を与えていること、および直径 1nm 以下の小さな構造体では自己キャパシタンスに現れる量子効果が顕著になること等を見出した。

IV) 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れを用いた理論解析

まずナノスケール熱伝導については、カーボンナノチューブ (CNT) において、構造の1次元性を反映して数十ケルビンの低温領域では熱伝導度が温度に線形に振舞い、その比例係数がナノチューブの構造に依存しない普遍的な値に量子化されること(熱伝導度の量子化)を見出した。また室温における熱伝導に関しては、金属 CNT においてさえも伝導電子は熱伝導へ寄与せず、フォノンによって熱流が運ばれることを理論的に示した。さらに CNT が原子欠陥を含む場合には、温度の上昇と共に欠陥による散乱で熱伝導度が減少することを明らかにし、その原因が原子欠陥周りに局在したフォノン状態に入射フォノンが後方共鳴散乱されることためであることを明らかにした。

次に局所発熱とその電気伝導への影響については、最小フラーレン C_{20} を架橋した金の二電極間を流れる電流と分子振動の相互作用を解析し、振動モードによりエネルギー散逸に大きく寄与するものとそうでないものがあることを見出した他、バイアス電圧 100mV 未満の範囲では発熱が大部分電極内部で生じることを明らかにした。

電流およびバイアス電圧による力の解析においては、まず Na 原子鎖において、バイアス電圧1V までは原子変位が電圧に比例するのに対し、1V を超えると全く異なる振舞いを示すことを見出した。次に CNT に吸着した原子に働く力を解析し、力の CNT 軸方向成分は原子の実効電荷に比例して大きさと方向が定まり、方向はバイアス極性によって反転すること、一方軸と垂直方向の力の成分はたとえバイアス極性を反転させても方向が変わらず、吸着原子の種類によってその大きさが顕著に異なることを見出した。

次に、ゲート電極の影響をグラフェンナノリボン(有限幅の単層グラファイト)を例に解析した過程では、ゼロギャップ半導体であるジグザグ型の端を持つグラフェンナノリボンにおいて、有限ギャップを持つ半導体に類似した電流の飽和現象が起こることを見出した。さらに、電極によって挟まれたデバイス部分を微量に n 型にドーピングする事により飽和電流値を制御出来ること、デバイス領域と静電的に結合されたゲート電極に印加される電圧を様々に制御する事により飽和電流値の制御や飽和特性・非飽和特性のスイッチング制御が可能になること等を見出した。

以上の他にも、電極間を架橋する単分子の伝導特性に及ぼす周囲の溶媒水分子の影響を初めて解析し、水分子の存在により伝導度が 10%程度減少することを明らかにした、ナトリウム表面から電界放射される時、電界強度がある閾値を超えると表面ナトリウム原子が負に帯電して活性化エネルギー障壁無しに真空へ蒸発する現象を見出し、これが放射電流効果によるものであることを示した、等の成果を挙げた。

以上のように「世界初」といえる多数の成果を得ることができたが、中でもナノスケール熱伝導とキャパシタンスの解析は注目を集め、多数の招待講演や解説の依頼を受けた。また、多くの研究者に使用してもらえるシミュレータの開発という点でも、様々な方法論により多くのプロトタイプを開発し、検討を進め、まずキャパシタンスシミュレータ(トンネル電流の無い場合)について、ユーザーインターフェイスとマニュアルを整備したシミュレータを本報告書執筆時点で開発済である。これを基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、キャパシタンスシミュレータ(トンネル電流を考慮した場合を含む統合版)についてもユーザーインターフェイス・マニュアルの整備を進めており、平成 20 年 3 月末から順次公開していく。

2 研究構想及び実施体制

(1) 研究構想

ナノメートルスケールで制御して微細な構造を作製する技術が近年進んでいる。これを用いて新規な素子を作製する可能性を探索する上では、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である。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。対象とプローブとの相互作用や計測時に印加される電場(バイアス電圧を含む)の影響がナノ物性計測においては大きくなること等がその原因である。一方、本研究代表者は、局所物性測定の前段階として重要な局所構造・電子状態測定について、特に走査トンネル顕微鏡(STM)を用いた局所観察に関する理論解析の研究に携わってきた。そして、実験で観察された像だけでは解釈が困難であり、シミュレーションによる解析支援が大変

有用であることを、銀吸着シリコン表面等に関する自らの研究の中で実感した。

本研究開始時には、STM を用いて複雑な表面構造を解析する際に第一原理計算と照らし合わせて解析することが広く行われるようになっていた。また、ナノ構造の電子状態や原子構造を計算するソフトウェアが整備され、計算の専門家以外の研究者が比較的容易に使えるソフトウェアも流通するようになっていた。これに対し、本研究で扱うナノ物性計測シミュレータは、当時でも潜在的な需要はあると予想され、今後ますます重要性が増すと思われるにもかかわらず、ごく限られた計測法についてしか研究されていなかった。しかも、実験家が自分のデータの解析に使用できるソフトウェアはほとんど無い状態であった。

以上のような状況と経験とを踏まえ、「ナノ物性計測に対するシミュレータを開発する」という本研究の構想に至った。このシミュレータの特徴は、「実験で測定される計測量を、本質的な部分は実験に即してシミュレーションする」という点にある。一方このシミュレーションの中では、ポテンシャル分布、電荷分布、電流分布、各原子に働く力やそれによる変位等、実験では直接知ることができない多くの微視的情報を得ることができる。これを基に計測量を解析し、計測量の持つ物理的意味を明確にする、というのが本研究の戦略である。図 2.1 にこの構想の概念図を示す。

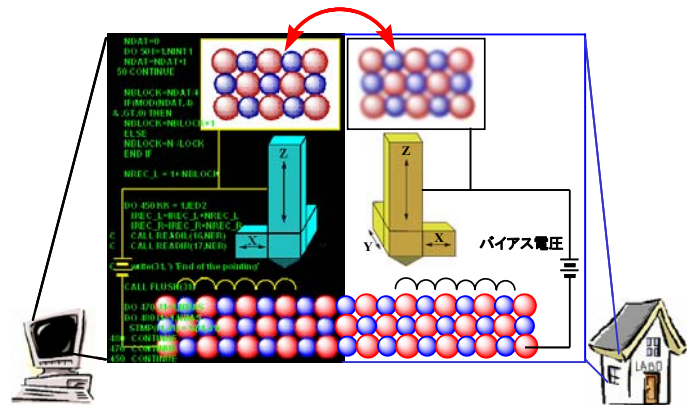


図 2.1: 本研究の構想の概念図。マイクロな電子状態だけでなく、実験で得られる計測量をシミュレーションして実験結果と比較し、その物理的意味を明らかにすると共に実験データの解析支援に役立つ。

一口に「ナノ物性計測」といっても、電気的特性、光学的特性、磁気的特性等、その範囲は大変広い。そこで本研究では、ナノ物性計測の中でも特に重要な、電気的刺激(バイアス電圧を含む)を印加する計測に焦点をあて、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予測するシミュレータを作成することとした。さらに、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た。そして、最終的には実験家が実験データ解析に利用できるナノ物性計測シミュレータを目指し、本研究チームがこれまでに開発してきた方法論をはじめとした、主に密度汎関数法に基づくいくつかの方法論を用いてシミュレータの作成を進めることとした。

電気的刺激を印加するナノ物性計測に範囲を絞っても、その具体的手法には様々なバリエーションがある。本研究においては、重要性・将来性等の観点から検討した上で、4つのサブテーマを設けた。サブテーマの概要とその当初の研究目標は以下の通りである。

I) 走査プローブ計測シミュレータの開発

単一プローブの走査プローブ顕微鏡を応用したナノ物性計測手法に対するシミュレータを開発する。具体的には、局所トンネル障壁高さ計測とケルビン力顕微鏡とをターゲットとした。局所トンネル障壁高さ計測では、図 2.2 に示すようにプローブ位置の微小変化による電流変化を検出し、その結果から電子が感じる局所的なトンネル障壁の高さ(局所仕事関数と呼ぶこともある)を評価する。一方ケルビン力顕微鏡では、バイアス電圧微小変化に対するプローブ-試料間力の変化を検出し、その極小値から局所的接触電位差を評価する。いずれも表面の電荷分布や分極状態について有用な情報が得られると期待されている計測手法である。

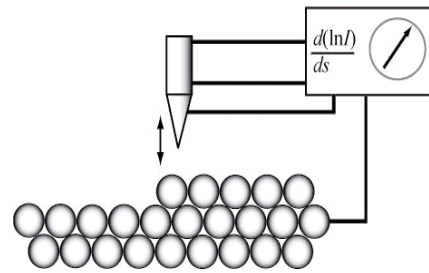


図 2.2: 局所トンネル障壁高さ計測の概念図。

これら2つのシミュレータの基本は、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である。本研究チームでは、半無限電極とバイアス電圧とを陽に考慮し、このような計算を行うことが可能な境界マッチング密度汎関数法とその計算プログラムとを既に開発していたので、本研究においては、プローブ位置の微小変化による電流変化(局所トンネル障壁高さ計測)およびバイアス電圧微小変化に対するプローブ-試料間力変化(ケルビン力顕微鏡)を計算する付加的なモジュールを開発することとした。そして、開発したシミュレータを用いて、これらの計測で得られる「局所障壁高さ」および「局所接触電位差」の持つ物理的意味を明らかにすることを目指した。

II) 多端子電気特性計測シミュレータの開発

多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。図 2.3 の概念図に示したように、適切な電極間に電圧を印加した上で適切な(一般には電圧を印加した電極間とは異なることが多い)電極間を流れる電流を計測する、というのがこの計測手法の基本であり、これにより電極-試料間の接触電位差の影響を除去した形で電気伝導度を計測したり、デバイスに有用な非線形電流-電圧特性やそのゲート電圧による制御の可能性を計測したりすることができる。

このシミュレータの基本も I) の場合と同様にバイアス電圧印加時の電子状態計算であるが、本チームで開発済のプログラムをはじめ既存のプログラムは対向半無限電極系のみ

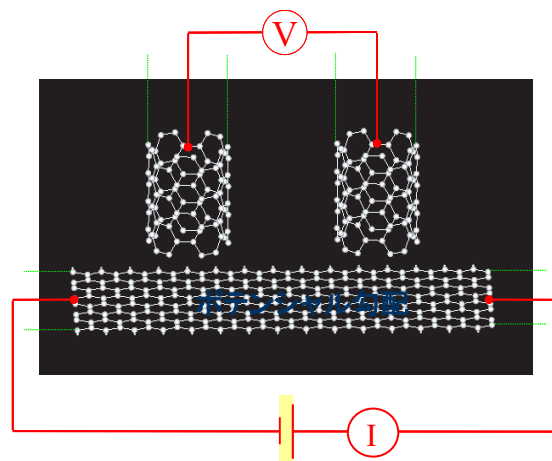


図 2.3: 多端子電気特性計測の概念図。電圧端子に電流が流れない条件で電流と電圧を計測すると、マクロ系なら接触抵抗の影響を除去した伝導度を求めることができる。本図のようなマイクロ系でもこれが成り立つか明らかにするのが本項目の目的の1つである。

に適用できるものであったため、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これを拡張する。この拡張には様々な技術的な困難も予想されたため、本研究の中で新たな方法論も必要に応じて開発することとした。

III) キャパシタンス計測シミュレータの開発

ナノ構造の電気特性計測やナノデバイスの動作においてキャパシタンスは重要な物理パラメータになることが多いが、キャパシタンス自体の定量的評価はナノスケールではほとんどされていなかった。そこで本項目では、ナノ構造のキャパシタンスを評価するシミュレータを開発する。

ナノ構造のキャパシタンス計算では、物体間の距離等によって使用できる方法論が異なる。すなわち、電極間距離が近い場合には電極間を流れる電流を考慮したシミュレーションが不可欠であるのに対し、電極間がある程度離れると電流まで計算する手法は計算コストの点で大変不利となり、また計算の収束性等の技術的困難も招く。そこで本研究では、上記 I)、II) の基本プログラム(境界マッチング密度汎関数法)を用いたシミュレータと、本チームで開発済の空間分割密度汎関数法プログラムを用いたシミュレータとを開発することとした。そして、条件に応じ適切なシミュレータの選択する形で上記の問題に対応することとした。

IV) 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れを用いた理論解析

計測時のプローブ近接や外場印加による原子構造変化、および原子振動や温度上昇などの局所物理現象は、計測量に大きく影響する可能性がある。これらの影響による計測量の変化を解析することが本サブテーマの目的である。

当初計画の中で特に具体的目標と考えていたのは、i) プローブ近接や外場印加による原子構造緩和の計測量への影響、および ii) 計測プローブと試料とからなる局所系における熱発生・熱伝導の計測量への影響である。i) を扱うためには、例えば上記 I)、II) で述べた基本プログラムに原子に働く力およびそれに応じて構造を緩和させる機能を付与し、この機能を用いて構造緩和の影響を解析する。ii) については、古典分子動力学法等によってナノスケール熱伝導を解析することを一つのターゲットとし、さらに熱(フォノン)と電流との相互作用を解析することをもう一つの大きなターゲットとする。これらに必要な計算法と計算プログラムについても、必要に応じて本研究の中で整備していくこととした。

本研究においては、上記のようなシミュレータが解析に有用であることを実証するだけでなく、ナノ物性計測の実験を行っている実験家を中心に多くに研究者が使用できる実用的シミュレータを開発することをも当初目標に掲げた。すなわち、上記 I)～IV) について簡単な系でシミュレータの動作を実証し、計測量の物理的意味等のある程度解明した段階で、より現実的な系に対して使用できるシミュレータの開発も行う。この場合、計算対象の原子数が必然的に多くなるため、下記の 2 点を検討し、計算効率のよいシミュレータを作成することも研究課題とした。

V) 計算モデルの簡素化の検討

上記 I)～IV) で得られる知見を活かし、測定手法毎に重要でない因子を明らかにしてモデルを簡素化し、シミュレーション時間の短縮を図る。

VI) 計算方法の高速化の検討

アルゴリズム改良による計算高速化の検討はもちろんであるが、その他に第一原理計算する部分と経験的・半経験的計算する部分との使い分けやバイアス電圧印加などの計測状況に応じたパラメータ最適化を行った半経験的計算などの方法による計算の高速化も検討する。

さらに、このような実用的シミュレータでは計算対象も多様となるため、対応できる原子種も多いことが望まれる。境界マッチング密度汎関数法の計算プログラムはこの点に対応していなかったため、この点でのプログラム改良も本研究の中で行うこととした。また、ユーザーインターフェイスやマニュアルを使いやすいものとするには多くの研究者に使用してもらう上で大変重要である。そこで、研究期間終了までにはユーザーインターフェイスやマニュアルについても整備した上でプログラムを公開することを目標とした。

本研究で開発するシミュレータは、その多くが他に例の無い初めての試みであったため、原理的に可能であることはわかっていたものの、実際にシミュレーションして有意な結果を得ることができるかどうかは必ずしも定かでなかった。実際、後述するように予想していなかった問題点が顕在化したものもある。そこで本研究においては、研究期間の前半では単純なモデル系を主に扱い、上述のシミュレータの正しい動作を実証すること、およびそれによって重要な因子を明らかにし、上記 V)につなげていくことを中心とした。一方研究期間の後半では、前半の成果に基づいて多くの研究者が使用できるシミュレータを開発していくことを中心とした。

以上の目標を達成するために、互いに補い合う特長を持つ方法論を開発していた2つのグループで本研究を実施することとした。その2つのグループは以下の通りである。

(A) 半無限電極計算グループ

研究代表者(渡邊聡)が主宰する東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻のグループである。研究の効率的推進の観点から、本研究で取り上げる対象の一つである「局所トンネル障壁高さ計測シミュレータ」に密接に関連したテーマで渡邊聡研究室と既に共同研究を開始していた日本大学理工学部戸塚英臣助手にこのテーマの分担をお願いした。したがってこのグループの研究実施場所は2箇所に分かれているが、戸塚助手は渡邊聡研究室のセミナーにほぼ毎回顔を出している等、きわめて緊密に連携しており、実質的に一つのグループといえる。

このグループでは、半無限電極を含むナノスケール系の電子状態・電気特性計算法(境界マッチング密度汎関数法)の計算プログラムを既に開発している。これを基盤として、走査プローブ計測シミュレータの開発、多端子電気特性計測シミュレータの開発、そしてトンネル電流が無視できない場合のキャパシタンスシミュレータの開発を主に担当した。

(B) 空間分割・時間依存計算グループ

東京理科大学理学部物理学科渡辺一之教授の研究室である。このグループでは、空間分割密度汎関数法を開発しており、また時間依存密度汎関数法プログラムや分子動力学法プログラムも開発している。これらを基盤として、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を主に担当した。

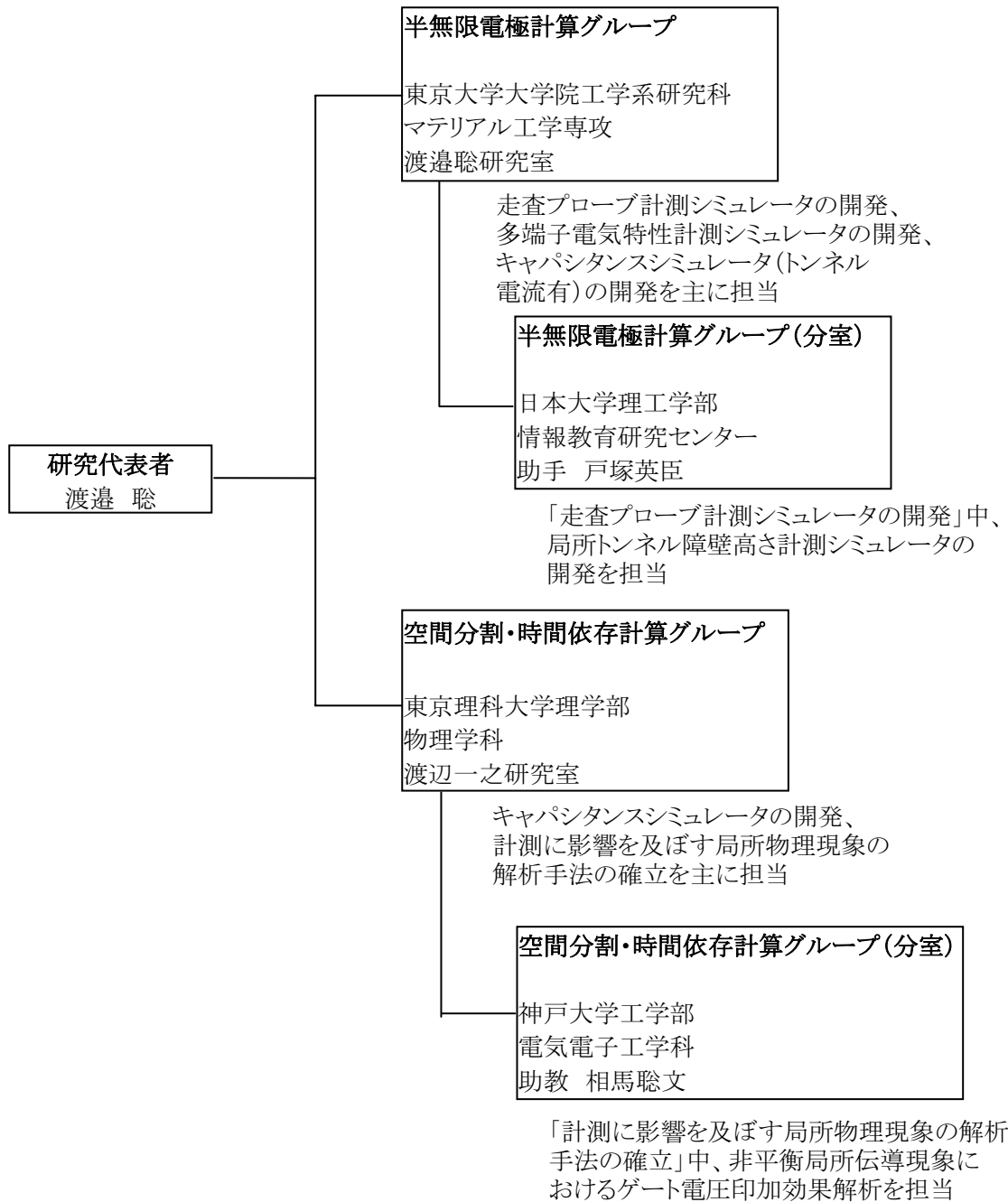
なお、本研究プロジェクトで CREST 研究員に採用され、渡辺一之教授のグループの研究活動に参加した相馬聡文氏が、後に神戸大学工学部電気電子工学科助手(現 助教)に採用された。研究の効率的推進のため、本研究プロジェクトで開始したテーマを引き続き担当してもらうこととした。本サブグループの研究実施場所が2箇所にわたるのはこのような事情によるものである。

本研究プロジェクトでは、上記の2グループが担当を明確に分けて実施するのではなく、緊密に議論し、互いのノウハウ等を提供しあって研究を進めていくことを当初から心がけた。例えば、キャパシタンス計測シミュレータにおいては、電極間にトンネル電流が流れる場合については東大渡邊聡研究室で開発した境界マッチング密度汎関数法を用いるのが有利である。そこで、この部分については渡邊聡研究室が担当するようにした。この連携は本研究全体の推進に大変効果的に作用し、当初予定していた上記のキャパシタンスシミュレータ以外の点でも共著の成果を挙げることができた。また直接共著にならなかった成果でも、例えば理科大グループがゲート電圧の効果等を検討するために先に導入した密度汎関数強結合法を後に多端子電気特性計測シミュレータの方法論に採用する等、様々な形で情報交換・議論が研究の推進につながった。

最後に、当初計画以外の目標について述べる。まず、キャパシタンスに関する項目では、本研究の成果に注目した実験研究者から、非接触 AFM におけるエネルギー散逸にキャパシタンスが関係してくる可能性を示唆された。すなわち、非接触 AFM における探針振動は探針-試料間キャパシタンスの変化を伴い、これにより変位電流が発生し、さらにジュール熱散逸が生じる。このジュール熱散逸が実験で観測されたが原因のわからなかった振舞いを理解する鍵になるかもしれないということであった。そこで、実験研究者と共同でこの解析に取り組むことを本研究に組み込んだ。

また、本研究期間中に実験が進んだ点もある。例えば単分子架橋の電気伝導特性については、溶液中での精密な実験が急速に進んだ。一方、カーボンナノチューブを中心に、伝導特性のゲート電圧による変化の計測も進んだ。そこで、これらの点についても本研究の中で取り上げて解析することとした。

(2)実施体制



3 研究実施内容及び成果

3.1 走査プローブ計測シミュレータの開発 (東京大学 半無限電極計算グループ)

本サブテーマでは、走査プローブ顕微鏡技術を応用した技術として①プローブ位置の微小変化による電流変化を検出する局所トンネル障壁高さ計測、②バイアス電圧微小変化に対するプローブ-試料間力変化を検出するケルビン力顕微鏡、を取り上げ、これらのナノ物性計測法に対するシミュレータを作成し、得られる計測量の解釈法を確立することを目指した。また、多くの研究者に使用してもらえるシミュレータを開発するために、③境界マッチング密度汎関数法プログラムの基本性能の向上も図った。

(1) 研究実施内容及び成果

① 局所トンネル障壁高さ計測シミュレータ

【実施方法】

局所トンネル障壁高さ(以下、LBH(local barrier height)と記す)は、実験ではSTMによって測定されたトンネル電流の探針試料間距離依存性から次式を用いて評価される。

$$\phi_{LBH} = 0.952 \left(\frac{d \ln I_t}{dz} \right)^2 \quad I_t [\text{A}] : \text{トンネル電流}, z [\text{\AA}] : \text{探針試料間距離}$$

本研究においては、探針試料間距離を微小変化させての電流計算を境界マッチング密度汎関数法で行い、実験と同様に上式を用いて LBH を評価するシミュレータを開発した。そして、開発したシミュレータを用いた解析を行い、計算で得られるポテンシャル分布から直接評価された障壁の様子と上式から評価された LBH とを比較する等、計算結果から直接得られる物理量を用いた解析により、LBH の持つ物理的意味を明らかにすることを試みた。

【実施内容】

まず、主にアルミニウム (Al) 表面+アルミニウム (Al) 探針をモデルとして欠陥の有無やバイアス電圧変化等に対する LBH の振舞いを調べ、ポテンシャル分布から直接推定した障壁高さの振舞いと比較考察した。さらに、走査像の計算も世界で初めて行ない、その結果の持つ物理的意味について詳細に検討した。用いたモデルの例を図 3.1.1 に示す。試料表面は半無限ジェリウム電極上の薄膜で、探針は半無限ジェリウム電極上の原子 1 個でモデル化した。

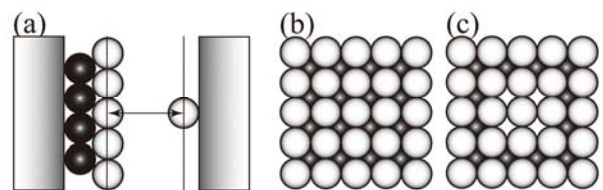


図 3.1.1: 局所トンネル障壁高さ計測シミュレーションに用いたモデルの例。(a)は試料と探針を示し、(b)と(c)は試料表面を別の方向から見たもの。なお(c)は表面第2層に欠陥クラスターを含んでいる。

次に、実験方法を詳しく見てみると、同じ式に基づくとっても Modulation 法(探針を微小振動させた際のトンネル電流の変化を測定し、上式を差分化した式により LBH を評価する測定法)と Approach 法(探針を試料表面から離しながら測定した電流変化を関数でフィッティングし、その関数と上式から LBH を評価する測定法)とがあり、両者で異なる振舞いが報告されている。そこでこの

2つの方法による結果の違いについても解析を行った。

以上の点はすべて金属表面を対象に実施したが、その結果を踏まえて半導体表面(具体的には水素終端シリコン表面)についても計算を行い、印加電圧によるバンド湾曲等、金属では生じない半導体特有の現象に注目しつつ解析を行った。

さらに、以上を踏まえてLBHを簡便に評価する方法を検討し、考案した。

【成果】

まず、走査像を計算した結果を図3.1.2に示す。この例では、探針試料間距離は 5.9 \AA であり、比較のためにLBH像の他、トンネル電

流像および計算で求まるポテンシャル分布から直接求めた障壁値(探針先端と試料を結ぶ最短線上でのポテンシャルの最大値)の像(以下これをMBH(Maximum barrier height)像と呼ぶ)も合わせて示す。トンネル電流像とLBH像は同じコントラストを示しているが、これは多くの実験でSTM像とLBH像が同じコントラストを示すことと一致する結果である。一

方トンネル電流像とMBH像とは逆のコントラストを示しているが、これはMBHの物理的な意味から理解できる。すなわち、「障壁が高いところでは(探針試料間距離が同じなら)電流が流れにくい」という直感的理解と一致した振舞いである。もっとも重要な結果は、LBH像とMBH像が互いに逆のコントラストを示すことである。このことは、LBHが「局所的なトンネル障壁高さ」と直接には対応していないことを意味する。

次に、試料表面原子構造のLBHへの影響を見るために、Al(100)理想表面と欠陥表面上のLBHとMBHのバイアス電圧依存性を探針が表面原子の直上にある配置で計算した結果を図3.1.3に示す。なおここでは試料表面のフェルミ準位が探針のそれよりも高い場合を負バイアス電圧と定義する。この図からLBHとMBHのバイアス依存性に関して、1)理想表面のLBHもバイアス極性依存性を示す、2)欠陥表面のLBHのバイアス極性依存性は、理想表面のそれと逆の依存性を示す一方、MBHは理想表面のMBHと同様のバイアス極性

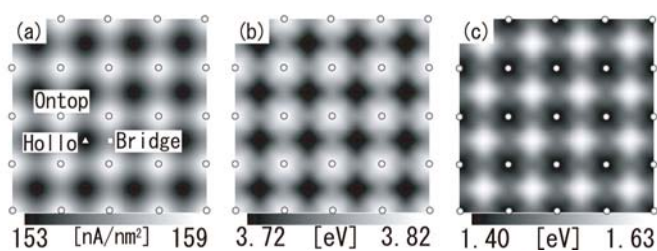


図3.1.2: 計算で得られた(a)トンネル電流像、(b)局所トンネル障壁高さ(LBH)像、および(b)ポテンシャル最大値(MBH)像。MBHの定義については本文参照。小さな白丸は表面Al原子位置を示す。

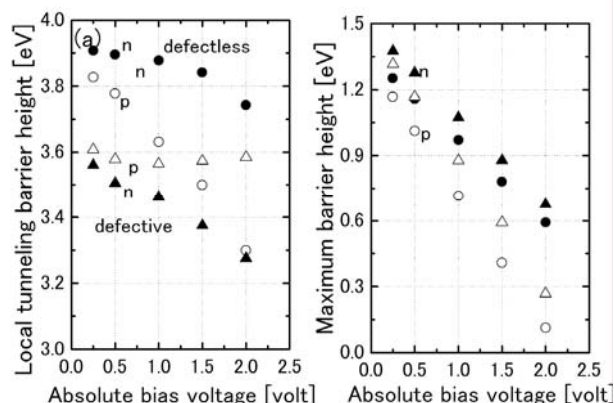


図 3.1.3: 理想表面および欠陥を含む表面の (a)LBHおよび(b)MBHのバイアス電圧依存性。pは正バイアス、nは負バイアスを示す。

依存性を示す、3) 欠陥表面の場合、正バイアス電圧の変化に対して LBH は非線形な振舞いをするが、それ以外の場合の LBH はバイアス電圧の増加とともに単調に減少する、といった特徴をみてとることができる。なお Al 表面に対する LBH 計測は難しいため、本計算結果を実験と直接比較することはできないが、Au(111)表面上の LBH について、バイアス電圧の増加とともに値が減少し正バイアス電圧での値が負バイアス電圧の時よりも大きいという、本計算結果と合致した実験結果が報告されている。

次に、Al(100)表面を例に探針原子種の LBH への影響について調べ、Al 探針と Na 探針の LBH の差が MBH の差よりも大きいことを見出した。探針の仕事関数の差よりも LBH の差の方が大きいという点で、この結果は実験と一致する。さらに、LBH についてはこの 2 種類の探針が逆のバイアス極性依存性を示すのに対し、MBH については同じ依存性(負バイアスの MBH が正バイアスの値より大きい)を示すことがわかった。

以上のように、本研究では LBH の振舞いを様々な観点から解析し、電子状態計算から直接求めることができるポテンシャル障壁値(MBH)と比較検討して、LBH が本来期待した「局所的なトンネル障壁高さ」という物理的意味とは必ずしも対応しないことを明確にした。さらに検討を進めた結果、「LBH の評価式において表面平行方向のポテンシャル変動が考慮されていない」ということが本質的な問題点であることを明らかにした。すなわち、前出の LBH 評価式を導出する際には表面平行方向にポテンシャルが一樣と仮定して 1 次元矩形ポテンシャルに帰着させているが、実際には表面平行方向に原子スケールのポテンシャル変動が存在する。電子が試料-探針間のトンネルに利用できる運動エネルギーは、この表面平行方向の運動エネルギーを差し引いたものとなる。このため LBH の値が MBH に比べて大きくなることは既に知られていたが、この影響が探針位置、バイアス電圧、探針原子種等によって異なってくることは、本研究によってはじめて明らかになった。

走査像の振舞いについてこの点をみるために、図 3.1.4 にトンネル電流の空間分布を試料-探針間の一断面で見た様子を示す。探針が on-top サイト(表面原子の直上)にある場合にはトンネル電流が集中しているのに対し、hollow サイト(4 個の表面原子の中央の直上)にある場合には電流が広がっている様子がわかる。この電流の広がり方の差は表面平行方向のポテンシャル変動のサイトによる違いを直接的に反映

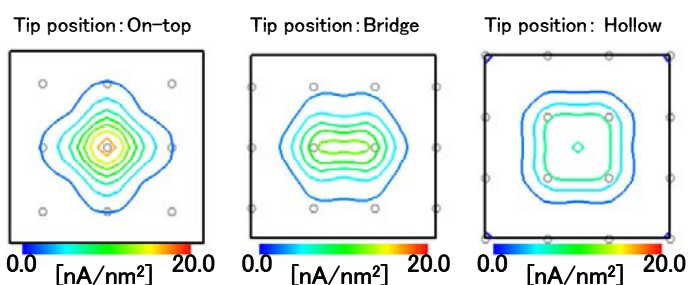


図 3.1.4: Al 探針が Al(100)表面の on-top サイト上にある場合(左)、bridge サイト上にある場合(中)、および hollow サイト上にある場合(右)のトンネル電流分布の等値線図。探針-試料間の一断面で見たものだが、断面位置による本質的な差は無かった。小さな白丸は試料表面原子位置を示す。

したものであるが、これは LBH に繰り込まれる表面平行方向運動エネルギー効果の大きさがサイトによって変化することにつながる。この効果が大きいため LBH 像と MBH 像とのコントラストが反

転するのである。

本研究ではさらに、LBH への表面平行方向の運動の影響を評価するために、電子が表面垂直方向の運動に利用できる運動エネルギーに関する状態密度を用いることを提案した。この状態密度の一例を図 3.1.5 に示す。理想表面の場合にはバイアス極性による差が小さいのに対し、欠陥を有する表面の場合にはバイアス極性による形状の差が大きい。表面垂直方向運動エネルギーに関する状態密度のバイアス極性による差が小さい場合、LBH のバイアス極性依存性はMBHのバイアス極性依存性を直接反映する。一方、この状態密度のバイアス極性差が大きい場合には、LBHのバイアス極性依存性はMBHとこの状態密度のバイアス極性依存性を総合したものとなる。このことから、図 3.1.3 に示した振舞いを理解することができる。

この他、Modulation 法と Approach 法という測定方法の違いについて解析した結果からは、2つの評価方法で LBH の定量的な差が小さいことを明らかにした。さらに、実験で見られている違いの原因については、探針の弾性変形の効果によって説明できる可能性があることを示した。また金属表面と大きく性質の異なる半導体表面の例として水素終端 Si(100)2×1 表面に対して開発したシミュレータを適用し、LBHのバイアス電圧依存性と共に、バイアス電圧を印加した探針により誘起されるバンド湾曲の様子のバイアス電圧依存性を求めた。詳細については現在解析を進めている。

最後に、LBH を簡便に評価する方法を考案した。開発したシミュレータでは、1点のLBHを求めるために2つの異なる探針-試料間距離に対してバイアス電圧を印加した境界マッチング密度汎関数法の自己無撞着計算でトンネル電流を計算しており、走査像を求めるにはこれを多数回行う必要がある。これに対し、新たに考案した方法ではトンネル電流計算の際の境界マッチング密度汎関数法計算を非自己無撞着に行えばよく、これにより数十倍以上の高速化が期待できる。現在、この方法の実証計算と特許出願準備を進めている。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

局所トンネル障壁高さ(LBH)が試料表面平行方向の運動のために実際のポテンシャル障壁(MBH)より高くなることは Lang らの理論解析で知られていた。また、この影響の LBH への大きさの探針位置による変化についても、Ciraci らがごく粗い近似で解析している。しかし、LBH の走査像をシミュレーションしたのは本研究が初めてであり、バイアス電圧、表面構造、探針原子種等に対する依存性や像のコントラスト等、様々な角度から LBH について理論的に検討したのも本研究が初めてである。さらに、これらの様々な点を「電子の表面平行方向の運動」およびその影響の指標としての「表面垂直方向の運動エネルギーに関する状態密度」という観点から統一的に理解でき

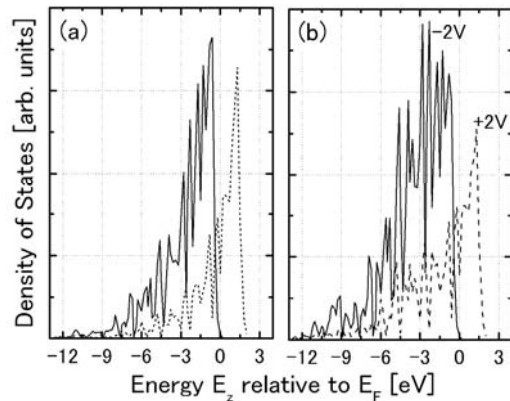


図 3.1.5: (a) 理想 Al(100)表面および(b)欠陥を有する表面に対する表面平行方向運動エネルギーに関する状態密度。実線と点線は、-2V と+2V のバイアス電圧をそれぞれ印加した場合に対するものである。

ことを示した点で、本研究の意義は大きい。今後実験データを解析する上で、本研究で開発したシミュレータと上記の知見は大変有用になると期待される。

②ケルビン力顕微鏡シミュレータ

【実施方法】

ケルビン力顕微鏡では、探針-試料間に働く力を計測し、これが最小になるようなバイアス電圧を求める。この電圧は「接触電位差」と呼ばれている量に対応する。マクロな接触電位差は探針と試料の化学ポテンシャル差で決まり、探針を試料表面平行方向に走査しても変化しないはずだが、ケルビン力顕微鏡で計測される「局所的接触電位差」は原子レベルで変化する。この局所的接触電位差の意味の明確化が本項目の解析の主眼となる。

本項目では、プローブに働く力とそのバイアス電圧依存性の計算が必要である。ここで注意したのは、電極表面の各原子に働く力だけでなく、半無限電極に働く力も計算する必要がある点である。そこでまず、ヘルマン・ファインマンの定理に基づいてこの力を計算するサブルーチンを作成した。次にこの機能の検証と、これを用いた解析を行った。

【実施内容】

まず上記の力を計算するサブルーチンを開発した。バイアス電圧を印加しない清浄ジェリウム電極間に働く力については既報の計算結果があるため、それとの比較を行って開発したサブルーチンの信頼性をチェックした。

その上で力のバイアス電圧依存性を清浄ジェリウム電極について調べてみたところ、予想外の振舞いが見出されたため、この点について詳細な検討を行った。この際には、市販プログラム (Atomistix Tool Kit (ATK)) を用いた計算も比較のため行った。

一方、電極間距離がある程度離れている場合には上記の予想外の振舞いが現れないため、この領域でより現実に近い Al 表面モデル+Al 探針系に対する計算を行って、ケルビン力顕微鏡の走査像シミュレーションに向けた予備的データを得た。

【成果】

2つの清浄ジェリウム電極間に働く力のバイアス電圧依存性を図 3.1.6 に示す。この力のバイアス電圧依存性を計算したのは本研究が初めてである。古典論からは電極間力がバイアス電圧の2乗に比例すると予測されるが、電極間距離が15Bohr (=0.79nm) 以上の場合の結果はこの予想通りとなっている。一方、12Bohr (=0.63nm) 以下の場合には結果は0Vに対して非対称であり、古典論と異なる振舞いを示している。またこの振舞いは、2つの電極に働く力が釣りあっておらず、系全体の重心が動くような力が

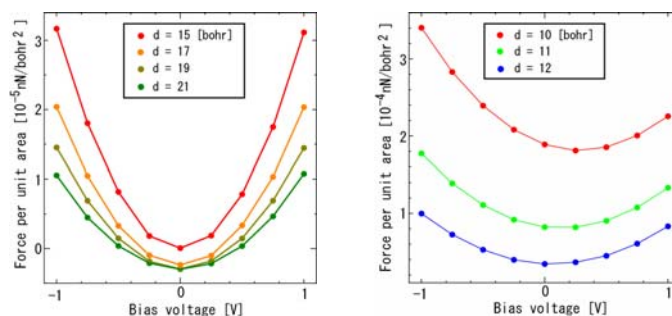


図 3.1.6: 清浄ジェリウム電極間に働く力のバイアス電圧依存性の計算結果。

生じていることを示している。

この力の振舞いについて解析したところ、電極間を流れる電流の大きさと系全体を動かす力の間には強い相関があること、電極に原子層を載せた系でも同様の力が現れること等がわかった。さらに、本計算プログラム固有の問題かどうかを確認するため、市販プログラム Atomistix Tool Kit (ATK) を用いて同様の計算を行なった。ATK は、非平衡グリーン関数および局在原子軌道基底を用いている点において本研究で開発したプログラムと異なっている。この検討の過程で ATK 計算では領域内の電荷中性条件が必要な精度では満たされていないことが明らかになったため、本研究との比較検討は十分にはできなかった。しかし、この力の存在は本研究のプログラムだけでなく同様の方法論に広く共通する問題である可能性が高いこと、市販プログラムに対し本研究のプログラムが計算精度において優位性を持つ点があること等を明らかにすることができた。

次に、上記の力の不釣合いが問題とならない距離において、ケルビン力顕微鏡の測定量である局所接触電位差を評価した。試料として半無限ジェリウム電極に接続した Al(100)表面を、探針として同じモデル上にさらに Al 単原子を吸着させたものを用い、探針に働く力 (Al 原子に働く力とジェリウム電極に働く力の総和) のバイアス電圧依存性を計算した結果を図 3.1.7 に示す。力の変化が妥当な放物線状を示していることと共に、力の絶対値が極小になる電圧が 0V からずれていることがわかる。この電圧が局所接触電位差であり、この結果は原子構造を考えた系に対する本シミュレータの正常な動作を検証したものと見える。今後この結果の詳細な解析により、ケルビン力顕微鏡で得られる局所接触電位差とマイクロな電子状態との相関を解明できるものと期待される。なお、探針と試料が同じ物質であるにもかかわらず局所接触電位差が生じることは、形状による電子状態の変化を考えれば必ずしも不思議ではないが、その詳細な解析は今後の課題である。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

ケルビン力顕微鏡に対するシミュレーションは近年進みつつあるが、いずれも古典電磁気学的な計算であり、探針-試料間に働く力を量子論のレベルでバイアス電圧の影響まで含めて評価したのは、本研究が初めてである。この点で本研究の意義は大きい。また、トンネル電流が大きくなる状況で 2 つの電極に働く力がつりあわなくなるという結果についても過去の研究では指摘されたことがなく、基礎科学の面で有意義な知見といえる。

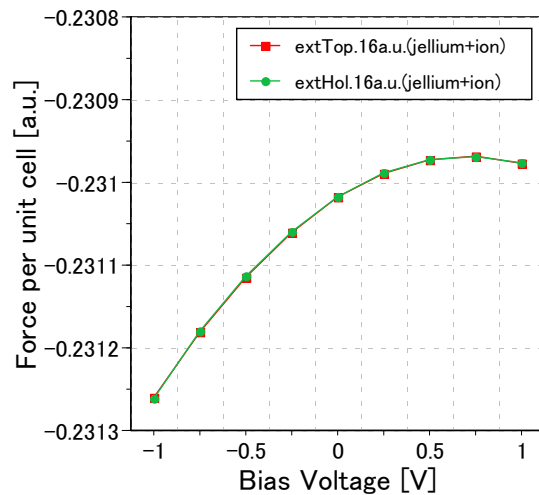


図 3.1.7: Al 表面 + Al 探針系において探針に働く力のバイアス電圧依存性の計算結果。「Top」は探針が on-top サイトの直上に、「Hol」は hollow サイトの直上にある場合。

③境界マッチング密度汎関数法プログラムの基本性能の向上

【実施方法】

本研究プロジェクト開始時点では、境界マッチング密度汎関数法の基本プログラムでは経験的擬ポテンシャルを用いていた。このために十分な信頼性で結果を得ることができる原子種が限られていたので、本研究で非局所擬ポテンシャルの組み込みを行った。

また計算速度の向上をはかるプログラム改良も行った。特に並列計算効率を向上させるためのノード内並列化効率の改良やロードバランス等のチューニングを実施した。

【実施内容】

計算速度向上については、まず現状での並列化効率を詳しく解析した。ノード間並列化を MPI で実装しノード内についてコンパイラの自動要素並列化を用いていた当初のコードでもノード数に対する並列効率は高かったが、本研究の中でノード内の並列化効率まで含めて性能評価を改めて行なってみたところ、ノード内並列効率が悪かったことが判明した。そこで、ノード内並列化効率の改良やロードバランスの改善を中心に、様々なチューニング・最適化を試みた。

基本プログラムへの非経験的擬ポテンシャルの組み込みについては、アルゴリズムの定式化を行った後、プログラムの改良を行った。その後、結果の信頼性チェックの計算を行いつつプログラムのバグ(誤り)の修正を行った。

【成果】

境界マッチング密度汎関数法の基本プログラムについて、初期段階およびチューニング途中のいくつかの段階について日立製 SR8000 により性能を比較した結果を図 3.1.8 に示す。最終的に、128 プロセッサで単一プロセッサ時の 77 倍の性能向上を達成したが、これは実用のアプリケーションプログラムとして大変良好な値である。

次に非局所擬ポテンシャルの組み込みについては、s および p 軌道のみを含む場合については開発したプログラムの正常な動作を確認することができた。しかし、d 軌道を含む重元素についてはまだ正常動作を確認できておらず、この点は今後の課題である。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

計算プログラムの並列性能については、ベンチマークに用いられる行列計算プログラム等については本研究より高い性能の報告も多くある。しかし、実用的なアプリケーションプログラムでそのような高い性能を達成することは難しく、本研究で得られた並列性能は実用アプリケーションとして大変良好な値である。実際、ハイパフォーマンスコンピューティング分野の国際会議等においても一

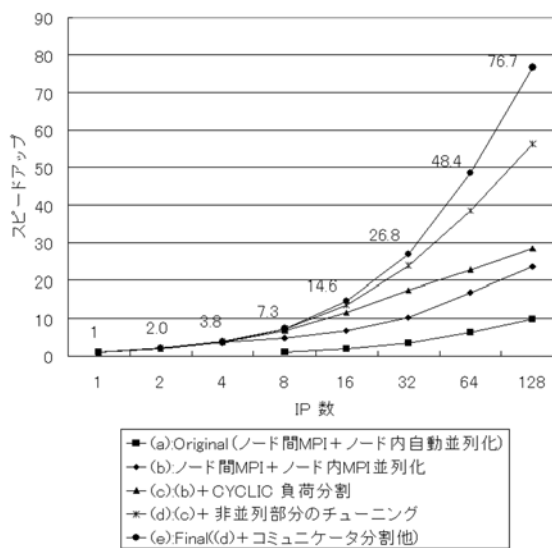


図 3.1.8:チューニングを施した各バージョンの性能比較。1 プロセッサ時を基準にプロセッサ数によるスピードアップを示した。

定の評価を得た。

多数の原子種への対応については、半無限電極とバイアス電圧の影響を考慮した電気特性計算プログラムに非局所ポテンシャルを組み込んだプログラムが現時点ではいくつか出現している。したがって、この点では本研究は後塵を拝している。

(2) 研究成果の今後期待される効果

局所トンネル障壁高さ(LBH)計測については、本研究で開発したシミュレータは今後様々な系のLBHの振舞いの解析に使用できる見込みであり、特にシリコン系を中心に、実験データの解析に有用になるものと期待される。また本研究の中でLBHを簡便に評価する方法を考案したが、この方法はより広範囲の実験系について解析が可能になると期待される。今後様々な角度からこの方法を検証し、また改良していき、広く実験研究者に使用してもらえるようにしていきたい。

一方LBH計測自体は、データの再現性やエネルギー分解能等の点から近年やや下火になっていたが、再び盛り上げようとの機運が最近実験研究者の間で高まっており、関連研究者の意見交換が盛んになっている。本研究の成果のため本研究チームメンバーもこのような意見交換の場に招かれており、今後、この動きを理論解析の面からサポートし、LBH計測研究の発展、ひいては表面ナノ構造の電気特性研究の発展に寄与できる可能性は高い。

次にケルビン力顕微鏡に関しては、まずケルビン力顕微鏡観察が近年一段と盛んになってきていることを特記したい。一方、実際にケルビン力顕微鏡像観察に携わっている研究者からは、「高い分解能の像はとれたが、像の物理的意味がよくわからない」という声も多く聞かれる。このような状況の中で、本研究のシミュレータの意義はますます大きくなっているといえる。今後開発したシミュレータを改良することにより、絶縁体表面や有機分子を吸着した表面等、実験が盛んな系に研究を展開していくことができ、実験データの解析に大いに貢献していくことができるものと期待される。

他方、探針-試料間の電磁氣的相互作用にはマクロな形状の影響も大きいことがケルビン力顕微鏡に関する古典電磁気学的シミュレーションで明らかになってきている。本研究のミクロなシミュレーションに、このようなマクロな形状の影響を取り込んで進めていく研究展開が今後重要と思われる。逆にそのような展開により、ケルビン力顕微鏡シミュレータはますます重要性・有用性を増し、ナノスケール科学技術の発展に貢献するものと期待される。

なお、局所トンネル障壁高さ計測シミュレータ、ケルビン力顕微鏡シミュレータ共、直接的には表面上のナノ構造の電気特性の解明に貢献する成果であるが、このことはナノスケールデバイスの設計・制御を容易にすることにつながるため、新規なデバイスの作製等を通じて広く未来社会に貢献していくことができるものと期待される。

3.2 多端子電気特性計測シミュレータの開発 (東京大学 半無限電極計算グループ)

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に対するシミュレータのプロトタイプを開発するのが本サブテーマの目標である。この目標に向けて、本研究では①ヒュッケル法レ

ベル強結合法、②境界マッチング密度汎関数法、③密度汎関数強結合法という3つの方法論を用いてアプローチした。

(1) 研究実施内容及び成果

① ヒュッケル法を用いたシミュレータの開発

【実施方法】

最も簡単なヒュッケル近似の強結合法により、3個以上の半無限電極と接続した分子の電気特性を計算するプログラムを開発した。アルゴリズムのアイデアは境界マッチング密度汎関数法と同じであり、半無限電極部分と対象ナノ構造領域の波動関数とが境界で正しく接続されるという条件を課して全系の波動関数を求める。

次にこのプログラムを改良し、基板表面平行方向、基板表面内部方向への電子波の広がりを考慮しつつ表面上のナノ構造に対する多探針電気特性計測をシミュレーションする計算プログラムを開発した。そして、以上のプログラムを用い、いくつかの簡単な系について流れる電流等の振舞いを解析した。

【実施内容】

最初に開発したプログラムについては、まずポルフィリン分子に2個の半無限1次元電極を接続した場合について電気伝導計算できることを確認し、また電極接続位置による伝導特性の変化を解析した。次に3個の半無限1次元電極を接続し、3番目の電極の影響等の観点から解析した。

次に、より複雑な形状を扱えるように改良したプログラムについては、表面上のナノ構造に対する多探針電気伝導特性計測のシミュレーションを行った。図 3.2.1 にこの計算に用いたモデルを示す。探針は簡単のため半無限1次元鎖で表しており、表面領域は単純立方格子で31原子×31原子の層を8層重ねたモデルで表した。そして表面平行方向の四方とバルク内部方向に計5本の半無限の棒をこの表面領域に接続している。

【成果】

2本および3本の半無限1次元電極をポルフィリン分子に接続した系については、電極接続位置や入射電子エネルギーによる電流の流れ方の変化を明らかにすることができた。計算結果の例を図 3.2.2 に示す。この図から、分子内に入射電

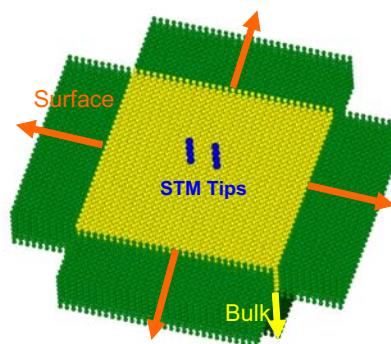


図 3.2.1: 表面伝導の2探針計測のシミュレーションに用いたモデル。緑色の5領域(表面方向×4個とバルク内部方向)および2本の探針は半無限の長さを持つ。

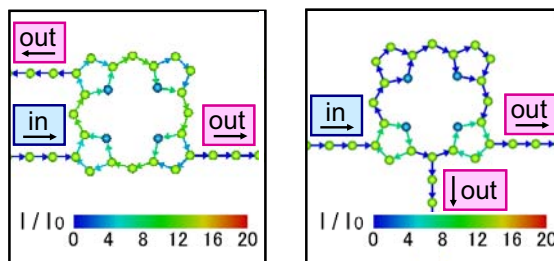


図 3.2.2: ポルフィリン分子に3本の半無限1次元電極を接続した場合の電流の計算結果。“in”から電子を入射させた。矢印の方向は電子流の向きを、色は入射電流を基準としたその強度を示す。黄緑色の球は炭素、青色の球は窒素を示す。

流よりも強い電流が流れている部分が存在することがまずわかるが、この点は既に他グループの理論研究で指摘されていた。興味深い点は、電極接続位置により分子内の電流分布が顕著に異なることである。例えば、図 3.2.2 の左図では分子内の4個のピロール環に流れる電流が同程度であるのに対し、右図では4個のうちの2個で特に強い電流が流れている。解析の結果、この違いは電極接続位置と強く関係していることがわかった。

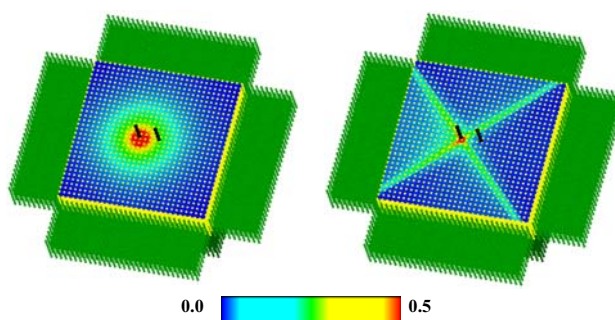


図 3.2.3: 入射電子エネルギーが -1.10eV (左図)および 2.91eV (右図)の場合の表面第1層内の電子密度分布。

次に表面上のナノ構造に対する多探針電気特性計測のシミュレーションでは、入射電子エネルギーによって表面での電子分布に顕著な違いが生じることがわかった。図 3.2.3 に、一方の1次元探針から入射する電子のエネルギーが -1.10eV および $+2.91\text{eV}$ の場合の表面電子分布の様子を示した。 -1.10eV の場合には入射側の探針を中心に等方的に電子が広がっているのに対し、 2.91eV の場合には斜め十字の方向に強く分布しているという顕著な異方性が見られ、また電流分布にもこれに対応した顕著な異方性が見られた。さらに表面垂直方向の電流分布についても、 2.91eV の場合にはほとんど表面第1層にしか流れていないのに対し、 -1.10eV の場合には少し深くまで電流が侵入しているという違いが見られた。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

3本以上の半無限電極を接続した系の電気特性の計算は、単純なY字型については既に報告されていたが、ポルフィリンのような分子に接続した計算は本研究が初めてである。その後、同様の計算が数例報告されている。

表面上のナノ構造に対する多探針計測のシミュレーションは、本研究と同じモデルについて小林(お茶の水女子大)の先行研究がある。しかし、入射エネルギーによる電流分布・電子分布の顕著な異方性の出現については解析されていなかった。一方、この異方性は2次元グリーン関数計算により既に指摘されていたが、探針まできちんと考慮し、また表面垂直方向の電流分布まで含めて解析したのは我々が初めてである。なお小林はその後、より実際の表面に近いモデルに同じ方法論を適用して興味深い成果を挙げており、この点でも本研究に先行しているが、より本格的・実用的なシミュレータを作成するための試行段階という本研究項目の位置づけを考慮すると、その中で上記の成果を挙げることは有意義であったといえる。

② 境界マッチング密度汎関数法による単原子シート伝導特性の解析

【実施方法】

境界マッチング密度汎関数法を用い、従来試みられていた系とは異なる形状の系や、2個を超える半無限電極を接続する可能性について検討を試みた。

【実施内容】

境界マッチング密度汎関数法は、これまで電極-真空-電極系、電極-架橋原子鎖・単分子-電極系の研究に適用されてきた。また類似の方法論についても、これらの他は電極-バルク異種マテリアル-電極系に適用されているのみである。本研究では、ナノパターンング電極を用いた表面上ナノ構造電気特性計測等を念頭に、2つの半無限電極間に薄膜構造を挟んだ系の電気特性のシミュレーションを試みた。具体的にはジェリウム薄膜およびNa単原子シートについて計算を試み、Na単原子シートについて後述する成果を得た。

また、3個以上の電極への拡張についてもいくつかのアイデアを検討した。最終的には計算コスト等の点から実用的でないと判断し、後述の③のアプローチを選択することとした。

【成果】

ジェリウム電極間のNa単原子シートの電気伝導度の計算値は、バイアス電圧0.1V時に単位断面(Na原子1個)あたり $0.87G_0$ (G_0 は量子化コンダクタンス)となった。これはNa単原子鎖の場合の同じ断面積あたりの伝導度 $1.0G_0$ と比較して小さな値である。この理由を考察するため局所状態密度を調べた結果を図3.2.4に示す。単原子鎖・単原子シートの全領域で局所状態密度を積分した結果(図3.2.4(a))において、フェルミ準位での状態密度は単原子鎖の方が大きく、これが単原子鎖の伝導度の方が大きい原因であるが、この他に原子鎖・原子シートの中央部(図3.2.4(c))で次元性の違いを反映した顕著な差が見られることがわかった。

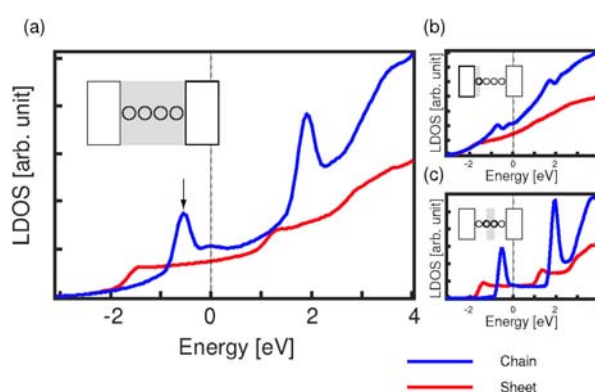


図 3.2.4: 電極間 Na 単原子鎖(青線)および単原子シート(赤色)の局所状態密度。(a)、(b)、(c)はそれぞれ図中の灰色領域内で積分した。

単原子鎖の方が大きく、これが単原子鎖の伝導度の方が大きい原因であるが、この他に原子鎖・原子シートの中央部(図3.2.4(c))で次元性の違いを反映した顕著な差が見られることがわかった。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

拡張ヒュッケル法レベルの強結合法では、本研究より複雑な薄膜構造に対する電気伝導特性の研究が既に報告されている。しかし、密度汎関数法レベルでバイアス電圧も印加してこのような薄膜構造を計算したのは、本研究が初めてである。

③ 密度汎関数強結合法を用いたシミュレータの開発

【実施方法】

上記①、②の研究結果と後述する3.6③での密度汎関数強結合(DFTB)法シミュレータを用いた研究の進展を踏まえ、強結合法の計算速度と密度汎関数法の信頼性をあわせ持つDFTB法を用いて多端子電気伝導特性シミュレータを開発することとした。半無限電極等の考慮には、種々の効果を取り込む拡張が容易なグリーン関数法を用いた。

【実施内容】

まず、バイアス電圧を印加しない場合の電子状態と伝導特性を自己無撞着計算するプログラム

を開発し、これが妥当な結果を与えることをポリアセチレン分子鎖、カーボンナノチューブに対する計算で確認した。さらに、このプログラムで3端子ないし4端子系モデルに対しても計算が可能であることを実証し、4端子抵抗における量子効果について、予備的な解析を行った。

【成果】

ベンゼン分子に3本の半無限炭素原子鎖を接続した系に対する計算結果を図 3.2.5 に示す。図 3.2.2 の方が複雑な分子を扱っているが、DFTB 法レベルで自己無撞着計算をしている点で図 3.2.5 の計算の方が進んだ計算である。この計算等により、本研究で開発した DFTB 法レベルのシミュレータにおいても半無限電極数を問題なく増やせることを実証できた。

これを踏まえ、4端子抵抗の予備的なシミュレーションを行った。モデルとしては無限長の1原子鎖やカーボンナノチューブに2本の電圧プローブ(半無限1原子鎖または半無限カーボンナノチューブ)をあてた系を考え、透過スペクトルからバイアス電圧ゼロの極限での4端子抵抗を評価した。その結果、電圧プローブと試料との結合が強い場合には4端子抵抗値が負の値になる場合があることを見出した。さらに、電圧プローブ間隔による抵抗値の変化から、この結果が量子的な干渉効果によるものであることを明らかにした。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

プローブと試料との間の接触抵抗の影響を除去できるはずの4端子抵抗が、ミクロな系においては接触抵抗の影響を除去しきれない可能性は既にDattaにより理論的に指摘されていたが、あくまで定性的な考察に留まっていた。3端子ないし4端子測定に対応するシミュレーションを原子レベルかつ自己無撞着計算で行った例はこれまで無かった点、および自己無撞着レベルの計算によってDattaの考察を裏付けた点で本研究は意義がある。また実験においては、カーボンナノチューブの4端子抵抗が低温で負の値になるとの測定結果が報告されている。真に定量的な比較のためにはより大きなモデルでの計算とバイアス電圧印加状態での自己無撞着計算とが必要であるが、本研究を進めることにより、この実験結果の物理的意味をより明確にできるものと期待される。

(2)研究成果の今後期待される効果

ヒュッケル法を用いたシミュレータによって明らかにされた分子内電流分布やその電極接続位置・接続数による変化は、単分子デバイスを設計し創製していく上で有用な知見と考えられ、単分子エレクトロニクス研究の進展に貢献するものと期待される。

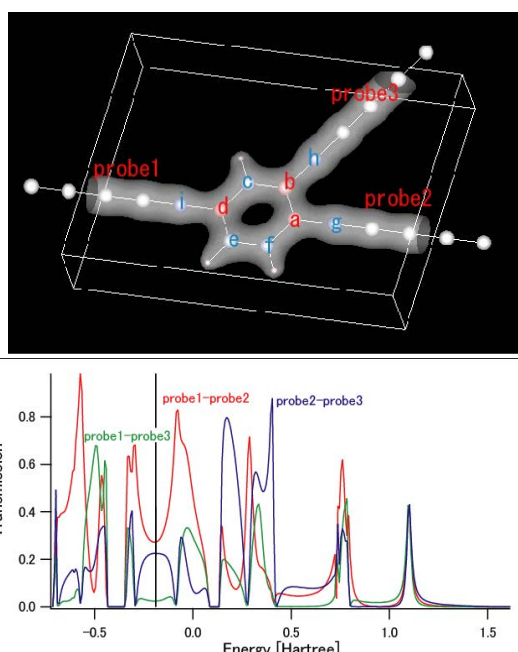


図 3.2.5: ベンゼン分子に3本の半無限炭素原子鎖を接続した系の電荷分布(上図)および透過関数(下図)。

DFTB 法を用いたシミュレータは、多端子電気特性計測の解析に役立つシミュレーションに最も近づいているシミュレータである。今後バイアス電圧印加状態での計算を行う改良が終了すれば、多端子電気特性計測の実験データ解析に大いに役立ち、表面ナノ構造の電気特性の解明への貢献を通じて、ナノエレクトロニクスの科学技術の進歩に大いに貢献するものと期待される。

多端子電気特性計測の実験技術はこの数年で確実に進展してきており、その端子間距離は以前のマイクロメートルオーダーから 10 ナノメートルオーダーにまで縮まってきている。また既に述べたカーボンナノチューブにおける負の 4 端子抵抗の観測に加え、ごく最近、端子間距離を短くした 4 探針測定において、マクロな場合と同様にして探針接触の影響を除去したはずの抵抗値に探針接触による表面状態変化の影響が顕著に残っていると見られる実験データが報告された。これらの実験データが正しいければ、本研究立案時に予想した通り、ミクロな 4 端子測定にはマクロな場合と異なる注意が必要ということになり、本研究で進めている多端子電気特性計測シミュレータの有用性は一層高まるといえる。

3.3 キャパシタンス計測シミュレータの開発(1)(東京大学 半無限電極計算グループ)

本項目では、①物体間のトンネル電流を無視できない場合のキャパシタンスに関するシミュレータの開発と主にそれを用いたナノ構造キャパシタンスの解析、②キャパシタンスに強く関連した現象として非接触 AFM におけるジュール熱散逸の解析、の2点を行った。トンネル電流を無視できる場合等について空間分割・時間依存計算グループが実施した内容は3.5に記す。

(1) 研究実施内容及び成果

①トンネル電流を無視できない場合のナノ構造キャパシタンス解析

【実施方法】

境界マッチング密度汎関数法では、2つの電極間にバイアス電圧 V を印加したことによる誘起電荷 Q を電圧印加前後の電荷分布の差から容易に計算することができる。これより、

$$C = \frac{Q}{V}$$

の関係によってキャパシタンス C を評価することができる。本研究項目では、このようにしてキャパシタンスを評価するシミュレータを開発した。

【実施内容】

開発したシミュレータを用い、まず清浄ジェリウム電極間のキャパシタンスの電極間距離による変化を調べた。次に、より現実的なモデルとしてジェリウム電極表面に原子構造を載せたモデルについて同様の検討を行った。原子構造としては、平坦な表面に対応する原子層構造のほか、ナノスケールの突起構造も検討した。

平坦な電極とナノスケール突起を持つ電極を組み合わせた系については、本研究より粗い方法を用いた計算ではあるが先行研究が存在する。本研究ではこの先行研究と異なる結果を得たので、この差異の原因についても検討した。

【成果】

清浄な対向ジェリウム電極系、およびジェリウム表面にAl原子層を載せた平行平板電極系のキャパシタンスの電極間距離依存性の計算結果を図 3.3.1 に示す。なお、この図では電子が電極表面から染み出していることを考慮して電極間距離を補正している。この図からまずわかることは、電極間距離が長い場合には古典電磁気学から予想されるキャパシタンスとよく一致しているのに対し、近接してくると古典的予測からの明らかなずれが認められる点である。特にごく近距離では、距離の減少と共にキャパシタンスも減少するという、古典的振舞いとは逆の傾向が見える。次に、清浄ジェリウム電極系の場合と表面に原子層を載せた平板電極系の場合とで近距離

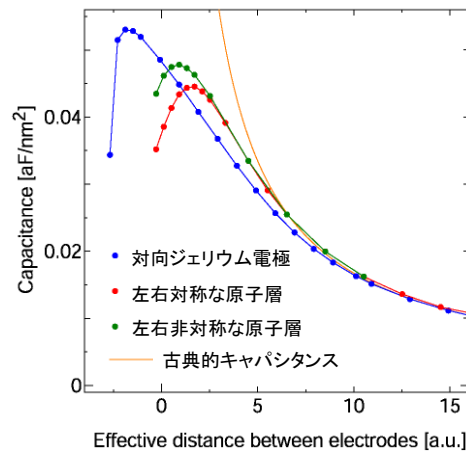


図 3.3.1: 平行平板電極系におけるキャパシタンスの電極間距離依存性 (距離の単位は原子単位)。

では定量的な差が明確に見られることがわかった。さらに原子層を載せた場合については、2つの電極の表面平行方向の相対位置をわずかにずらせた2つのケース(図では「左右対称」「左右非対称」と表示)の間にも定量的な差が生じることがわかった。解析の結果、これらは一方の電極から他方への電荷の染み出しが増え、トンネルが容易になっていることから理解できることがわかった。

次に、STM 探針-試料系のように一方の電極にナノスケールの突起がある場合を Al 突起-Al 表面系および Na 突起-Na 表面系で調べたところ、図 3.1.3 とは異なり、近距離におけるキャパシタンスの減少は見られなかった。ところが、これと類似の系について他グループが信頼性の劣る方法論で計算した既報の研究では、本研究と異なり図 3.1.3 と類似の振舞いが見られている。この違いの原因を探るために非自己無撞着計算を試みたところ、キャパシタンスの電極間距離依存性について他グループの計算と定性的に一致する結果を得た。より詳細な検討が必要ではあるが、この結果から既報の研究の方法論に問題がある可能性が考えられるといえる。

一方、この検討の過程で、通常は大きな違いを生まない2種類のバイアス電圧の定義がごく近距離では大きな違いを生むことがわかった。本研究を含め、半無限電極に接続した非平衡電子状態計算においては、2つの電極間のフェルミ準位の差をバイアス電圧とみなす。しかし、このバイアス電圧を設定した状態で電極間にトンネル電流が流れ

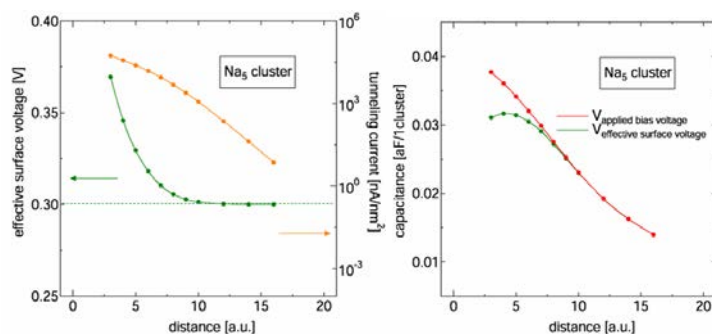


図 3.3.2: Na 突起-表面系における、有効バイアス電圧とトンネル電流の突起-試料表面間距離依存性(左図)および2種類のバイアス電圧定義によるキャパシタンス値の距離依存性(右図)。

ると、この電流のために電極内部での電気的中性条件が満たされなくなる。そこで本研究においては、自己無撞着計算において Lang らにならって電極内部が電氣的に中性となるようにフェルミ準位を調整している。この調整後のバイアス電圧を「有効バイアス電圧」と呼ぶことにすると、図 3.3.2 左図からわかるように、この有効バイアス電圧はトンネル電流の増加と共に設定したバイアス電圧から大きくずれていくことがわかった。また、これまでバイアス電圧の設定値を用いて計算していたキャパシタンスと有効バイアス電圧によって計算し直したものとを比較してみると(図 3.3.2 右図)、有効バイアス電圧を用いた場合には図 3.3.1 と類似の振舞いが見られることがわかった。この違いを指摘したものはこれまでなく、今後の理論計算への大きな注意喚起となるものといえる。現実の系においては電極内での電子の緩和が起こり、バイアス電圧はこのどちらの定義とも直接対応しない。この点を考慮した方法論の構築は、今後の課題といえる。

最後に、2 つの電極の両方に同じ突起構造がある場合を検討してみたところ、図 3.1.3 と同様のキャパシタンスの距離依存性が見られた。これは、平行平板系と突起-平板系との違いから推測した結果とは異なるものである点で興味深い。またこの系の検討の副産物として、突起間距離が離れていくにつれ両極間電流が単調に減少するのではなく、一旦増加した後に減少することが見出された。これは、機械的に制御した接合破断の方法によって AI 系について実験で観測されている振舞いとよく対応する。従来の理論計算ではこの振舞いは原子鎖の湾曲によるものと理解されてきたが、本研究の結果は、湾曲した原子鎖を仮定しなくてもこの振舞いが再現できることを示している。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

メゾスコピック系でのキャパシタンスの理論研究で図 3.3.1 のような振舞いは予測されていた。また原子スケールでも、前述のように先行研究が 1 例あった。さらに、カーボンナノチューブ系についてキャパシタンス計算が報告されている。しかし前述の先行研究は本研究より粗い方法論を用いており、カーボンナノチューブ系の計算は電圧印加まで考慮しているものの真空ギャップを含む系には適用できない(十分な信頼性が得られない)方法論を用いている。以上の点から、いくつかの類似研究はあるものの、本研究は十分な独自性を有しているといえる。さらに、表面形状の違いによる振舞いの変化については、これまで原子レベルでの検討は全くなされていなかった。

以上に加え、バイアス電圧の定義に対する問題提起や AI 原子鎖の伝導度の距離依存性に対する新しい解釈の提案等、副産物といえる成果は、ナノ構造電気伝導特性の理論研究が活発になされている中で新しい知見を与えるものである点で、意義が大きいといえる。

②非接触 AFM におけるジュール熱散逸の解析

【実施方法】

非接触 AFM では、探針を常に振動させ、その共振周波数の変化等から探針-試料間力を検出する。この際に、振動振幅の変化から探針振動エネルギーの散逸量を計測することが可能である。この散逸の起源の一つとして、探針の振動による探針-試料間キャパシタンス変化から生じる変位電流が誘起するジュール熱が挙げられる。本研究項目では、このジュール熱の振舞いを解析した。変位電流 I_D は探針試料間キャパシタンス C を用いて

$$I_D = V \frac{dC(t)}{dt}$$

と表すことができ (V はバイアス電圧)、ジュール熱散逸 W は電極内部 (その部分の実効的な抵抗を R とする) で熱が発生するとして

$$W = R \int [I_D(t)]^2 dt = RV^2 \int \left[\frac{dC(t)}{dt} \right]^2 dt$$

と求めることができる。図 3.1.3 で示した清浄ジェリウム電極系に対するキャパシタンスの計算結果を用い、探針-試料間距離が $z(t) = z_0 + z_1 \sin \omega t$ のように変化すると、上記の式に基づいて変位電流およびジュール熱散逸を評価した。

【実施内容】

上記のようにして評価した変位電流およびジュール熱散逸について、探針-試料間最近接距離、探針振動振幅、探針・試料原子種 (清浄ジェリウムモデルを用いているので、電子密度 (実際には電子密度と一意に対応するウイグナー・ザイツ半径) を変えることに相当) 等のパラメータに対してこれらがどのように依存するかを検討した。

【成果】

計算で得られたジュール熱散逸の振舞いを図 3.3.3 に示す。探針の振動振幅 (z_1) が小さい場合、距離が極端に短い領域でジュール熱が減少するという非古典的振舞いが見られた。また、ジュール熱はウイグナー・ザイツ半径 (すなわち原子種) に依存した。これらの結果は、キャパシタンスに現れる量子効果をそのまま反映したものである。

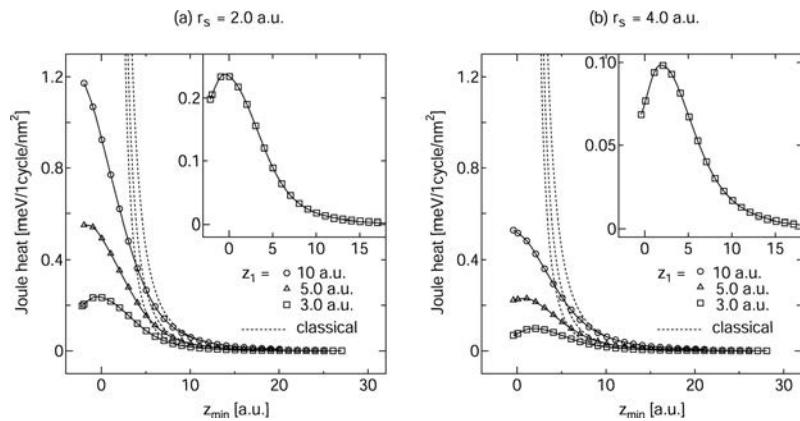


図 3.3.3: ジュール熱の探針-試料間距離依存性。ウイグナー・ザイツ半径 r_s が (a) 2.0 a.u. (Al に対応) および (b) 4.0 a.u. (Na に対応) の場合。

探針と試料が接近していくと通常は両者の相互作用の増加により散逸量が増加するが、新井・富取 (北陸先端大) は、Si(111) 表面上の Ge 島状構造において探針-試料間距離が非常に短い領域で散逸量が逆に急激に減少するという未解明の振舞いを報告している。この実験結果が本研究の契機となったが、上記の計算結果はこの実験の振舞いをある程度再現しているといえる。用いているモデルが実験で扱われた Si/Ge 系よりずっと単純なものであるため定量的な比較等を行うことは難しいが、本研究の結果は、新井・富取の観測した散逸量減少の振舞いがジュール熱散逸に

おける上記の量子効果から説明できる可能性があることを示唆している。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

非接触 AFM におけるエネルギー散逸の問題は、実験・理論とも盛んに研究されている。上記の新井・富取の実験と類似の振舞いの原因としては、探針や試料表面の原子位置の不可逆的な変化等がこれまで提案されている。ジュール熱散逸がこの振舞いの原因として検討されたことはこれまでなく、この点で本研究は新規性を有する。なお、ジュール熱以外の原因は新井・富取の実験では比較的小さいと考えられており、新たな可能性を提案した意義はこの点からも大きい。しかし、本研究ではごく単純なモデルを用いているため、新井・富取の実験で見られる振舞いの主原因を特定するためにはより詳細な検討が必要である。

(2)研究成果の今後期待される効果

トンネル電流を無視できない状況は、ナノスケールデバイスでしばしば出現する。この意味で、キャパシタンスにおける量子効果を明らかにした本研究の成果は、今後のナノスケールデバイスの研究開発に有意義なものといえる。特に、真空ギャップでなくシリコン酸化膜や高誘電率膜を挟んだ系に本研究の成果を展開していくことができれば、キャパシタンスシミュレーションの有用性は一段と高くなると期待される。本研究グループも含め、この方向の研究が今後進むものと考えられる。

非接触 AFM については、エネルギー散逸についても原子分解能の走査像が得られているが、その物理的意味は十分理解されているとはいえない。本研究項目ではジュール熱散逸のみに注目して解析を行ったが、原子位置の不可逆な変化等、他の原因による散逸も全て含んだ理論解析が今後必要である。また、そのようなシミュレータを開発できれば、エネルギー散逸像からも表面ナノ構造に関する有用な情報を引き出せる可能性がある。これらの方向への今後の研究展開が見込まれる。ジュール熱散逸における量子効果を指摘した本研究は、このような今後の展開の中でも重要な位置を占める可能性がある。

3. 4 計測に影響を及ぼす局所物理現象の解析手法の確立(1)(東京大学 半無限電極計算グループ)

3. 1および3. 2に記したサブテーマと強く関連する電気特性計測において、①計測中の構造変化の影響および②溶液中計測における周辺溶媒の影響は、実験との比較の上で大変重要である。そこで、本項目でこの点について解析を行った。なお、計測に影響を及ぼす局所物理現象について空間分割・時間依存計算グループが実施した内容については3. 6に記す。

(1)研究実施内容及び成果

①計測中の構造変化の電気伝導への影響

【実施方法】

本研究項目では、計測時のバイアス電圧印加による構造変化と計測時の電極間距離変化等による構造変化の 2 点を検討した。計測時のバイアス電圧印加による構造変化を調べるためには、境界マッチング密度汎関数法プログラムにおいて原子に働く力を計算するサブルーチンを開発し

た。力の表式としては、密度汎関数法計算では標準的なヘルマン・フラインマン力を用いた。

計測時の電極間距離変化等による構造変化の影響については、より複雑な構造を扱うために別の計算プログラムを用いた。具体的には電極-ナノ構造-電極をクラスターモデルで表し、汎用の量子化学計算プログラムである Gaussian を用いて安定構造・準安定構造のエネルギーを求めた上で、安定・準安定状態間は熱活性過程で容易に遷移すると仮定して各構造の出現確率を求め、これに応じた重み付けをしてコンダクタンスの期待値を評価した。なお、コンダクタンス計算には本グループメンバーが開発していたガウシアン・ブロードニング法を用いたが、これは Gaussian による計算結果を利用して伝導計算を行う点で上記のプロセスと整合性が良いからである。この方法では、半無限電極はエネルギー準位に幅を持たせる形で近似的に考慮し、ゼロバイアス電圧極限でのコンダクタンスを計算する。

さらに、様々な系について構造緩和の影響を調べる観点から、金属-固体電解質-金属接合系について構造緩和前後の電気伝導度変化およびバイアス電圧による構造変化を調べた。この計算には既述の非平衡グリーン関数法計算プログラム Atomistix Tool Kit (ATK) を用いた。

【実施内容】

計測時のバイアス電圧印加による構造変化については、ジェリウム表面に吸着した単原子等の試験的なモデルでプログラムの妥当性を確認した後、ジェリウム電極間を架橋する Na₃ 原子鎖の構造のバイアス電圧による変化とそれに伴う電気特性の変化を解析した。

次に計測時の電極間距離変化等による構造変化の影響については、活発に研究されている金電極間のベンゼンジチオール分子架橋について検討した。電極間距離が一定の場合の分子の吸着位置の熱揺らぎとコンダクタンスとの関係、および電極間距離を引き伸ばしていく過程での構造変化とコンダクタンスとの関係を検討した。

金属-固体電解質-金属接合系としては銀-硫化銀-銀を考えた。この系の界面構造の詳細は不明だが、実験で知られている銀-硫化銀の方位関係をもとにモデルを構築した。

【成果】

図 3.4.1 にジェリウム電極間 Na 原子鎖中の各原子のバイアス電圧による変位を示す。バイアス電圧ゼロの場合には対称的な構造が安定であったのに対し、バイアス電圧を加えると非対称な構造になることがわかった。さらに、各原子の変位は約 1V までは印加電圧に比例したが、これを超える電圧に対しては非線形な振舞いを示すことを見出した。また、構造緩和による電流-電圧特性の変化を調べてみると、約 1V 以上のバイアス電圧では、構造緩和による電流値の低下が見られることがわかった。

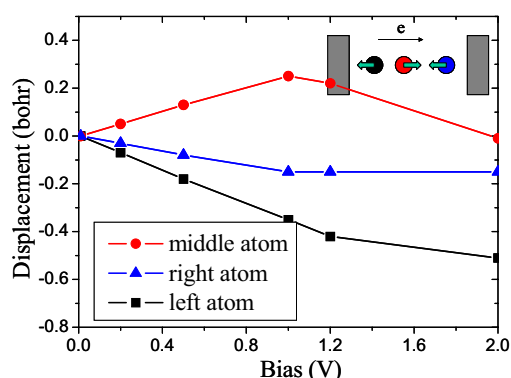


図 3.4.1: Na 原子鎖中の各原子のバイアス電圧印加による変位。

次に金電極間のベンゼンジチオール分子架橋については、分子が両表面に対して垂直な姿勢を示す表面間距離(これは分子架橋が切断される直前で実現する)ではどちらの表面でもfcc-hollowと呼ばれる位置に分子が吸着している構造が最安定であることを明らかにした。さらに、この最安定構造と他の準安定構造との間の熱揺らぎを考慮してコンダクタンス期待値を計算した結果、最安定以外の構造の寄与は小さいことを明らかにした。

また電極間距離を引き伸ばしていく際のコンダクタンス変化については、分子が常に両電極の中央に位置する配置(配置 a)、分子が一方の電極との結合を常に保ちつつ電極表面に対し垂直である配置(配置 b)、分子が一方の電極と強く結合して分子軸が傾いている配置(配置 c)の3種類の配置を考慮し、配置間の遷移の可能性を考慮してコンダクタンス期待値の引き伸ばし距離に対する依存性を求めた。その結果を図 3.4.2 に示す。既報の研究では配置 a または配置 b が仮定され、実験と全く合わないコンダクタンスのピークが出現していたのに対し、配置間の遷移の可能性を考慮して期待値を求めた結果(太線)は、実験で得られるトレースカーブを良好に再現した。

銀-硫化銀界面については、印加電圧 0V において銀-硫化銀-銀の構造最適化を行った結果、硫化銀内部に銀原子架橋構造が現れ、その結果金属的性質が発現するという結果を得た。またバイアス電圧印加の構造緩和への影響については、0.2V 印加時の原子変位が最大で 0.02 Å となり、図 3.4.1 に比べて影響は少なかった。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

本研究の Na 原子鎖の解析は、バイアス電圧による構造緩和の解析として初期のものである。当時は2、3の先行研究しかなく、また1V を境にした振舞いの変化等は新しい知見であった。

次に金電極間のベンゼンジチオール分子の電気特性については、多くの計算例がある。しかし、吸着した分子が表面上を動きやすいという報告があるにもかかわらず、吸着位置によるコンダクタンス変化を計算した例はごく少なかった。特に、異なる配置の間の熱揺らぎの可能性を考慮してコンダクタンス期待値を計算したのは本研究が初めてである。本研究と同時期に、Guo (MacGill) のグループが配置によるコンダクタンスの変化を詳細に検討した研究を発表したが、彼らは形成エネルギーによる出現頻度の違いは考慮していなかった。また、引き伸ばし過程におけるコンダクタンス変化の問題についても、既報の研究2報では実験と全く異なる振舞いが見られていたのに対し、構造遷移の可能性を考慮して実験を再現する結果をはじめて得た点で、本研究の意義は大きい。

銀-硫化銀-銀系については、金属-固体電解質接合系に対してバイアス電圧を印加した電気伝導計算および構造緩和計算をしたのは本研究が初め

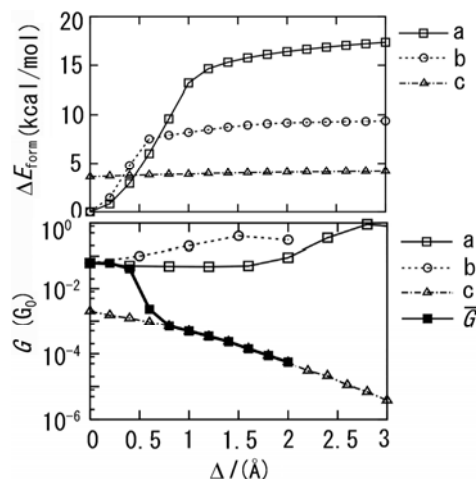


図 3.4.2: 電極間の引き伸ばし距離に対する形成エネルギー (ΔE_{form}) とコンダクタンスの変化。a, b, c は分子配置を表し、遷移を考慮したコンダクタンス期待値は太線で示した。

てという点で意義がある。

②溶液中計測における周辺溶媒の影響

【実施方法】

電極間ナノ構造の電気伝導計測において、溶液中の計測が急速に進展したにもかかわらず、理論計算はすべて真空中のモデルを用いていた。そこで計測への溶媒水分子の影響を調べることにした。有限温度での溶媒構造等を見るためには、Car-Parrinello 第一原理分子動力学計算を用いた。この計算には CPMD というソフトウェアを用いた。また、伝導特性への構造変化の影響を調べるためには、CPMD によって得られた各時間ステップでの構造について非平衡グリーン関数法計算によってコンダクタンスを見積もった。この計算には ATK を用いた。

【実施内容】

系としては金電極に架橋したベンゼンジチオール分子を再び取り上げた。水分子を構造緩和させて 300K で計約 1.2 ps の第一原理分子動力学計算を行った後、ランダムに選んだ時間ステップにおける構造に対し 0V でのコンダクタンスを計算した。コンダクタンスの平均値を求めると共に、コンダクタンスヒストグラムも解析した。

【成果】

金電極とベンゼンジチオール分子の位置を固定し、水分子の配置のみ時間変化させて計算を行った結果を図 3.4.3 に示す。コンダクタンスの平均値は $0.190G_0$ となり、水のない系におけるコンダクタンス $0.201G_0$ と明らかに異なることが示された。なお、金電極のみ固定してベンゼンジチオール分子は構造緩和した計算においても、上記と同様、水分子のない場合に比べて 10%程度コンダクタンスの平均値が低くなることがわかった。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

溶媒分子が電気伝導に及ぼす影響をきちんと考慮した計算は本研究が初めてであり、類似研究はまだ無い。実験では溶液中の計測が多数報告されているという点からも、本研究の意義は大きいといえる。

(2)研究成果の今後期待される効果

バイアス電圧印加による構造変化については、本研究は世界的な流れの中で比較的早い時期に取り組み、有用な知見を得ることができた。この影響については、計算コストの点から現在でも考慮されない解析が多い。しかし、ナノ構造電気伝導計算においては早晩この影響を考慮するのが標準的な解析となるであろう。

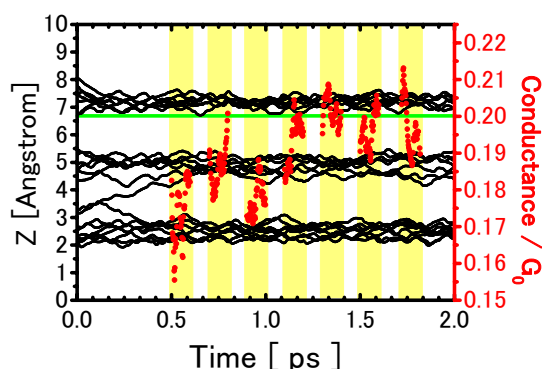


図 3.4.3: 水分子中の酸素原子の z 座標 (黒線: z 方向は電極表面に垂直な方向) およびコンダクタンス(赤線)の時間変化。

構造揺らぎの影響は、本研究で示したように場合によっては大変顕著である。今後、より多様なナノ構造がナノ物性計測やナノスケールデバイスの研究対象となるにつれ、この影響を無視できないケースは増えていくものと思われる。それと共に本研究で得られた知見や開発した方法論も重要性を増し、研究が発展していくものと期待される。本研究の解析では構造揺らぎの時間スケールが計測に要する時間に比べてずっと短いことを仮定しているが、今後の発展の方向として、揺らぎの時間スケールもシミュレーションから見積もった上で計測量への影響の現れ方を解析する方法論を開発していくことが重要である。さらに、本研究ではバイアス電圧の影響と構造揺らぎの影響とを別々に取り扱ったが、両方を統合して解析することも重要な課題である。

溶媒の影響を考慮することも、今後の解析においてますます重要になってくると考えられる。燃料電池のような電気化学的な系、および生体分子系に対するナノ物性計測等が今後の重要な研究対象として挙げられるからである。本研究の成果は、そのような系においても解析の基盤となることが期待される。しかし、本研究では溶媒効果を考える際にバイアス電圧印加効果は考慮していなかった。バイアス電圧印加効果も同時に考慮していくことは、種々の実験との比較検討においてきわめて重要である。今後このようなシミュレーション方法論を開発していくことが強く望まれる。

3.5 キャパシタンス計測シミュレータの開発(2) (東京理科大学 空間分割・時間依存計算グループ)

本項目では、①物体間のトンネル電流を無視できる場合のキャパシタンスに関するシミュレータの開発と主にそれを用いたナノ構造キャパシタンスの解析、および②本研究全体として研究期間終了時に公開を予定しているユーザーインターフェイスとマニュアルを整備したシミュレータの先駆けとなるシミュレータ Quantum Capacitance Simulator (QCAPS) の開発を行った。

(1) 研究実施内容及び成果

①トンネル電流を無視できる場合のナノ構造キャパシタンスの計算と量子効果の解析

【実施方法】

本研究グループで開発した空間分割密度汎関数 (PRDF) 法プログラムを利用して電極間トンネル電流が無視できる場合のキャパシタンスを評価した。PRDF 法では、分割した各空間内の総電荷量を指定できる。計算途中でこの電荷量は変化しない一方、他の空間からのクーロンポテンシャルの影響は考慮しつつ密度汎関数法レベルの電子状態計算を行う。この場合、キャパシタンス C は、2つの空間内をいずれも中性 (すなわち総電荷量ゼロ) にした状態と一方の空間から他方へ電子 1 個だけ移動させた状態とのエネルギー差から、次の式を用いて計算することができる。

$$C = \frac{e^2}{2\{E_{\text{charge}} - E_{\text{neutral}}\}}$$

本研究項目では、このようにしてキャパシタンスを評価するシミュレータ Quantum Capacitance Simulator (QCAPS) を開発した。

一方、キャパシタンスシミュレータを開発するために、まず種々のナノスケール電極のキャパシタ

ンス計算とその特性に関する解析を行っておくことが必要となる。この目的のために、上記 QCAPS を用いた解析の他、物体間距離が無限大の場合に対応する孤立キャパシタンスの解析も行った。孤立キャパシタンスは、系が中性、正、負それぞれに帯電した場合の基底状態の全エネルギーから次式を用いて計算することができる。

$$C(N) = \frac{e^2}{E(N+1) - 2E(N) + E(N-1)}$$

ここで、 N は系の中性状態の全電子数である。孤立キャパシタンスは一般の密度汎関数法計算プログラムを用いても計算することができるが、QCAPS にもこれを計算する機能を組み込んでいる。

【実施内容】

カーボンナノチューブ、フラーレン、炭素クラスター、金属球の対向電極のキャパシタンスの解析は本研究開始前に既にある程度行なっていたため、本研究の中では若干の追加計算の他、孤立キャパシタンスが示す量子効果に注目し解析を行なった。具体的な系としては、1次元炭素鎖 C_n ($n=2-10$)、炭素クラスターを内包するフラーレン C_{60} 等の孤立キャパシタンスを計算したほか、金属球(球形ジェリウム模型)の電子数密度と孤立キャパシタンスの関係を解析した。

【成果】

キャパシタンスシミュレータを開発するために、種々のナノスケール電極のキャパシタンス計算とその特性に関する解析が必要となる。カーボンナノチューブ、フラーレン、炭素クラスター、金属球の対向電極のキャパシタンスの解析は本プロジェクト開始前に既に行なっており、本プロジェクトでは孤立キャパシタンスが示す量子効果に注目し解析を行なったので、その主要結果を報告する。まず、1次元炭素鎖 C_n ($n=2-10$)の孤立キャパシタンスの値を図 3.5.1 に示す。炭素原子数 n が増加するにつれ孤立キャパシタンスの値はジグザグ状に増加してゆく。孤立キャパシタンスの値は、中性状態における最高占有軌道(HOMO)と最低非占有軌道(LUMO)間のエネルギーギャップ(量子的起源)と静電エネルギー(古典的起源)の和として近似的に表現される。図に見られるジグザグ構造はまさに量子効果に由来するものであ

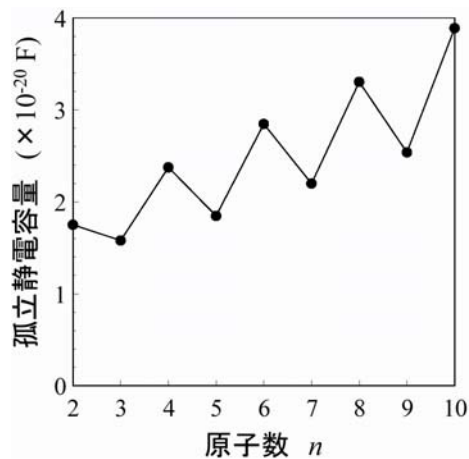


図 3.5.1 : 1次元炭素鎖 C_n ($n=2-10$)の孤立キャパシタンスと炭素原子数 n の関係。

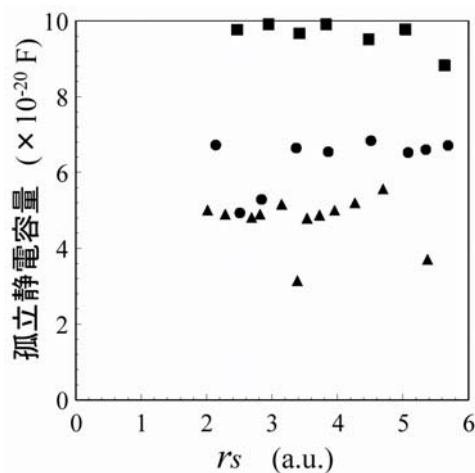


図 3.5.2 : 金属球(球形ジェリウム模型)の孤立キャパシタンスと電子数密度の関係。 r_s (a.u.)はウィグナー・ザイツ半径。▲、●、■は直径が 0.72nm、1.03nm、1.62nm のそれぞれの球形ジェリウムの孤立キャパシタンスの値。

る。同様な現象は、炭素クラスターを内包するフラーレン C_{60} の孤立キャパシタンスにも現れた。 C_{60} 内部の原子構造が変わると電子状態も影響を受け、孤立キャパシタンスの値が大きく変動している。このようにナノ構造の孤立キャパシタンスを評価することで内部構造を知るための手掛かりを提供できることがわかった。

次に、金属球(球形ジェリウム模型)の電子数密度と孤立キャパシタンスの関係を図 3.5.2 に示す。ここでわかることは、孤立キャパシタンスは、金属球が大きくなると電子数密度(電子数密度 $\propto r_s^{-3}$) にあまり依らないが、球が小さくなるにつれ変動していることである。これもナノ構造の孤立キャパシタンスが示す量子効果である。孤立キャパシタンスの量子効果は、例えばナノスケール量子ドット(電極)の計測で検出されることが期待される。

このように、本グループが開発してきたプログラムによってナノスケール構造のキャパシタンスの定量的評価と量子効果の物理解釈が可能であることを確認した。また、ナノスケールではキャパシタンスはもはや既知のパラメータではなくマイクロな原子・電子構造を忠実に反映する重要な物理量であることを明らかにした本研究項目の成果は、国際会議での招待講演2件や日本物理学会誌の解説記事の依頼を受けるなど、注目を集めている。

②キャパシタンスシミュレータ QCAPS の開発

【実施方法】

上記①で有用性が確認されたシミュレータを整備し、本研究の他の研究項目に先駆けてグラフィカルユーザーインターフェイス(G-CAP)を整備した。最終段階では、トンネル電流効果がある場合に対するシミュレータについても同じグラフィカルユーザーインターフェイス(G-CAP)を整備し、実験条件に対し相補的な2つの方法論を基礎にした統合型シミュレータの開発を進める。

【実施内容】

QCAPSの開発においては、まず上記①のキャパシタンス計算と解析を通じてQCAPSプログラムのチューニングを行い、他にマニュアルの整備、入出力用三次元グラフィックスとGUI(G-CAP)作成を行った。統合型シミュレータについては、本報告書執筆時点では開発中であるが、研究期間終了までに完成することを目指して進めている。なお、G-CAP はみずほ情報総研(株)科学技術部に依頼して作成した。

【成果】

本研究の他のシミュレータ整備の良い手本となる、使いやすいソフトウェアを開発することができた。

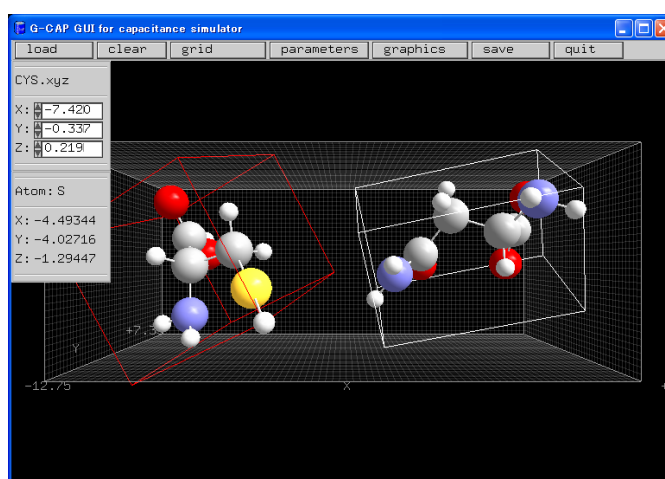


図 3.5.3:G-CAP での分子の空間配置の調整画面。2 分子対向電極のキャパシタンスを計算するための入力データを、この GUI を用いて容易に作成できる。

QCAPS のマニュアルは、(i)本シミュレータが基礎とする PRDF 法の概要、(ii)すぐに計算実行するためのクイックマニュアル、(iii)プログラムの流れ・入出力データの詳細、(iv)ユーティリティ・外部ライブラリ・可視化ソフトの説明からなっている。この GUI(G-CAP)の画面構成は、画面上部にメニューGUI ボタンが並び、対応して設定パネルが開閉し、画面中央部に対応する系が三次元グラフィックス表示されるというものである(図 3.5.3 参照)。G-CAP は、(i)シミュレーション対象分子の三次元グラフィックスによる配置、(ii)各種パラメータの GUI による調整、(iii)入力ファイルの生成、(iv)シミュレーション結果の場の三次元グラフィックスによる可視化、の各ステップからなる。各ステップでの三次元グラフィックスが操作を容易にしている。

経験の浅い学生に試用してもらったが、QCAPS のマニュアル本体を読まなくても基本計算は実行できるという意味でユーザーフレンドリーな GUI になっていることが確認できた。ただし、出力結果の物理的解釈のためには、マニュアル、さらにはマニュアルにある参考文献を読む必要はある。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

①と②の項目について、まとめてここで述べる。

電気伝導現象の研究が実験・理論ともに世界的に活発であるのとは対照的に、キャパシタンスに関係した研究は少ない。メソスコピック系におけるキャパシタンスの量子効果の基礎研究や原子クラスター電極の量子キャパシタンスの数値解析はあるものの、本研究のような総括的なキャパシタンス研究は無い。計算技法の点でも、実験条件に対応させ独自に開発した二つの異なる第一原理計算手法に立脚したキャパシタンスシミュレータ開発は、我々の知る限り皆無である。

(2) 研究成果の今後期待される効果

本研究によって、キャパシタンスはナノスケールではもはや既知のパラメータではなくマイクロな原子・電子構造を忠実に反映する重要な物理量であることが明らかとなった。さらに、開発したシミュレータを使ってナノ構造のキャパシタンスを高い精度で決定することが可能になった。ナノ構造のキャパシタンスを手軽に計算できるプログラムはほとんどないため、特にトンネル電流が無視できる領域で量子効果を取り込んでシミュレーションする QCAPS は、今後多くの研究者に使用される有用なツールとなり、ナノエレクトロニクス応用に向けた物質設計とその電気伝導特性の予測に貢献できると考える。また、開発したシミュレータは丁寧で解かりやすいマニュアルとユーザーにとって操作性のよい GUI を装備しているため、専門外の方にも使って頂けると期待している。

ナノ構造のキャパシタンスシミュレーションの今後の展開としては、まずゲート電極効果とクーロンブロック効果解析できるようなキャパシタンスシミュレータの開発が考えられる。既に本研究の中でも、これらの効果を解析できるように現 PRDF プログラム(QCAPS の骨格アルゴリズム)を改良する取り組みを始めているが、クーロン相互作用 U (多電子効果)を平均場理論の一種である密度汎関数法に取り込むことはやはり容易ではなく、本報告書執筆時点ではまだ実行できていない。今後は多電子効果を近似的に取り込む一つの方法である LDA+ U 法を PRDF 法に組み込む等によりこれを達成していきたい。これが成功すれば、ナノ架橋構造が電極と弱く接合している場合の電気特性を解析するための有用なツールになると期待される。

また、今後の展開としては、有限周波数におけるキャパシタンスの解析も実際のデバイスとの対応の点から重要である。この点を念頭に、今回開発したシミュレータ QCAPS の骨格ルーチン PRDF には、すでに時間依存密度汎関数(TDDFT)法ルーチンも組み込まれており、実際に本プロジェクト内で TDDFT 法を使ってナノ構造の光吸収スペクトルの解析を行なっている。これらの成果を基に、有限周波数のキャパシタンスの解析へと研究を展開していくと共に、ナノ構造の光学特性の解析へも研究を展開していきたいと考えている。

3.6 計測に影響を及ぼす局所物理現象の解析手法の確立(2)(東京理科大学 空間分割・時間依存計算グループ)

計測に影響を及ぼす局所物理現象には様々なものが考えられる。これを反映して本項目では以下の 6 つの局所物理現象を取り上げ、解析を行った:①ナノスケール熱伝導、②局所発熱とその電気伝導への影響、③ゲート電圧等の電気伝導への影響、④吸着原子が電流から受ける力、⑤ナノ構造における電界放射と原子蒸発、⑥光吸収スペクトルに現れるナノ構造電子状態。

(1) 研究実施内容及び成果

①ナノスケール熱伝導

【実施方法】

ナノスケール物質の熱伝導は固体物理の分野において新しい研究領域であり、確立された解析手法が存在せず、基礎理論の構築から行う必要があった。本研究では、ナノスケール物質の原子振動構造を正確に取り入れた熱伝導理論(非平衡グリーン関数法、非平衡分子動力学法、フォノン波束散乱法)を構築し、それらに立脚したプログラムを開発した。

非平衡グリーン関数法は、近年ナノスケール電気伝導計算に急速に用いられるようになってきた手法である。本研究では、電子と統計性の異なるフォノンについても(統計性の違いによる若干の違いを正しく考慮すれば)同様にこの方法を用いることができることを確認し、解析に使用した。

非平衡分子動力学法では、ナノ構造体に温度一定に保たれた温度制御層(熱浴)を接続し、ナノ構造体中に熱流を発生させた状況の下で分子動力学法計算を行う。温度制御法としてはランジュバン法と能勢・フーバー法を採用し、状況に応じていずれかをユーザーが選択できるプログラムを開発した。またフォノン波束散乱法は、熱波束をナノ構造体に打ち込み、その時間発展を追跡することによって、熱の散乱機構と熱伝導特性を解析する手法である。

【実施内容】

ナノスケール物質の熱伝導現象は、低温(量子)領域と高温(古典)領域とで本質的に異なる基本法則に従う。本研究項目では、(i)量子領域を扱うために非平衡グリーン関数法、(ii)古典領域を扱うために非平衡分子動力学法の方法論・計算プログラム開発を行った。その上でこれらの方法の興味ある応用例として、ダイヤモンドに匹敵する高い熱伝導率を有するカーボンナノチューブ(CNT)の熱伝導の解析を行った。

上記 2 つの手法はいずれも定常熱流を解析するための手法であるのに対し、ナノ構造体に打ち

込んだ熱波束の時間発展を追跡することによって熱の散乱機構と熱伝導特性を解析する「フォノン波束散乱法」とそのプログラム開発も行い、これを応用した CNT の解析も行った。この方法は上述の2つの方法で得られた結果を物理的に解釈する際に非常に有効なシミュレーション法である。

【成果】

本研究項目の成果は、国際・国内会議での招待講演6件のほかに日本物理学会誌や専門誌「固体物理」の解説記事や Springer 出版から解説書(2007年12月出版予定)の依頼を受けるなど、国際的にも大変注目を集めている。また、本研究項目で開発された手法は現在、ナノスケール熱伝導を解析するための標準的な手法として認知されつつある。以下に、各手法を用いて得られた成果についてまとめる。

(i)量子領域-非平衡グリーン関数(NEGF)法

NEGF法の最も基本的な応用例として、不純物や構造欠陥などを含まない純粋なCNTの低温熱伝導の解析を行った。その結果、数十ケルビン以下の低温においてCNTの1次元性を反映して熱伝導度は温度に線形に振る舞い、その比例係数がCNTの構造に依存しない普遍的な値に量子化されること(熱伝導度の量子化)を見出した。この発見の翌年(2005年)に、マサチューセッツ工科大学の実験グループによって、CNTの熱伝導の量子化現象が実験的に立証された。また、CNTはその構造によって金属的または半導体的な電気伝導性を示すが、室温における熱伝導に関しては、金属ナノチューブにおいてさえも伝導電子は熱伝導へ寄与せず、フォノンによって熱流が運ばれることを理論的に示した。この理論的予測は、スタンフォード大学の実験グループの実験結果を始めとする多くの実験事実と整合しており、CNT熱伝導の基本的事実として現在広く受け入れられている。

さらに実用的な応用例として、欠陥を含むCNTの低温熱伝導の解析を行った。大変重要な結果として、数十ケルビンの低温領域では、原子空孔欠陥が混入されている場合でさえも熱伝導度が量子化されることが明らかとなった。これは熱流の担い手であるフォノンの波長が欠陥サイズよりも十分に長いときに、熱流が欠陥によって散乱されないためである。

一方、温度が上昇すると短波長のフォノンが励起され、それらが欠陥により散乱され熱伝導度が減少することが、NEGFシミュレーションによって確認された。この熱伝導減少のメカニズムを明らかにするために、非平衡フォノン状態の詳細な解析を行った。その結果、原子空孔欠陥周りに局在したフォノン状態(図3.6.1)に入射フォノンが後方共鳴散乱されることが熱伝導減少の理由であることが明らかとなった。

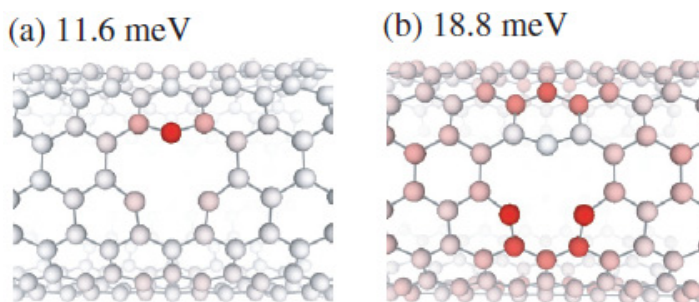


図 3.6.1 : カーボンナノチューブ中の原子空孔欠陥まわりの局所温度分布。フォノンエネルギーが (a)11.6meV の場合、(b)18.8meV の場合。

これらの事実を視覚的に理解するために、フォノン波束散乱法によるシミュレーションを行った。図 3.6.2 に(a)長波長領域と(b)共鳴後方散乱領域での原子空孔欠陥によるフォノン波束散乱の様子を示す。このフォノン波束散乱法から得られる透過関数は、NEGF 法による結果と大変良い一致を示す。

以上のように、NEGF 法とフォノン波束散乱法はナノ熱伝導解析において互いに相補的で強力なツールである。

(ii)古典領域—非平衡分子動力学法

開発した非平衡分子動力学法に基づく熱伝導プログラムの応用例として、原子空孔欠陥を含むカーボンナノチューブの熱伝導率の計算を行った。図 3.6.3 にカーボンナノチューブ(長さ 10.8nm)の室温における熱伝導率の原子空孔欠陥濃度依存性を示す。温度制御法としてランジュバン法を用いたが、能勢・フーバー法を用いた場合と本質的な違いは見られなかった。図 3.6.3 から分かるように、CNT の熱伝導率は欠陥濃度に予想以上に強く依存し、原子空孔欠陥が僅か 1%混入されるだけで熱伝導率が 50%近く減少することが明らかとなった。現在、多くの実験において CNT の熱伝導率の測定が行われているが、理想値(欠陥を含まない CNT の熱伝導率の理論値)よりもかなり小さい値が得られている。本研究は、この原因の一つが微量な欠陥によるフォノン散乱であることを示唆している。したがって、CNT 本来の高い熱伝導率を引き出すためには、純度の高いナノチューブを合成する必要があるということが本研究から示唆される。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

ナノスケール物質の熱伝導に関する研究は始まったばかりであり、特に、量子効果が顕著に現れる低温量子領域の研究者人口は世界的に見ても極めて少ない。我々が開発した方法と類似の方法を用いて研究を行っているグループは、フランスの Mingo グループとシンガポールの Wang グループのみである。このことから分かるように、我々の研究成果は世界的に見ても大変独創的で

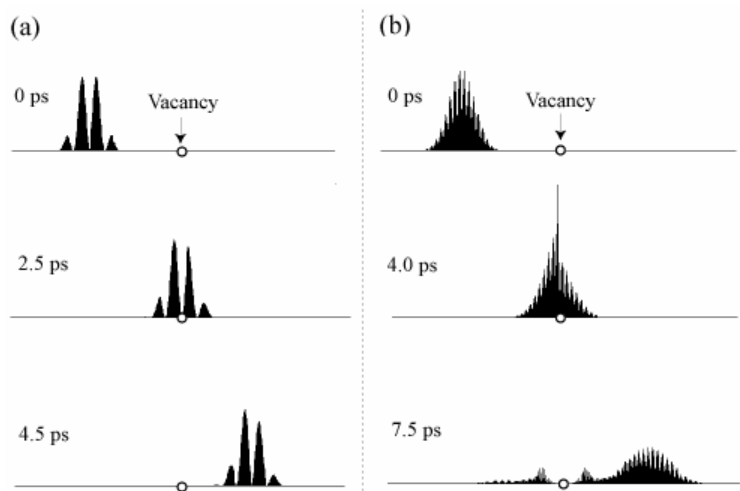


図 3.6.2 : フォノン波束散乱の様子。

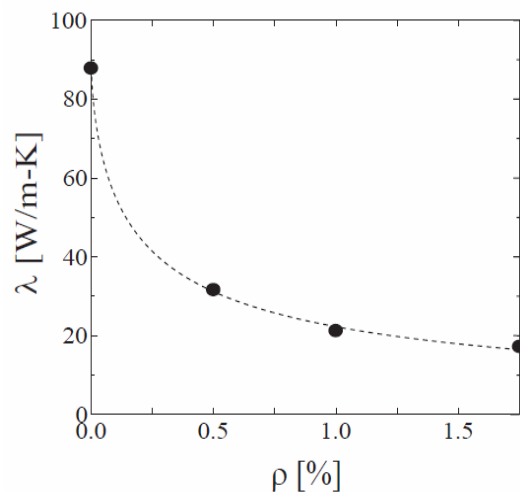


図 3.6.3 : (8,0)カーボンナノチューブの熱伝導率の原子空孔欠陥濃度依存性。

ある。中でも、カーボンナノチューブに関する熱伝導研究に関しては世界を先導している。

②局所発熱とその電気伝導への影響

【実施方法】

分子デバイスの最も基本的な素子である単一分子架橋(1個の分子を電極間に挟んだ系)に電流を流した際に発生するジュール熱の影響を解析するために、強結合法レベルの非平衡グリーン関数法計算プログラムを新たに開発した。この解析ではフォノンによる電子の非弾性散乱を考慮する必要があるが、電子-フォノン

相互作用の結合定数等、必要な情報は強結合法レベルの分子動力学法計算で求めた。

【実施内容】

非平衡グリーン関数(NEGF)法に基づく電気伝導プログラムを開発し、電子-分子振動相互作用の効果を NEDF 法に取り込むのに必要な分子動力学計算と NEGF 法計算とを行って、金電極間フラーレン分子架橋におけるフォノンの電流への影響および局所的ジュール発熱の解析を行った。なお、金電極部分は1次元鎖でモデル化した。

【成果】

本研究項目で開発したプログラムを用い、最小フラーレン C_{20} を架橋した金の二電極間を流れる電流を調べた。さらに電流と分子振動の相互作用を定量的に評価し、振動モードによりエネルギー散逸に大きく寄与するものとそうでないものがあることを見出した(Physical Review Letters 誌に掲載)。図 3.6.4 に分子振動による電力消費量と、その全電力消費量に対する割合を示す。電力消費量はバイアス電圧 100mV 未満の範囲でおおむね nW のオーダーであり、全電力消費量の3%未満であることがわかる。したがって、この範囲では振動による分子架橋の局所的発熱・温度上昇はあまり深刻ではなく、発熱は大部分電極内部で生じるといえる。また、 C_{20} の分子振動が励起される特徴的な電圧で微分電気伝導度が増大することを見出した。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

上記の研究成果は、ナノスケール電気伝導におけるフォノン非弾性散乱効果の研究が世界的に活発になり始める時期にタイムリーに発表することができたため、注目を集め、高い評価を得た。振動モードにより電流への影響が異なることを見出した点、その物理的原因を解明した点、局所発熱の評価した点等でユニークといえる。

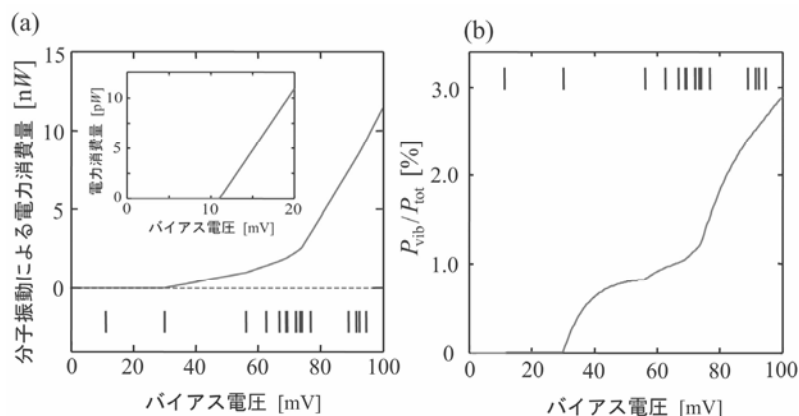


図 3.6.4 : (a) C_{20} 分子振動による電力消費量、(b) 全電力消費量 P_{tot} に対する分子振動による電力消費量 P_{vib} 。

現在、我々のグループ以外でナノスケール電気伝導への局所発熱の影響を活発に研究しているのは、デンマークの Brandbyge グループである。最近、Brandbyge グループは、発熱した熱が周辺環境へ拡散する効果を電気伝導現象に経験的に取り入れることに成功している。この点で、Brandbyge グループの研究成果は我々よりも一歩進んでいると言える。今後は、経験的手法に頼ることなく第一原理的に放熱効果を取り扱う手法の開発が望まれる。

③ゲート電圧等の電気伝導への影響

【実施方法】

ゲート電圧やドーピングの効果は、種々のナノ構造デバイスの実際の動作において大変重要である。この効果の解析を目指して電流電圧特性や局所電流分布を高精度かつ効率的に計算するために、まず密度汎関数法または密度汎関数強結合法と非平衡グリーン関数法とを組み合わせた独自の電気伝導シミュレータを新たに開発した。

そして、(i)従来のシリコンデバイスに類似して、グラフェンナノリボンのソース/ドレイン電極部分がドーピングによってn型あるいはp型になっているという効果を実効的に取り入れる、(ii)ソース/ドレイン電極によって挟まれたデバイス領域と静電的に結合した第3の電極、即ちゲート電極の影響を取り入れる、という2点でシミュレータの改良を行った。このうち、後者のゲート電圧の効果については、電界分布を計算するためのポアソン方程式の境界条件として取り入れるため、非常に現実的かつ信頼性の高いシミュレーションが可能となる。

【実施内容】

第一段階の電気伝導シミュレータを開発した後、その応用としてカーボンナノチューブやグラフェンナノリボンにおける有限バイアス電気伝導と局所電流分布等の検討を行った。次に改良した電気伝導シミュレータを用い、n型にドーピングされたグラフェンナノリボン電極によってnドープのグラフェンナノリボンが挟まれたデバイス構造について解析を行い、さらにゲート電圧効果等を含めてトランジスタ特性などに関して研究を実施した。

【成果】

ジグザグ型の端を持つグラフェンナノリボン(有限幅の単層グラファイト)における電流電圧特性の研究を行った結果、端状態の存在と端状態波動関数の偶奇性に起因した選択則によって電流の飽和現象が起こるという結果が得られた。これは、この系がゼロギャップ半導体であるにもかかわらず有限のギャップを持つ半導体に類似した電流電圧特性を持つという事を意味しており、極めて興味深い結果である。又、様々なバイアス下における局所電流分布の計算により、低バイアス下での局所電流分布はリボンの端に局在しており、高バイアスになるに従い一般にはリボンの中心部分付近にも電流が流れるようになる事がわかった。これは、フェルミ準位付近における波動関数がリボンの端に局在しており(端状態)、エネルギーがフェルミ準位から離れるに従いリボン全体に広がった波動関数になる事から理解される。

さらに、グラフェンナノリボンの端に欠陥がある場合についても計算を行い、欠陥の電流方向での場所に依存して電流値が大きく変化すること、特にドレイン端付近に欠陥がある場合には電流が

大きく増加し、電流の飽和は起こらないことが示された。これは欠陥の存在によって系の対称性が壊れ、波動関数の偶奇性による選択則がもはや機能しなくなるからである。このような現象は通常の有限ギャップ半導体ではみられず、グラフェンナリボン独自の効果として興味深い結果である。

次に、改良されたシミュレータを用いて n 型にドーパされたグラフェンナリボン電極によって n 型ドーパのグラフェンナリボンが挟まれたデバイス構造について研究した。その結果、先に述べた初期研究の結果と同様の電流の飽和特性が得られた他、電極によって挟まれたデバイス部分を微量に n 型にドーパする事により飽和電流値を制御できることが明らかとなった。

最後に本項目の主眼となるゲート電圧効果については、まずデバイス領域と静電的に結合されたゲート電極に印加される電圧を様々に制御することにより、「飽和電流値の制御」、「飽和特性と非飽和特性のスイッチング制御」などが可能になることが明らかとなった。次に、原子空孔欠陥を含むカーボンナノチューブにゲート電圧を印加し、その電気伝導度を制御できることを見出した(図 3.6.5 参照)。さらに、欠陥周りの非平衡電子密度分布や局所状態密度の計算を行うことによってそのメカニズムを明らかにした。すなわち、ゲート電圧が印加されていない場合には、原子空孔欠陥周りに局在した不對電子軌道はフェルミエネルギーの直上に存在し、電極から入射された伝導電子は、この不對電子状態によって後方共鳴散乱される。このため、欠陥を含まない場合と比べて電気伝導度が低下する。不對電子軌道のエネルギー準位はゲート電圧によって上下に移動させることが可能である。ゲート電圧をプラスに印加した場合には、不對電子軌道準位置はフェルミエネルギーから遠ざかるため、電気伝導度は増加する。一方、ゲート電極をマイナスに印加した場合には、不對電子軌道はフェルミエネルギーに接近し、電気伝導度が減少する。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

グラフェンナリボンの電気伝導に関しては、本研究以前にはゼロバイアスコンダクタンスに関する研究のみが行われており、有限バイアス下における電流電圧特性に関する研究を行ったのは本研究が最初である。又近年、グラフェンナリボンの応用に関する関心の世界的な高まりにより、電流電圧特性の研究も幾つか発表されているものの、それらは全てアームチェア端のグラフェンナリボンにおける数値計算であり、本研究によって得られた重要な知見である「ジグザグ端グラフェンナリボンにおける端状態波動関数の偶奇性に起因する電流飽和特性」や「局所電流分布の電圧依存性」については、本研究による指摘以外には発表されていない。

グラフェンナリボンにおけるゲート電圧の効果及び電極やチャネル部分へのドーピングの効果

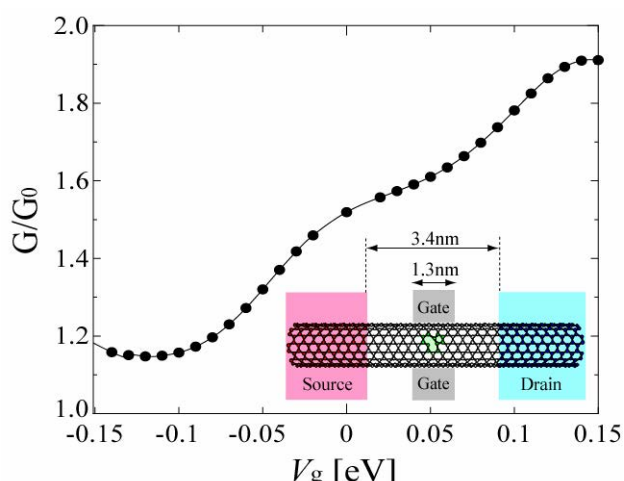


図 3.6.5:カーボンナノチューブ・トランジスタの電気伝導度のゲート電圧依存性。

については、アームチェア端のグラフェンナノリボンにおけるゲート電圧の効果が最近数件報告されている。しかし、それらは単純な強結合法に基づいており、ジグザグ端のグラフェンナノリボンにおけるドーピング／ゲート電圧の効果を密度汎関数強結合法の枠組みで計算している点で、本研究はユニークである。

④吸着原子が電流から受ける力

【実施方法】

ナノスケール架橋構造に電流が流れるときに電流密度が増加する傾向があるため、ジュール熱発生その他、架橋原子構造変形、原子移動、場合によっては架橋破断に至る可能性がある。このような現象は、電流－電圧特性に著しい影響を及ぼす。本項目では、これらの点を明らかにするために、系の中の原子が電流から受ける力について、3.4①に述べた系とは異なる対象、具体的にはCNTの外壁に吸着した原子を取り上げて解析した。計算には、3.4の一部の項目と同様に非平衡グリーン関数(NEGF)法プログラム Atomistix Tool Kit (ATK)を用いた。

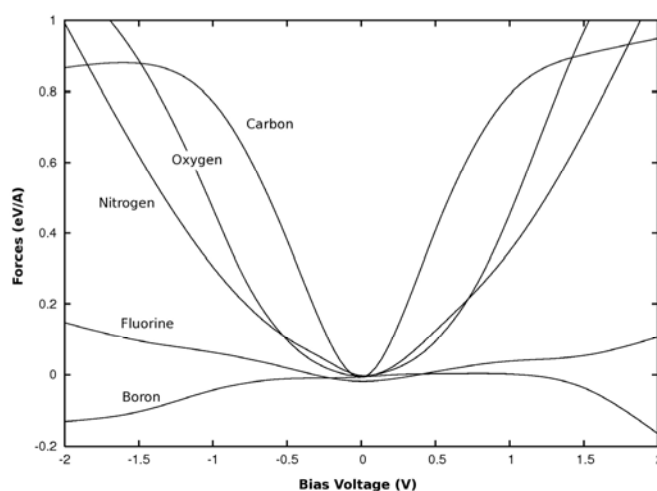


図 3.6.6 : (5,5)CNT 外壁の吸着原子 B、C、N、O、F に働く壁に垂直方向の力と印加電圧の関係。

【実施内容】

密度汎関数法に基づく NEGF 法を使い、単層金属カーボンナノチューブの一種である(5,5)CNTの外壁に吸着する5種類の原子(B, C, N, O, F)に働く力を計算した。そして、電圧の大きさと方向、原子の種類等に依存した力の特性の起源を電子状態から解析した。

【成果】

5種類の吸着原子に働く力をCNTの軸方向と壁に垂直方向に分解して解析したところ、興味深い特性が得られた。原子に働く力の軸方向成分は、原子の実効電荷に比例して大きさと方向が定まり、印加電圧の方向によって力の向きも逆転することがわかった。この性質は、外部電界と原子の電荷との静電相互作用で理解できるものである。ところが、図 3.6.6 に示した CNT 壁と垂直方向の力の成分は、たとえ電界の方向が反転しても力の方向は変わらず、原子の種類によってその大きさが顕著に異なることから、静電相互作用という従来の平衡物理量では全く理解できないものとなっている。この力の新しい特性は、フェルミエネルギー近傍の電子状態間の遷移(非平衡散乱電子状態)に起因することが詳細な解析ではじめて明らかとなった。電流が原子に及ぼす力の原因を明らかにするための一歩として重要な成果といえる。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

CNT に吸着する原子が電流によって受ける力に関する類似の計算は、我々が知るかぎりでは 2 件ほどある。しかし、それらの先行研究は 1 種類の吸着原子にのみ調べているために定性的議論に終始しており、本研究が探り当てた“非平衡散乱電子状態が駆動する力”という力の原因と定量的理解には至っていない。この点で本研究の意義は大きい。

⑤ナノ構造における電界放射と原子蒸発

【実施方法】

電界蒸発は、電界による原子の移動という点で上記項目④と関連する点である。この現象については、電界電子放射も合わせて検討することが時に不可欠であるため、項目を改めてここで両者について研究した結果を述べる。

この研究中、電界放射電流の計算と電子状態解析には、本グループでプログラム開発した時間依存密度汎関数 (TDDFT) 法を用いた。一方、電界放射電流が引き起こす表面原子蒸発過程の解析については、同じく本グループでプログラム開発したリカージョン転送行列 (RTM) 法を用いた。この方法は、半無限電極に接続した系の電子状態計算という点で境界マッチング密度汎関数法と同様のものであるが、アルゴリズムに違いがある。

【実施内容】

原子状構造欠陥を含むダイヤモンド表面およびグラフェンからの電界放射電流の計算と電子状態解析を TDDFT 法で行った。さらに、ナトリウム表面の電界放射電流が引き起こす表面原子蒸発過程について、RTM 法を用いて解析した。

【成果】

まず、ダイヤモンド表面に吸着水素がある場合と表層部に水素不純物欠陥が混入している場合の電界放射特性を解析した。ダイヤモンド清浄表面にある不対結合電子状態が放射に寄与するが、表面が水素で終端されると代わって価電子帯最高準位のイオン化エネルギーが減少し、清浄表面に比較し放射電流量が逆に増加することを見出した。また、表面内部に水素複合欠陥が混入するとバンドギャップ内に不純物準位が形成されそれを踏み台にして放射電流量が増加することもわかった。ダイヤモンド表面が水素で終端されると電界放射が顕著に

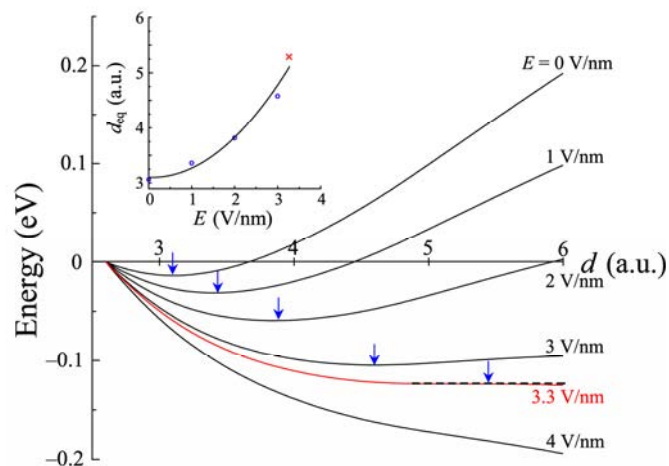


図 3.6.7: ナトリウム表面から電界放射するときの表面原子が真空側へ蒸発するときのポテンシャルエネルギー。印加電界強度が 3.3 V/nm を超えると、表面原子はエネルギー障壁なしに真空へ蒸発する。

なることは実験では指摘されていたが、理論による検証ははじめてである。

次に、グラフェンシートに面に平行と垂直に電界を印加して放射特性を調べたところ、いずれの場合も不對結合電子軌道からの放射電流量が大きかった。面に空孔欠陥を作り不對結合軌道を人工的に作り出すと、その欠陥周辺からの放射電流密度が 20 倍以上になったことから、不對結合電子軌道が電界放射に重要な役割を果たしていることが明らかとなった。また、この系については二つの方法論、TDDFT 法と RTM 法の両方を用いて解析し、2 つの方法の特徴とそれらの適性を明らかにした。すなわち、放射機構の電子状態起源を明かにするためには TDDFT 法が、放射電流量を正しく見積もるためには RTM 法がそれぞれ適していることを確認した。

最後に、ナトリウム表面から電界放射される時、電界強度がある閾値を超えると表面ナトリウム原子が負に帯電して活性化エネルギー障壁無しに真空へ蒸発する現象を RTM 法による解析で見出した(図 3.6.7 参照)。通常の電界蒸発と比較して小さい電界強度でかつ逆方向の電界で起きることから、これが放射電流効果によるものであることを確認した。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

電界放射に関する第一原理解析はいくつかある。ただし、本研究のように TDDFT 法により電界放射の電子状態起源の詳細、とくに構造欠陥の混入の影響を明らかにした研究報告はない。定性的側面ではあるが、実験との比較検討が可能になった意義は大きい。また、電界放射下の表面原子蒸発は、最近の CNT 電界放射顕微鏡の実験でも多く観測されている現象であるが、電流が原因で表面原子が電界蒸発する機構を理論的に明らかにしたのはこの研究がはじめてである。その意味で本研究の意義は大きいと言える。

⑥光吸収スペクトルに現れるナノ構造電子状態

【実施方法】

本研究でプログラム開発・整備を進めてきた時間依存密度汎関数(TDDFT)法の応用として、本研究プロジェクトの主題とする「電気特性」からはややはずれるが物性としては大変重要な、光吸収スペクトルの解析を行った。このために、TDDFT 法によってナノ構造の光学応答関数を計算した。

【実施内容】

QCAPS のエンジンコード PRDF に TDDFT 計算ルーチンを組み込んだ。これにより、実空間実時間

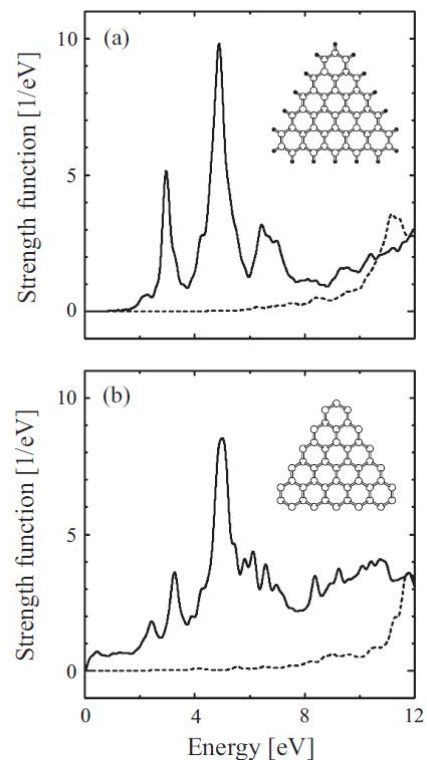


図 3.6.8: 三角グラフェンの光吸収断面積。(a)は水素終端した場合、(b)は清浄端の場合。実線はグラフェン面に平行に光を照射した場合、破線はグラフェン面に垂直に照射した場合。3eV 近傍にあるピークがエッジ状態に関係した電子遷移によるもの。

TDDFT による分子、ナノ構造の光吸収スペクトルの計算が可能となった。このシミュレータの応用として、グラフェンナノ構造の光吸収スペクトルを計算した。

【成果】

グラフェンナノ構造の光吸収スペクトルを計算したところ、理論予測はされてきたがまだ検証実験のない“エッジ状態”に起因する構造が初めて出現した。図 3.6.8 に(a)水素で終端した三角グラフェンと、(b) 清浄端の三角グラフェンの強度関数(光吸収散乱断面積に比例)の計算結果を示す。電子構造の結果と合わせて考えると、3.0 eV 近傍にあるスペクトルはジグザグ端構造をもつナノグラフェン特有のエッジ状態に起因したものと結論できる。破線はグラフェン面に垂直に外場を印加した場合の吸収強度である。この場合は、低エネルギー領域での遷移は起こらず、8 eV 付近から吸収が起こることがわかる。

【成果の位置付けと類似研究との比較】

光吸収スペクトルを TDDFT により解析する先行研究は比較的多くある。ただし、本研究のようにナノ構造に特有な電子状態を光吸収スペクトルに見出した例は我々の知るかぎり無い。今後は、TDDFT によるナノ構造光吸収スペクトルシミュレータ開発を目指す、マニュアルと GUI を装備した本シミュレータのように専門外の研究者が使えるようなものは見当たらない。

(2) 研究成果の今後期待される効果

①ナノスケール熱伝導

本研究項目で開発されたナノスケール熱伝導理論とそれに基づいたシミュレータは、ナノスケール物質の熱伝導度を高精度に評価可能であることから、デバイス設計を行う際の熱伝導評価の標準的ツールとして発展していくと期待される。また、本研究においてカーボンナノチューブの熱伝導度の量子化現象を発見したように、本研究はナノスケール特有の新奇な熱伝導現象の解明に今後大きく貢献すると期待している。残された課題としては、周辺環境(溶液、熱浴、基板など)への熱拡散、熱放射、接触熱抵抗などを取り入れることが挙げられる。今回開発したプログラムにこれらの効果を取り入れることによって、デバイス動作環境の下での熱伝導評価が実行可能となり、ナノデバイス開発において更なる貢献が期待される。

ナノデバイス設計において熱伝導特性は欠かすことのできない重要な物性値であり、本研究で開発した手法は、今後、ナノデバイスの熱伝導特性を理論的に予測するための標準的手法となると期待される。ナノスケール熱伝導の研究は始まったばかりであり、その基礎的性質さえも未知な点が多い。この分野の基礎科学的研究は今後世界的に活発になり、発展していくと期待されるが、その中でも本研究の成果は重要な役割を果たすと期待される。

②局所発熱とその電気伝導への影響

本研究成果を皮切りにして、種々の分子架橋の電子-分子振動相互作用の影響に関する電気伝導研究が国内外において活発に行われるようになった。このことから分かるように、本成果はナノスケール電気伝導の研究分野にあって重要な意義を持つと言える。今後は、より現実の状況に近い電気伝導計算を行うために、発熱した熱を電極、基板、溶液などの外部環境への熱拡散を考

慮に入れた手法の開発が望まれる。そのために、今後、本研究プロジェクトで開発された電気伝導プログラムと熱伝導プログラムを連動させた新しい手法の開発を予定している。

単一分子架橋の実験において最も難しいことは、作成された分子架橋の構造(分子と電極の接触構造など)を識別することである。本研究では、単一分子架橋の構造を反映した分子振動を微分電気伝導度によって観測できることを示した。これは、間接的ではあるが、単一分子架橋の構造を識別するためのスペクトロスコピーと見なすことができる。したがって、本研究成果は今後の単一分子架橋開発における構造解析に大きく貢献すると期待される。

③ゲート電圧の電気伝導への影響

カーボンナノチューブを用いた電子デバイスに関する研究は国内外において盛んに行われている。また、近年、グラフェンの作成に関する実験的成功に伴い、グラフェンナノリボンを用いてトランジスタなどのデバイスを作成しようという応用研究が国内外で非常に活発に行われている。そのようなデバイスの挙動を予測、理解するためには、シミュレーションによる研究が欠かせない。よって、本研究においてこれまでに得られた成果は、基礎的観点のみならずデバイス開発における初期研究として重要な意味を持つ。

しかし、実験と直接比較するためには、本研究において開発したシミュレータをより実用的、高機能なものに拡張する必要がある。具体的には、デバイスとゲート電極との結合に関するより精密、現実的な取り扱いが必要である。又、本研究では電子スピンへの依存性がまだ考慮されていないため、スピン密度汎関数法の枠組みを取り入れた改良、更にはスピン軌道相互作用を取り入れた改良を早急に行う必要がある。加えて、本研究プロジェクトで研究され、多くの知見が得られている分子振動の電気伝導への影響についても、その手法、知見を本シミュレータに融合していく事を予定している。

ナノ構造を利用した新しいエレクトロニクスーナノエレクトロニクスーは、現在のエレクトロニクスの発展の先において実現が強く望まれている技術であるが、その実現には、シミュレーションによる動作特性の予測、理解が欠かせない。しかし多くの場合、そのシミュレーションには多くの計算時間を要し、又、現存する従来のシミュレータの場合、現実のデバイス構造にフレキシブルに対応する事が困難である事が多い。本研究で開発されたシミュレータを用いる事により、高精度かつ効率的に、現実のデバイス構造にフレキシブルに対応したシミュレーションが可能であり、今後のナノエレクトロニクスの発展において大きな役割を果たす事が期待される。

④吸着原子が電流から受ける力

本項目への着手は遅かったため、目標達成のために今後すべき解析はまだいくつか残されている。上記結果は金属 CNT に吸着する原子に働く力計算についてであるが、まず同様な解析を半導体 CNT に対しても行なうことが望まれる。これについては現在進行中であるが、次のステップとして電流による吸着原子の CNT 側壁での表面拡散におけるポテンシャル障壁の解析等があり、本項目の研究の発展の余地は大きい。

ナノスケール電子デバイス設計と機能制御にとって、通電中の原子構造の安定性の問題は重要な課題である。したがって、本研究が明らかにした「電流が原子に及ぼす力の原因」は応用技術開

発のための重要な知見であり、今後のナノスケール電子デバイス設計と機能制御の研究開発に大きく貢献するものと期待される。

⑤ナノ構造における電界放射と原子蒸発

本研究の電界放射下の原子蒸発の計算ではジェリウム表面上の平坦なナトリウム原子層の蒸発を調べたが、実際の表面は曲率や凸凹があったり、表面に吸着した原子クラスターが蒸発したり、ときには電子源先端部が脱離する可能性も考えられる。今後は、このような表面条件のもとでの原子蒸発反応プロセスの解析に研究が発展していくものと考えられ、また本研究グループでもその方向で進めていきたいと考えている。

電界放射電子源は真空エレクトロニクスを中心とした舞台で使われる要素技術・デバイスであるので、放射電流が引き金となって生じる原子蒸発の機構の理論的検証は、印加電圧の閾値設定、電子源材料の探索・先端部構造の設計の際に重要な知見となる。

⑥光吸収スペクトルに現れるナノ構造電子状態

ナノ構造の光学特性の解析は、今後研究が大きく発展すると思われるテーマである。本項目の成果はこのテーマに大きく貢献するものであるが、本チームで開発したキャパシタンスシミュレータ QCAPS の骨格ルーチン PRDF に TDDFT 法ルーチンを組み込んだ PRDF+TDDFT 法プログラムを完成させ、ナノ構造光吸収スペクトル解析シミュレータを開発すれば、一層大きな貢献ができると期待される。そこで本グループでは、このシミュレータの開発を今後目指していく。

さらに、開発を目指すシミュレータの基本プログラムは実空間実時間 TDDFT 法を基礎にしたものであるため、将来的には分子系の電子励起・緩和過程、レーザー照射による分子解離過程、表面反応の解析などに応用できるシミュレータ開発も可能である。

4 研究参加者

(1)「半無限電極計算」グループ

グループリーダー	氏名	所属	役職	参加時期
○	渡邊 聡	東京大学大学院 工学系研究科	教授	H14.11～H20.3
	多田 朋史	東京大学大学院 工学系研究科	助教	H16.5～H20.3
	合田 義弘	東京大学大学院 工学系研究科	学振特別研究員	H14.11～H15.4
	胡 春平	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (D)	H14.11～H16.5
	古家 真之介	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (D)	H14.11～H18.9
	俵 有央	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (D)	H15.4～H15.9 H18.4～H20.3
	野田 真史	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (M→D)	H15.4～H16.9 H17.3～H19.3

	田中 倫子	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生(M→D)	H15.4～H19.3
	王 中長	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (D)	H16.10～H20.3
	鈴木 良治	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (M)	H16.4～H18.3
	中村 泰弘	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (M)	H16.4～H18.3
	戸塚 英臣	日本大学 理工学部	助手	H14.11～H20.3
	門平 卓也	東京大学大学院 工学系研究科	CREST 研究員	H15.4～H19.1
	宋 応文	東京大学大学院 工学系研究科	CREST 研究員	H15.4～H18.3
	谷林 慧	東京大学大学院 工学系研究科	CREST 研究補助員	H15.4～H17.4
	浅井 栄大	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (M→D)	H17.4～H20.3
	辻井 貢司	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (M)	H17.4～H19.3
	寺澤 麻子	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (M)	H18.4～H20.3
	柴田 紗知子	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (M)	H18.4～H20.3
	市倉 敬章	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (M)	H19.4～H20.3
	塚本 啓之	東京大学大学院 工学系研究科	大学院生 (M)	H19.4～H20.3
	安藤 彩	東京大学大学院 工学系研究科	CREST 研究チーム 事務員	H15.1～H16.3
	松尾 輝子	東京大学大学院 工学系研究科	CREST 研究チーム 事務員	H16.4～H20.3

①研究項目:

- ・走査プローブ計測シミュレータの開発
- ・多端子電気特性計測シミュレータの開発
- ・キャパシタンス計測シミュレータ(電極間トンネル電流が無視できない場合)の開発

(2)「空間分割・時間依存計算」グループ

	氏名	所属	役職	参加時期
○	渡辺 一之	東京理科大学理学部	教授	H14.11～H20.3
	山本 貴博	東京理科大学理学部	CREST 研究員 助教	H15.4～H17.3 H17.4～H20.3
	金井 千里	東京理科大学理学部	大学院生(D)	H14.11～H15.3
	中岡 紀行	東京理科大学理学部	大学院生(D)	H14.11～H16.3
	洗平 昌晃	東京理科大学理学部	大学院生(M→ D)	H14.11～H19.10
	日隈 美奈子	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H15.4～H17.3
	近藤 尚明	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H16.4～H18.3
	野口 智之	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H16.4～H18.3
	島本 孝喜	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H17.4～H19.3
	中澤 義基	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H17.4～H19.3
	諸岡 雅弘	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H18.4～H20.3
	尾澤 佳世	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H19.4～H20.3
	高橋 徹	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H19.4～H20.3
	田口 恵太	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H19.4～H20.3
	西村 史生	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H19.4～H20.3
	早川 健	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H19.4～H20.3
	山田 幸司	東京理科大学理学部	大学院生(M)	H19.4～H20.3
	相馬 聡文	東京理科大学理学部 神戸大学電気電子学科	CREST 研究員 助教	H17.4～H18.3 H18.4～H20.3
	イヴァン ギラード	東京理科大学	CREST 研究員	H18.10～H20.3

①研究項目:

- ・キャパシタンス計測シミュレータの開発
- ・計測に影響を及ぼす局所物理現象の解析手法の確立

5 招聘した研究者等

氏名(所属、役職)	招聘の目的	滞在先	滞在期間
酒井 明 (京都大学国際融合創造センター、教授)	研究チーム主催シンポジウム「第1回ナノ物性計測ミニワークショップ」で講演・議論を行う。		平成15年2月27日
黒川 修 (京都大学国際融合創造センター、助手)	研究チーム主催シンポジウム「第1回ナノ物性計測ミニワークショップ」で講演・議論を行う。		平成15年2月27日
Gang Zhang (シンガポール国立大・物理学科 博士研究員)	研究交流の一環として情報交換を行う。	東京理科大学	平成16年7月26日～29日
真砂 啓 (大阪大・産業科学研究所 博士研究員)	研究交流の一環としてセミナーを行う。		平成17年2月4日
Nicolás Lorente (Université Paul Sabatier, Toulouse, France、教授)	研究交流の一環としてセミナー・情報交換を行う。	アグネスホテル (新宿区神楽坂 2-20-1)	平成18年5月18日～19日

6 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内誌 2 件、国際誌 47 件)

1. C. Hu, Y. Gohda, S. Furuya and S. Watanabe, “First-Principles Calculation of Vibrational Properties of a Nanostructure in Electric Fields”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol.42 7B (2003) pp.4693-4641.
2. K. Ando, N. Bray-Ali, Y. Gohda, and S. Watanabe, “Theoretical Analysis of Electron Standing Waves and Electric Field Intensity in the Vacuum Gap of STM”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol.42 7B (2003) pp.4642-4645
3. Y. Gohda and S. Watanabe, “Ab initio calculations of field emission from ultra thin Si(100) films”, J. Vac. Sci. Technol. B, Vol.21 6 (2003) pp.2461-2465.
4. M. Tanaka, Y. Gohda, S. Furuya and S. Watanabe, “Ab initio Calculation of Capacitance of Semi-Infinite Jellium Electrodes with a Nano Scale Gap”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol.42 (2003) pp.L766-768.
5. M. Noda and S. Watanabe, “Tight-Binding Calculation of Current Distribution in a Porphin Connected to Two Semi-Infinite Wires”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol.42 8A (2003) pp.L892-894.
6. M. Araidai, A. Yamauchi and K. Watanabe, “Electronic State Origin of Field Emission of Silicon Clusters”, Jpn. J. Appl. Phys. Vol.42 (2003) pp.6502-6503
7. M. Araidai and K. Watanabe, “Field Emission of Diamond Surfaces by Time-Dependent Density-Functional Calculations”, Jpn. J. Appl. Phys. Vol.42 (2003) pp.L666-L668.
8. C. Hu, Y. Gohda, S. Furuya and S. Watanabe, “Ab initio calculation of stable structures

- of a Na atomic chain under bias voltages”, *Sci. Technol. Adv. Mater.* Vol.4 6 (2003) 585–591.
9. T. Yamamoto, S. Watanabe and K. Watanabe, “Universal Features of Quantized Thermal Conductance of Carbon Nanotubes”, *Phys. Rev. Lett.*, Vol.92 (2004) pp.075502 1–4.
 10. C. Hu, S. Furuya, Y. Gohda and S. Watanabe, “Effects of structural relaxation on resistance of Na Atomic Chains”, *e-J. Surf. Sci. Nanotech.*, Vol.1 (2003) pp.120–123.
 11. H. Totsuka, Y. Gohda, S. Furuya and S. Watanabe, “Theoretical Analysis of the Bias Voltage Dependence of Apparent Barrier Height”, *Phys. Rev. B*, Vol.70 15 (2004) pp.155405 1–5.
 12. Y. Gohda and S. Watanabe, “Theoretical Analysis of Field Emission from Metallic Nanostructures on Si(100) Surfaces”, *J. Phys.-Condensed Matter*, Vol.16 (2004) pp.4685–4696.
 13. T. Kadohira, J. Nakamura and S. Watanabe, “First-principles study on the atomic and electronic structures of the Au/Si(111)- $\alpha(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ surface”, *e-J. Surf. Sci. Nanotech.*, Vol.2 (2004) pp.146–150.
 14. M. Tanaka, Y. Gohda, S. Furuya and S. Watanabe, “Ab initio Evaluation of Capacitance Between Electrodes with a Nano Scale Gap”, *Trans. Materials Res. Soc. Jpn.*, Vol.29 8 (2004) pp.3691–3694.
 15. M. Noda and S. Watanabe, “Tight-Binding Calculation of Electrical Properties of a Single Molecule Connected to a Few Semi-Infinite Electrodes”, *Trans. Materials Res. Soc. Jpn.*, Vol.29 8 (2004) pp.3687–3690.
 16. K. Watanabe, M. Araidai and K. Tada, “Field Emission and Electronic Structures of Carbon Allotropes”, *Thin Solid Films*, Vol.464–465 (2004) pp.354–359.
 17. T. Yamamoto, S. Watanabe and K. Watanabe, “Low-Temperature Thermal Conductance of Carbon Nanotubes, *Thin Solid Films*”, Vol.464–465 (2004) pp.350–353.
 18. N. Nakaoka and K. Watanabe, “Density-Functional Calculations of Self-Capacitances of Carbon Nanostructures”, *Thin Solid Films*, Vol.464–465 (2004) pp.346–349.
 19. M. Araidai and K. Watanabe, “*Ab Initio* Study of Field Emission from Hydrogen Defects in Diamond Subsurfaces”, *Appl. Surf. Sci.*, Vol.237 (2004) pp.483–488.
 20. K. Watanabe, M. Araidai, K. Tada and A. Yamauchi, “Time-Dependent Density-Functional Calculations of Field Emissions from Carbon Allotropes”, *Trans. Materials Res. Soc., Jpn.* Vol.29 (2004) pp.3681–3685.
 21. T. Yamamoto, K. Watanabe and K. Mii, “Empirical Potential Study of Phonon Transport in Graphitic Ribbon”, *Phys. Rev. B*, Vol.70 (2004) pp.245402 1–7.
 22. M. Araidai, Y. Nakamura, K. Watanabe, “Field Emission Mechanisms of Graphitic Nanostructures”, *Phys. Rev. B* Vol.70 (2004) pp.245410 1–5.

23. 宋応文、古家真之介、渡邊聡、“ナノ物性計測シミュレータのための境界マッチング密度汎関数法プログラムの高速化とその性能評価”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム、Vol.45 (2004) pp.144-150.
24. H. Totsuka, S. Furuya, and S. Watanabe, “Theoretical analysis of apparent barrier height on an Al Surface: Difference by measurement methods”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 44 7B (2005) pp.5459-5461.
25. T. Yamamoto, K. Watanabe, and S. Watanabe, “Electronic Transport in Fullerene C₂₀ Bridge Assisted by Molecular Vibrations”, Phys. Rev. Lett., Vol.95 6 (2005) pp.065501 1-4.
26. S. Tanibayashi, T. Tada, S. Watanabe, and K. Yoshizawa, “Computational Study on Stable Structures, Formation Energies, and Conductance of Single Benzene-dithiolate between Two Au Electrodes”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol.44 10 (2005) pp.7729-7731.
27. H. Tanaka, H. Nakayama, K. Watanabe, “Ab Initio Calculation of Work Function of ZrO/W(100) and YO/W(100) Surfaces”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol.44 10 (2005) pp.7618-7620.
28. T. Noguchi, T. Shimamoto and K. Watanabe, “Photo absorption Spectra of Graphitic Nanostructures by Time-Dependent Density-Functional Theory”, e-J. Surf. Sci. Nanotech., Vol.3 (2005) pp.439-443.
29. M. Araidai, S. Souma and K. Watanabe, “Comparative Study of Time-Dependent and Scattering-State Ab initio Calculations for Field Emission”, e-J. Surf. Sci. Nanotech., Vol.3 (2005) pp.457-460.
30. S. Souma, T. Yamamoto and K. Watanabe, “Electronic Transport Properties of Graphitic Ribbons under Finite Bias Voltages”, e-J. Surf. Sci. Nanotech., Vol.4 (2006) pp.78-83.
31. N. Kondo, T. Yamamoto and K. Watanabe, “Molecular-dynamics simulations of thermal transport in carbon nanotubes with structural defects”, e-J. Surf. Sci. Nanotech., Vol.4 (2006) pp.239-243.
32. R. Suzuki, M.Noda, T. Tada and S. Watanabe, “Tight-Binding Analysis of Surface Electronic Conduction Measured with Micro-Multipoint Scanning tunneling Microscopy Probes”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol.45 3B (2006) pp.2136-2139.
33. 山本貴博、渡辺一之、渡邊 聡、“カーボンナノチューブの熱伝導における普遍的量子化現象”, 表面科学、Vol.26 7 (2005) pp.398-403.
34. Y. Gohda and S. Watanabe, “Bistability in a H-terminated Si(100)2 × 1 surface obtained by ab initio transport calculations”, Surf. Sci., Vol.600 5 (2006) pp.L62-L65.
35. S. Furuya, Y. Gohda and S. Watanabe, “Ab initio Study of Al Atomic Chains with Na Impurity Atom”, e-J. Surf. Sci. Nanotech., Vol.4 (2006) pp.570-573.
36. T. Kadohira, and S. Watanabe, “First-principles study of conduction through a sodium

- atomic sheet”, e-J. Surf. Sci. Nanotech., Vol.4 (2006), pp.507–509.
37. T. Yamamoto, K. Watanabe, “Nonequilibrium Green’s Function Approach to Phonon Transport in Defective Carbon Nanotubes”, Phys. Rev. Lett., Vol.96, (2006) pp.255503 1–4.
 38. N. Kondo, T. Yamamoto and K. Watanabe, “Phonon Wave packet Scattering Dynamics in Defective Carbon Nanotubes”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol.45 (2006) pp.L963–L965.
 39. T. Yamamoto, T. Noguchi, and K. Watanabe, “Edge-state signature in optical absorption of nanographenes”, Phys. Rev. B [Rapid Comm.], Vol.74 (2006), pp.121409 1–4.
 40. T. Tada and S. Watanabe, “Submatrix inversion approach to the ab initio Green’s function method for electrical transport”, e-J. Surf. Sci. Nanotech. Vol.4 (2006) pp.484–489.
 41. S. Tanibayashi, T. Tada, S. Watanabe, H. Sekino, “Effects of energetic stability in transport measurements of single benzene–dithionate by the STM break junction technique”, Chem. Phys. Lett., Vol.428 (2006) pp.367–370.
 42. S. Furuya, Y. Gohda and S. Watanabe, “Dependence of Electric Properties of Al Atomic Chains on the Structure of Chain–Electrode Junction”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol.45 (2006) pp.8891–8893.
 43. Zhongchang Wang, T. Kadohira, T. Tada and S. Watanabe, “Nonequilibrium Quantum Transport Properties of a Silver Atomic Switch”, Nano Lett., Vol.7 (2007), pp.2688–2692.
 44. Yvan Girard, Takahiro Yamamoto, and Kazuyuki Watanabe, “Quantum–Chemical Interpretation of Current–Induced Forces on Adatoms on Carbon Nanotubes”, J. Phys. Chem. C, Vol.111 (2007) pp.12478–12482.
 45. Takahiro Yamamoto, Yoshiki Nakazawa, and Kazuyuki Watanabe, “Control of Electron– and Phonon–Derived Thermal Transport in Carbon Nanotubes”, New J. Phys. Vol.9 (2007) pp.245 1–11.
 46. H. Totsuka, S. Furuya, and S. Watanabe, “Theoretical analysis of effect of tip atomic species on apparent barrier height on Al(100) surface”, Ultramicroscopy, Vol.108 (2007) pp.11–16.
 47. M. Morooka, T. Yamamoto and K. Watanabe, “defect–induced circulating thermal current in grapheme with nanosized width”, Phys. Rev. B, Vol.77 (2008) pp.033412 1–4.
 48. M. Araidai and K. Watanabe, “Ab Initio Calculation of Surface Atom Evaporation in Electron Field Emission, e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. Vol.5 (2007) pp.106–109.
 49. Satofumi Souma, Matsuto Ogawa, Takahiro Yamamoto, and Kazuyuki Watanabe, “Numerical Simulation of Electronic Transport in Zigzag–edegd Graphene Nano–Ribbon Devices”, J. Computational Electronics, published online on 19 March 2008, DOI: 10.1007/s10825–008–0237–z.

(2)その他の著作物

1. S. Watanabe, Y. Gohda, S. Furuya, M. Tanaka, C. Hu and H. Totsuka: Theoretical Analyses of Electric-Current Related Phenomena at Surface Nanostructures under Strong Local Electric Filed (Invited Article), Activity Report 2002, Super Computer Center, ISSP, Univ. Tokyo, (2003) pp.34-43
2. 渡邊 聡、渡辺一之, “ナノ物性計測シミュレータの開発に向けて”, 化学工業 Vol.54 (2003) pp.278-283
3. 渡邊 聡、合田 義弘、渡辺一之、多田和弘、洗平昌晃, “電界電子放射の第一原理計算”, 固体物理, Vol.38 (2003) pp.537-543
4. K. Watanabe, S. Watanabe, M. Tanaka, N. Nakaoka, “Ab Initio Calculation of Capacitance of Nanostructures”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 44 7B (2004) pp.5348-5353.
5. 渡邊聡, “表面のトンネル現象”, 電気伝導, (新訂版)表面科学の基礎と応用 (エヌ・ティー・エス)(2004) pp.116-128.
6. 渡辺一之、中岡紀行、渡邊聡、田中倫子, “ナノスケール構造の静電容量の第一原理計算”, 日本物理学会誌、Vol.59 (2004) pp.228-231.
7. 渡邊聡、宋応文, “コンピュータシミュレーションのハードウェアの進歩”, 軽金属、Vol.55 (2004) pp.103-110.
8. 渡邊聡, “第一原理計算による表面ナノ構造の物性予測とマテリアルデザイン”, 固体物理、Vol.39 (2004) pp.831-838.
9. 渡邊聡、戸塚英臣、鈴木良治、山本貴博、渡辺一之, “ナノスケール物性計測のシミュレーション”, 応用物理、Vol.74 (2005) pp.1075-1080.
10. 渡邊聡、鈴木良治、宋応文、戸塚英臣, “ナノ電気特性シミュレーション”, スーパーコンピューティングニュース、Vol.8 (2006) 特集号、pp.87-95.
11. S. Watanabe, R. Suzuki, T. Tada and H. Totsuka, “Simulation for Measurements of Electric Properties of Surface Nanostructures”, in *Frontiers of Computational Science* (Y. Kaneda, H. Kawamura and M. Sasai (eds.), Springer), (2007) pp.119-124
12. T. Yamamoto, N. Kondo, K. Watanabe, Y. Song, and S. Watanabe, “Heat Transport in Nanoscale Objects: Classical to Quantum”, in *Frontiers of Computational Science* (Y. Kaneda, H. Kawamura and M. Sasai (eds.), Springer), (2007) pp.131-136
13. 山本貴博、渡辺一之、渡邊聡: “カーボンナノチューブの量子化熱伝導”, 日本物理学会誌、Vol.62 (2007) p.355-359.
14. 山本貴博、渡辺一之、渡邊聡: “カーボンナノチューブの熱輸送”, 固体物理、Vol.42 No.6 (2007) pp.21-34
15. T. Yamamoto, K. Watanabe, and E. Hernandez, “Mechanical Properties, Thermal Stability and Heat Transport in Carbon Nanotubes”, in *Carbon Nanotubes*, Topics in Applied Physics Vol.111, pp.155-182 (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg 2007), A. Jorio, M.S. Dresselhaus,

and G. Dresselhaus (Eds.)

16. 戸塚英臣, 渡邊聡: “局所トンネル障壁高さの第一原理計算による理論解析”、表面科学、Vol.28 10 (2007) pp.593-600.

(3)学会発表(国際学会発表及び主要な国内学会発表)

① 招待講演 (国内会議 17 件、国際会議 12 件)

国際会議

1. S. Watanabe^{1,2}, C. Hu^{1,2}, S. Furuya^{1,2}, M. Tanaka^{1,2} and H. Totsuka^{2,3} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST, ³Nihon Univ.), “Ab-Initio Analyses of Nanoscale Measurements of Electrical Properties”, *International Workshop on Smart Interconnects* (Atami, Japan), 11/8, 2003
2. S. Watanabe^{1,2}, C. Hu^{1,2} and M. Tanaka¹ (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST), “Ab-Initio Studies of Electrical Properties of Nanostructures: Conductance and Capacitance”, *The 6th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations*, (Tsukuba, Japan), 11/10, 2003
3. K. Watanabe^{1,2}, M. Araidai^{1,2}, K. Tada^{1,2}, A. Yamauchi^{1,2} (¹ Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), “Time-Dependent density-Functional Calculations of Field Emissions from Carbon Allotropes and Related Phenomena”, *The 8th International Union of Materials Research Science International Conference on Advanced Materials* (Yokohama, Japan), 10/9, 2003.
4. K. Watanabe^{1,3}, S. Watanabe^{2,3}, M. Araidai^{1,3} and Y. Gohda^{2,3} (¹Tokyo Univ. of Science, ²The Univ. of Tokyo, ³CREST JST), “Ab Initio Study of Field Emission form Atomic-Scale Surfaces”, *16th International Vacuum Microelectronics Conference* (Osaka, Japan), 7/8, 2004
5. K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), “Partitioned Real-Space Density-Functional Calculations: Application to Field Evaporation and Capacitances of Nanostructures”, *7th Asian Workshop on the First-Principles Electronic Structure Calculations* (台北市, 台湾), 11/2, 2004
6. K. Watanabe^{1,3}, S. Watanabe^{2,3} (¹Tokyo Univ. of Science, ²The Univ. of Tokyo ³CREST-JST), “Capacitance and Quantum Effects of Nanostructures”, *12th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy*, (Izuatagawa, Japan), 12/9-11, 2004
7. S. Watanabe^{1,3}, R. Suzuki^{1,3}, T. Tada^{1,3}, and H. Totsuka^{2,3} (¹The Univ. of Tokyo, ²Nihon Univ., ³CREST-JST), “Simulations for Measurements of Electric Properties of Nanoscale Objects”, *International Symposium on Frontiers of Computational Science 2005* (Nagaoya, Japan), 12/12, 2005

8. T. Yamamoto^{1,3}, N. Kondo^{1,3}, S. Watanabe^{2,3} and K. Watanabe^{1,3} (¹Tokyo Univ. of Science, ²The Univ. of Tokyo, ³CREST-JST), “Heat transport in nanoscale objects: classical to quantum”, *International Symposium on Frontiers of Computational Science 2005* (Nagoya, Japan), 12/12, 2005
9. S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST), “Theoretical Analyses on Property Measurements Using Scanning Probe Microscopes”, *The Univ. of Tokyo International Symposium and The 10th ISSP International Symposium on Nanoscience at Surfaces* (Kashiwa, Japan), 10/10, 2006
10. T. Yamamoto^{1,3}, K. Watanabe^{1,3} and S. Watanabe^{2,3} (¹Tokyo Univ. of Science, ²The Univ. of Tokyo, ³CREST-JST), “Quantum theory of thermal transport at nanoscale”, *The 9th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations* (Seoul, Korea), 11/8, 2006
11. S. Watanabe^{1,2}, Y. Nakamura¹, N. Sasaki¹, M. Noda^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST), “First-principles study of Ag/Si(111) and Au/Si(111) surfaces and related topics”, *The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science* (Seoul, Korea), 9/15, 2007
12. Y. Nakazawa^{1,3}, S. Souma^{2,3}, T. Yamamoto^{1,3}, K. Watanabe^{1,3} (¹Tokyo Univ. of Science, ²Kobe Univ., ³CREST-JST), “Electronic transport in graphitic nanostructures with structural defects under bias and gate voltages”, *The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science* (Seoul, Korea), 9/13, 2007

国内会議

1. 渡邊聡^{1,2} (¹東京大学大学院工学系研究科 ²科学技術振興機構 CREST)、「ナノ構造の電気特性の第一原理計算：電界放出、静電容量、局所障壁高さ」、*表面低次元ナノ構造機能物質の創製と物性*、東京大学山上会館(東京)、7/8, 2003
2. 渡邊聡^{1,2} (¹東京大学大学院工学系研究科 ²科学技術振興機構 CREST)、「ケルビン力顕微鏡へ向けての理論展開」、*学術創成研究費「分子・DNA レベルの素子」研究会*、東京工業大学長津田キャンパス(横浜)、7/30, 2003
3. 渡邊聡^{1,3}、田中倫子^{1,3}、中岡紀行^{2,3}、渡辺一之^{2,3} (¹東京大学大学院工学系研究科 ²東京理科大学理学部 ³科学技術振興機構 CREST)、「ナノスケール構造のキャパシタンスの第一原理計算」、*日本物理学会 2003 年秋季大会*、岡山大学 津島キャンパス(岡山)、9/21, 2003
4. 渡辺一之^{1,2} (¹東京理科大学理学部 ²科学技術振興機構 CREST)、「カーボンアロトロプの電界電子放射機構 -第一原理からのアプローチ-」、*第44回真空に関する連合講演会*、機械振興会館(東京)、11/13, 2003
5. 渡邊聡^{1,2} (¹東京大学大学院工学系研究科 ²科学技術振興機構 CREST)、「非接触AFMとその周辺分野に関する理論計算」、*第23回表面科学学会講演大会*、早稲田

大学(東京)、11/26, 2003

6. 渡邊聡^{1,2} (1・東京大学大学院工学系研究科、²科学技術振興機構 CREST)、「ナノ領域の電気特性に関するシミュレーション-静電容量を中心に」、ISSPワークショップ「ナノスケール表面物性の現状と展望」、東大物性研(柏市) 8/4, 2004
7. 渡辺一之^{1,2} (1・科学技術振興機構 CREST、²東京理科大学理学部)、「欠陥のある炭素系ナノ構造の電界電子放射機構:電界方向と電子状態」、カーボンナノチューブ-FED プロジェクト公開シンポジウム、第2回真空ナノエレクトロニクスシンポジウム、泉ガーデンギャラリー(東京)、3/4, 2005
8. 渡邊聡^{1,2} (1・東京大学大学院工学系研究科、²科学技術振興機構 CREST)、「ナノスケール物性計測のシミュレーション」、CAMMフォーラム(コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会)本例会 社団法人 企業研究会、虎ノ門パストラル(東京)、8/5, 2005
9. 山本貴博^{1,2} (1・東京理科大学理学部、²科学技術振興機構 CREST)、「カーボンナノチューブの熱伝導理論」電気学会電子材料研究会「カーボンナノチューブの物性、評価、応用」、東京理科大学 神楽坂キャンパス 森戸記念館(東京)、9/22, 2006
10. 渡辺一之^{1,2} (1・東京理科大学理学部、²科学技術振興機構 CREST)、「ナノ構造非平衡過程の計算-熱伝導、電子伝導・放射、光吸収-」、企業研究会第19期 CAMMフォーラム6月例会社団法人 企業研究会、虎の門パストラス(東京)、6/2, 2006
11. 渡邊聡^{1,2} (1・東京大学大学院工学系研究科、²科学技術振興機構 CREST)、「ケルビン力顕微鏡の理論」、顕微鏡学会SPM分科会研究会、キャンパスプラザ京都(京都)、10/5, 2006
12. 山本貴博^{1,2} (1・東京理科大学理学部、²科学技術振興機構 CREST)、「カーボンナノチューブの熱伝導:量子効果」、日本物理学会 2007年春季大会、鹿児島大学 郡元キャンパス(鹿児島)、3/19, 2007
13. 山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1・東京理科大学理学部、²科学技術振興機構 CREST)、「伝導計算の現状と課題:熱伝導」、科研費特定領域研究「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発」ミニワークショップ「大規模・高精度電子状態計算手法に関する研究会II」、(独)物質・材料研究機構(つくば市)、7/25, 2007
14. 渡辺一之^{1,2} (1東京理科大学理学部、2科学技術振興機構 CREST)、「ナノカーボン物質における非平衡現象-熱輸送、電界応答、光吸収」、名古屋大学(豊田理化学研共催)第309回物性談話会、名古屋大学フロンティアプラザ(名古屋)、12/19, 2007
15. 洗平昌晃¹、渡辺一之^{2,3} (1早稲田大学、²東京理科大学理学部、³科学技術振興機構 CREST)、「第一原理計算による電界電子放射下の表面原子蒸発」、第5回真空エレクトロニクスシンポジウム、筑波大学東京キャンパス(東京)、3/3, 2008
16. 山本貴博^{1,2} (1東京理科大学理学部、²科学技術振興機構 CREST)、「ナノカーボン

物質のフォノン輸送理論」、日本物理学会第63回年次大会、近畿大学本部キャンパス(東大阪)、3/23, 2008

17. 山本貴博^{1,2}(¹東京理科大学理学部、²科学技術振興機構 CREST)、「カーボンナノチューブ研究・開発における「ブレークスルー」にいま何が必要か? :はじめに」、日本物理学会第63回年次大会、近畿大学本部キャンパス(東大阪)、3/24, 2008

② 口頭発表 (国内会議 48 件、国際会議 49 件)

1. N. Nakaoka^{1,2}, S. Yaginuma¹ and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), “Electronic States Origin of Electrochemical Capacitances of Nanostructures”, *12th International Conference on Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy and Related Techniques* (Eindhoven, Netherlands), 7/22, 2003
2. M. Araidai^{1,2} and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), “Ab initio study of field emission from hydrogen defects in diamond subsurfaces”, *7th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Nara, Japan), 11/19, 2003
3. N. Nakaoka^{1,2} and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), “Density-functional calculations of self-capacitances of nanostructures”, *7th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Nara, Japan), 11/19, 2003
4. T. Yamamoto^{1,3}, S. Watanabe^{2,3} and K. Watanabe^{1,3} (¹Tokyo Univ. of Science, ²The Univ. of Tokyo, ³CREST-JST), “Low-temperature thermal conductance of carbon nanotubes”, *7th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Nara, Japan), 11/20, 2003
5. H. Totsuka^{1,3}, S. Furuya^{2,3} and S. Watanabe^{2,3} (¹Nihon Univ., ²The Univ. of Tokyo, ³CREST-JST), “First-principles Analysis of the effect of the atomic species on Apparent Barrier Height”, *The 11th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy* (Izuatagwa, Japan), 12/12, 2003
6. M. Noda¹ and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “Tight-Binding Analysis of Electron Transport in Porphyrin Molecules Connected to a Few Electrodes”, *American Physical Society 2004 March Meeting*, (Montreal, Canada), 3/24, 2004
7. T. Yamamoto^{1,3}, S. Watanabe^{2,3} and K. Watanabe^{1,3} (¹Tokyo Univ. of Science, ²The Univ. of Tokyo, ³CREST-JST), “Quantization and Low-Temperature Universality of Thermal Conductance of Single-Walled Carbon Nanotubes”, *American Physical Society 2004 March Meeting* (Montreal, Canada), 3/22, 2004
8. Y. Song^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “Improving the

- Performance of a Simulator of Nanoscale Measurements of Material Properties”, *Joint Conference of ICCP6 and CCP2003* (Beijing, China), 5/23–28, 2004
9. C. Hu^{1,2}, S. Furuya^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST–JST), “Effects of Structural Relaxation on Electrical Properties of Na Atomic Chains: A First–Principles Study”, *16th International Vacuum Congress/12th International Conference on Solid Surfaces/8th International Conference on Nanometer–scale Science and Technology* (Venice, Italy), 6/28–7/2, 2004
 10. M. Noda^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST–JST), “Tight–Binding Calculation of Electron Transport in Porphyrin Molecules Connected to a Few Electrodes”, *16th International Vacuum Congress/12th International Conference on Solid Surfaces/8th International Conference on Nanometer–scale Science and Technology* (Venice, Italy), 6/28–7/2, 2004
 11. R. Suzuki^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST–JST), “Tight–Binding Analysis of Electronic Conduction through Surface States Measured with Micro–Four–Point STM Probes”, *The 1st SUN–UT Joint Student Workshop* (Seoul, Korea), 11/18, 2004
 12. M. Tanaka^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST–JST), “Theoretical Analysis of Capacitance of Nanostructures based on Ab Initio Calculation”, *The 1st SUN–UT Joint Student Workshop* (Seoul, Korea), 11/18, 2004
 13. S. Furuya^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST–JST), “Ab Initio Study of Electric Properties of Al Atomic Chains between Electrodes”, *The 1st SUN–UT Joint Student Workshop* (Seoul, Korea), 11/18, 2004
 14. T. Tada^{1,2} S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST–JST), “Ab initio Green’s function formalism for electrical transmission of molecular wires”, *12th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy* (Izuatagwa, Japan), 12/10, 2004
 15. H. Totsuka^{1,3} and S. Watanabe^{2,3} (¹Nihon Univ., ²The Univ. of Tokyo, ³. CREST–JST), “Theoretical analysis of apparent barrier height on an Al surface: Difference by measurement methods”, *12th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy* (Izuatagawa, Japan), 12/9, 2004
 16. T. Tada^{1,3}, M. Kondo², K. Yoshizawa² and S. Watanabe^{1,3} (¹The Univ. of Tokyo, ²Univ. of Kyushu, ³. CREST–JST), “A Green’s function formalism with Gaussian broadening for electrical transmission in atomic and molecular wires”, *Materials Research Society Fall Meeting 2004* (Boston, USA), 11/29, 2004
 17. M. Tanaka^{1,2}, S. Furuya^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “First–Principles Study on Nanoscale Properties of Displacement Current Between Two Parallel Electrodes”, *13th International Conference on Scanning Tunneling Microscopy/*

- Spectroscopy and Related Techniques* (Sapporo, Japan), 7/3–8, 2005
18. T. Totsuka^{2,3}, S. Furuya^{1,3}, and S. Watanabe^{1,3} (¹The Univ. of Tokyo, ²Nihon Univ., ³CREST JST), “Theoretical Analysis of Coverage Dependence of Local Tunneling Barrier Height on a Na/Al(100) Surface”, *13th International Conference on Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy and Related Techniques* (Sapporo, Japan), 7/3–8, 2005
 19. T. Tada^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo,, ²CREST JST), “Ab initio Green’s function method with GAUSSIAN for electrical transport”, *Niels Bohr Summer Institute 2005 Transport in mesoscopic and single-molecule systems* (Copenhagen, Denmark), 8/15–27, 2005
 20. T. Yamamoto^{1,3}, K. Watanabe^{1,3}, S. Watanabe^{2,3} (¹Tokyo Univ. of Science, ² The Univ. of Tokyo ³CREST JST), “Inelastic transport and local heating in fullerene bridges”, *Niels Bohr Summer Institute 2005 Transport in mesoscopic and single-molecule systems* (Copenhagen, Denmark), 8/15–27, 2005
 21. T. Noguchi^{1,2}, K. Shimamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Ab-initio Study of Photoabsorption Spectra of Carbon Clusters”, *International Symposium on Surface Science and Nanotechnology*, (Omiya, Japan), 11/14–17, 2005
 22. N. Kondo^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Molecular-dynamics simulations of thermal transport in carbon nanotubes with structural defects”, *International Symposium on Surface Science and Nanotechnology* (Omiya, Japan), 11/14–17, 2005
 23. Y. Song^{1,2} and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST), “Grid Enablement and Performance Evaluation for Simulators of Nanoscale Measurements of Material Properties”, *HPC Asia 2005: The 8th International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region* (Beijing, China), 11/30–12/3, 2005
 24. T. Tada^{1,2} S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab-initio Green’s function method with GAUSSIAN for electrical transport through atomic and molecular wires”, *Materials Research Society Spring Meeting 2006* (San Francisco, USA), 4/17–4/21,2006
 25. M. Tanaka^{1,2}, S. Furuya^{1,2} and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “First-Principles Calculation of STM Tip-Sample Capacitance”, *International Conference on Nanoscience and Technology 2006* (Basel, Switzerland), 8/2, 2006
 26. M. Noda^{1,2}, C. Fischer³, T. Kadohira^{1,2}, G. Ceder³, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST, ³MIT), “Energetic Stability of Au/Si(111)-(5x2) structures by first principles calculation”, *The 24th European Conference on Surface Science* (Paris, France), 9/4, 2006

27. Z. C. Wang^{1,2}, T. Kadohira^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “First-Principles Investigation on Atomic Switch through Ag-Ag₂S-Ag System”, *SNU-TU-UT Student Workshop* (Beijing, China), 10/1, 2006
28. H. Asai^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Molecular dynamics simulation of vortex dynamics in superconductors with twin boundaries”, *SNU-TU-UT Student Workshop* (Beijing, China), 10/1, 2006
29. Y. Nakazawa^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Gate Control of Electronic Transport in Defective Carbon Nanotubes”, *14th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy* (Izuatagawa, Japan), 12/7-9, 2006
30. M. Tanaka^{1,2}, S. Furuya^{1,2} and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “First-Principles Analysis of Capacitance and Conductance of Atomic Point Contacts”, *American Physical Society March Meeting 2007* (Denver, USA), 3/5-9, 2007
31. M. Noda^{1,2}, T. Kadohira^{1,2}, T. Tada^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Density Functional Study on Energetic Instability of the 5×2 structure on Au/Si(111) Au/Si(775) surfaces”, *American Physical Society March Meeting 2007* (Denver, USA), 3/5-9, 2007
32. T. Tada^{1,2}, A. Tawara^{1,2}, T. Matsuyama^{1,2}, S. Watanabe^{1,2}, S. Tanibayashi³, H. Sekino³, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST, ³Toyohashi Univ. of Technology), “Ab initio Green’s function method and Boltzmann averaging for electrical conductance of a single molecular junction”, *American Physical Society March Meeting 2007* (Denver, USA), 3/5-9, 2007
33. Z. C. Wang^{1,2}, T. Kadohira^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “First-Principles Investigation on Atomic and Electronic Transport in Ag-Ag₂S-Ag”, *American Physical Society March Meeting 2007* (Denver, USA), 3/5-9, 2007
34. G. Yvan^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Origin of the Current-Induced Forces Exerted on Adatoms Adsorbed on Carbon Nanotubes”, *International Symposium on Frontier in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo, Japan), 6/7, 2007
35. T. Yamamoto^{1,3}, K. Watanabe^{1,3}, and Watanabe^{2,3} (¹Tokyo Univ. of Science, ²The Univ. of Tokyo ³CREST JST), “Ballistic Thermal Transport in Carbon Nanotubes”, *International Symposium on Frontier in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo, Japan), 6/7, 2007
36. T. Tada^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Ab initio Simulation of conductance histogram of benzene-1, 4-dithiolate molecular wire in water solution”, *International Symposium on Frontier in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo,

- Japan), 6/8, 2007
37. T. Tada^{1,2}, A. Tawara^{1,2}, S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab initio Simulation of conductance histogram of benzene-1, 4-dithiolate molecular wire in water solution”, *International Symposium on Frontier in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo, Japan), 6/8, 2007
 38. T. Tada^{1,2} S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab-initio Green’s function study on STM-NMR simulation of single molecular devices”, *International Conference on Nanoscience and Technology* (Stockholm, Sweden), 7/2-7/6, 2007
 39. T. Tada^{1,2}, A. Tawara^{1,2}, T. Matsuyama¹, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab-initio NEGF-DFT study on electrical transport of single molecular junctions in water solution”, *International Conference on Nanoscience and Technology* (Stockholm, Sweden), 7/2-7/6, 2007
 40. S. Watanabe^{1,2}, A. Tawara^{1,2}, T. Tada^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab-initio study on electrical transport of single molecular junctions in water solution”, *The 17th Iketani Conference: The Doyama Symposium on Advanced Materials* (Tokyo, Japan), 9/5-9/8, 2007
 41. G. Yvan^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Current-induced forces on adatoms on metallic and semiconducting carbon nanotubes”, *The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science* (Seoul, Korea), 9/14, 2007
 42. S. Souma^{1,2}, M. Ogawa¹, T. Yamamoto^{2,3}, K. Watanabe^{2,3} (¹Kobe Univ., ²CREST JST, ³Tokyo Univ. of Science), “Numerical Simulation of the Electronic Transport in Graphene Nano-Ribbon Devices”, *12th International Workshop on Computational Electronics* (Amherst, USA), 10/8-10/10, 2007
 43. A. Tawara^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Theoretical study on electrical transport of benzene-1,4-dithiolate molecular bridge between Au electrodes in water solution”, 9th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (Tokyo, Japan), 11/12, 2007
 44. T. Tada^{1,2}, Z. C. Wang^{1,2}, T. K. Gu¹, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “Ab initio study on Interface and Electronic Structures of Atomic Switch Composed of Mixed Conductors.”, *Materials Research Society Fall Meeting 2007* (Boston, USA), 11/29, 2008
 45. Satoshi Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “Quantum Simulation on Nanoscale Measurements of Materials Electrical Properties”, Workshop on Research and Development in Simulation-based Engineering and Science (Tokyo, Japan), 12/7, 2007

46. T. Tada^{1,2}, Z. C. Wang^{1,2}, T. K. Gu¹, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “Ab initio non-equilibrium Green’s function study on the growth of metallic bridge in mixed conductor atomic switch”, *American Physical Society March Meeting 2008* (New Orleans, USA), 3/10, 2008
47. A. Terasawa^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “Simulation of four-probe measurement based on density-functional tight-binding method”, *American Physical Society March Meeting 2008* (New Orleans, USA), 3/11, 2008
48. A. Tawara^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “Ab initio study of solvent effects on electrical transport of molecular bridge between electrodes”, *American Physical Society March Meeting 2008* (New Orleans, USA), 3/14, 2008
49. H. Totsuka^{1,3}, S. Watanabe^{2,3}, (¹ Nihon Univ., ² The Univ. of Tokyo, ³CREST JST), “Theoretical Study of Tip-Induced Band Bending and Local Tunneling Barrier Height on H-Terminated Si(100) Surface”, *American Physical Society March Meeting 2008* (New Orleans, USA), 3/11, 2008

国内学会

1. 中岡紀行^{1,2}、湧井智史¹、渡辺一之^{1,2} (¹ 東京理科大学理学部 ² 科学技術振興機構 CREST)、「水素化シリコンクラスターの電界蒸発」、*日本物理学会 2003 年第58回年次大会*、東北大学川内キャンパス (仙台市)、3/28, 2003
2. 中岡紀行^{1,2}、柳沼誠一郎¹、渡辺一之^{1,2} (¹ 東京理科大学理学部 ² 科学技術振興機構 CREST)、「ナノ構造の静電容量と電子状態の相関」、*日本物理学会 2003 年秋季大会*、岡山大学 津島キャンパス(岡山市)、9/22, 2003
3. 洗平昌晃^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (¹東京理科大学理学部 ²科学技術振興機構 CREST)、「ダイヤモンド表面の電界電子放出に及ぼす水素欠陥の効果」、*日本物理学会 2003 年秋季大会*、岡山大学 津島キャンパス(岡山市)、9/22, 2003
4. 山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (¹ 東京理科大学理学部 ² 科学技術振興機構 CREST)、「カーボンナノチューブの熱伝導率の量子化」、*日本物理学会 2003 年秋季大会*、岡山大学 津島キャンパス(岡山市)、9/23, 2003
5. 宋応文^{1,2}、古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (¹ 東京大学大学院工学系研究科 ² 科学技術振興機構 CREST)、「ナノ物性計測シミュレータのための境界マッチング密度汎関数法プログラム的高速化とその性能評価」、*2004 年 ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム*、日本科学未来館(東京都江東区)、1/16, 2004
6. 田中倫子^{1,2}、古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (¹ 東京大学大学院工学系研究科 ² 科学技術振興機構 CREST)、「ナノスケールコンデンサの静電容量の原子レベル計算 III」、*日本物理学会 第 59 回年次大会*、九州大学箱崎キャンパス(福岡市)3/30, 2003

7. 戸塚英臣^{1,3}、古家真之介^{2,3}、渡邊聡^{2,3} (1 日本大学理工学部² 東京大学大学院工学系研究科³ 科学技術振興機構 CREST)、「トンネル障壁高さへの探針原子種の影響: バイアス電圧依存症について」、日本物理学会第 59 回年次大会、九州大学箱崎キャンパス(福岡市)、3/30, 2003
8. 山本貴博^{1,2}、三井主成^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部² 科学技術振興機構 CREST)、「経験的 Force-Constant 法による炭素ナノ物質の熱特性の研究」、日本物理学会第 59 回年次大会、九州大学箱崎キャンパス(福岡市)、3/30, 2003
9. 田中倫子^{1,2}、古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「ナノスケールコンデンサの静電容量の原子レベル計算 IV」、日本物理学会秋季大会、青森大学 (青森市)、9/13, 2004
10. 近藤尚明^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「金属ナノワイヤーのフォノン熱伝導」、日本物理学会秋季大会、青森大学 (青森市)、9/12, 2004
11. 多田朋史^{1,3}、近藤正一²、渡邊聡^{1,3}、吉澤一成² (1 東京大学大学院工学系研究科、² 九州大学工学部、³ 科学技術振興機構 CREST)、「ガウス関数展開を用いたグリーン関数法による分子ワイヤーのコンダクタンス計算」、分子構造総合討論会2004、広島国際会議場(広島市)、9/29, 2004
12. 山本貴博^{1,3}、渡邊聡^{2,3}、渡辺一之^{1,3} (1 東京理科大学理学部、² 東京大学大学院工学系研究科、³ 科学技術振興機構 CREST)、「カーボンナノチューブの熱伝導における普遍的量子化現象」、第24回表面科学講演大会、早稲田大学総合学術情報センター国際会議場(東京都新宿区)、11/10, 2004
13. 門平卓也^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「第一原理計算によるAu/Si(111)- α , β ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° 表面構造の研究」、セミナー、独立行政法人物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所 (つくば市)、2/8, 2005
14. 戸塚英臣^{1,3}、古家真之介^{2,3}、渡邊聡^{2,3} (1 日本大学理工学部、² 東京大学大学院工学系研究科、³ 科学技術振興機構 CREST)、「Al 表面上のトンネル障壁高さ像の解析」、日本物理学会第60回年次大会、東京理科大学野田キャンパス (野田市)、3/24-27, 2005
15. 山本貴博^{1,3}、渡邊聡^{2,3}、渡辺一之^{1,3} (1 東京理科大学理学部、² 東京大学大学院工学系研究科、³ 科学技術振興機構 CREST)、「ナノスケール物質の電気伝導特性に及ぼす電子-フォノン散乱の影響」、日本物理学会 第60回年次大会、東京理科大学 野田キャンパス (野田市)、3/27, 2005
16. 多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「グリーン関数法を用いた分子ナノワイヤーの第一原理計算」、日本物理学会第60回年次大会、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)、9/20, 2005
17. 野田真史^{1,3}、C. Fischer²、門平卓也^{1,3}、G. Ceder²、渡邊聡^{1,3} (1 東京大学大学院 工学系研究科、² マサチューセッツ工科大学³ (独) 科学技術振興機構)、「第一原理計算による

- Au/Si(111)表面の安定構造評価」、2005年日本物理学会秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)、9/22, 2005
18. 近藤尚明^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「構造欠陥を含むカーボンナノチューブの熱伝導シミュレーション」、2005 年日本物理学会秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)、9/19, 2005
 19. 相馬聡文^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「グラファイトリボン架橋の有限バイアスでの電気伝導特性」、2005 年日本物理学会秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)、9/19, 2005
 20. 多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「グリーン関数法による分子ワイアの第一原理計算: 分子軌道基底からのアプローチ」、分子構造総合討論会 2005、タワーホール船堀(東京都江戸川区)、9/30, 2005
 21. 山本貴博^{2,3}、渡辺一之^{2,3}、渡邊聡^{1,3} (1 東京大学大学院 工学系研究科、² 東京理科大学理学部³(独)科学技術振興機構)、「フラーレン分子架橋の非弾性電子輸送と分子運動制御」、平成17年度東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究会「次世代ナノ・エレクトロニクスのための光・スピン・電荷制御の理論」、東北大学電気通信研究所(仙台市)、10/26, 2005
 22. 多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「ナノスケール電気物性計測に関するシミュレーション」、平成17年度東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究会「次世代ナノ・エレクトロニクスのための光・スピン・電荷制御の理論」、東北大学電気通信研究所(仙台市)、10/26, 2005
 23. 渡邊聡^{1,3}、戸塚英臣^{2,3}、田中倫子^{1,3}、多田朋史^{1,3} (1 東京大学大学院 工学系研究科、² 日本大学理工学部³(独)科学技術振興機構)、「ナノ物性計測の理論解析: 現状と課題」、東京大学物性研短期研究会、東京大学物性研究所(柏市)、12/26-27, 2005
 24. 相馬聡文^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「タイトバインディング密度汎関数法によるグラファイトリボンの電気伝導解析」、東京大学物性研短期研究会、東京大学物性研究所(柏市)、12/26-27, 2005
 25. 戸塚英臣^{2,3}、古家真之介^{1,3}、渡邊聡^{1,3} (1 東京大学大学院 工学系研究科、² 日本大学理工学部³ 科学技術振興機構 CREST)、「局在トンネル障害高さの理論解析」、局所仕事関数研究会、筑波大学東京キャンパス(東京都文京区)、12/26, 2005
 26. 戸塚英臣^{2,3}、古家真之介^{1,3}、渡邊聡^{1,3} (1 東京大学大学院 工学系研究科、² 日本大学理工学部³ 科学技術振興機構 CREST)、「局所トンネル障壁高さへのNaクラスタの影響」、日本物理学会第 61 回年次大会、愛媛大学城北キャンパス(松山市)、3/29, 2006
 27. 有菌テツ¹、近藤尚明^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「ピーポット安定秩序構造の分子動力学シミュレーション」、日本物理学会第 61 回年次大会、愛媛大学城北キャンパス(松山市)、3/27, 2006
 28. 相馬聡文^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構

- CREST)、「グラファイトリボンの有限バイアス電気伝導におけるエッジ状態の役割」、*日本物理学会第 61 回年次大会*、愛媛大学城北キャンパス(松山市)、3/30, 2006
29. 山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「非平衡フォノングリーン関数法によるナノチューブ熱伝導の解析」、*日本物理学会第 61 回年次大会*、愛媛大学城北キャンパス(松山市)、3/30, 2006
30. 多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「Ab initio Green 関数法による単一分子接合のNMR化学シフト計算」、*分子構造総合討論会 2006*、グランシップ(静岡県コンベンションアーツセンター)(静岡市)、9/20-23, 2006
31. 王中長^{1,2}、門平卓也^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「First-Principles investigation toward electronic states, interface structure and electric properties of Ag-system」、*2006 年電気化学会秋季大会*、同志社大学京田辺キャンパス、(京都府京田辺市)、9/14-15, 2006
32. 門平卓也^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「密度汎関数強束縛法によるナノ構造・表面電気特性プログラムの開発 (I)」、*日本物理学会 2006 年秋季大会*、千葉大学西千葉キャンパス(千葉市)、9/24, 2006
33. 山本貴博^{1,2}、近藤尚明^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「カーボンナノチューブの熱伝導: 古典 MD 法と非平衡グリーン関数法」、*日本物理学会 2006 年秋季大会*、千葉大学西千葉キャンパス(千葉市)、9/25, 2006
34. 多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「第一原理グリーン関数法による単一分子接合の STM-NMR シミュレーション」、*日本物理学会 2007 年春季大会*、鹿児島大学郡元キャンパス(鹿児島県郡元市)、3/20, 2007
35. 辻井貢司^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「ペロブスカイト型強誘電体のドメイン構造に関する第一原理計算」、*日本物理学会 2007 年春季大会*、鹿児島大学郡元キャンパス(鹿児島県郡元市)、3/20, 2007
36. 戸塚英臣^{1,3}、渡邊聡^{2,3} (1 日大理工、² 東大工、³ JST-CREST)、「Si(100)表面のトンネルコンダクタンスと局所トンネル障壁高さの理論研究」、第 54 回応用物理学関係連合講演会、3/29, 2007
37. 相馬聡文^{1,3}、小川真人¹、山本貴博^{2,3}、渡辺一之^{2,3} (1 神戸大学工学部、² 東京理科大学理学部、³ 科学技術振興機構 CREST)、「グラフェンナノリボン素子のトランジスタ特性に関する理論的研究」、*日本物理学会第 62 回年次大会*、北海道大学(札幌市)、9/24, 2007
38. 多田朋史^{1,2}、王中長^{1,2}、谷廷坤¹、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「イオン伝導体を用いた原子スイッチの界面構造・電子状態に関する第一原理計算」、*日本物理学会第 62 回年次大会*、北海道大学(札幌市)、9/24, 2007
39. 俵有央^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「電極間分子架橋系の電流特性における溶媒効果に関する理論的研究

- 究 II」、日本物理学会第 62 回年次大会、北海道大学（札幌市）、9/24, 2007
40. 多田朋史^{1,2}、俵有央^{1,2}、渡邊聡^{1,2}（¹東京大学大学院工学系研究科、²科学技術振興機構 CREST）、「非平衡グリーン関数法による溶液内単一分子接合系の電流特性に関する理論的研究」、第 1 回分子科学討論会 2007 仙台、東北大学川内北キャンパス（仙台市）、9/18, 2007
 41. Z. C. Wang^{1,2}, T. K. Gu¹, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2}（¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST）, “First-Principles Study toward the Understanding of Atomic Switch Using Ag₂S and Cu₂S”, 2007 年電気化学会秋季大会、東京工業大学大岡山キャンパス（東京都目黒区）、9/20, 2007
 42. 戸塚英臣^{1,3}、渡邊聡^{2,3}（¹東京大学大学院 工学系研究科、²日本大学理工学部 ³科学技術振興機構 CREST）、「水素終端 Si(100) 面上の探針により誘起されるバンドベンディングと局所トンネル障壁高さの理論解析」、第 27 回表面科学講演大会、東京大学生産技術研究所 コンベンションホール（東京都目黒区）、11/3, 2007
 43. 谷廷坤¹、王中長^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2}（¹東京大学大学院工学系研究科、²科学技術振興機構 CREST）、「Nonequilibrium Quantum Transport Properties in Atomic Switches of Ag-Ag₂S-Ag and Cu-Cu₂S-Cu」、第 33 回固体イオニクス討論会、名古屋国際会議場（名古屋市）、12/6, 2007
 44. 多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2}（¹東京大学大学院工学系研究科、²科学技術振興機構 CREST）、「非平衡グリーン関数法による単一分子接合系の超微細相互作用と NMR 特性の検討」、日本物理学会第 63 回年次大会、近畿大学本部キャンパス（東大阪市）、3/26, 2008
 45. 俵有央^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2}（¹東京大学大学院工学系研究科、²科学技術振興機構 CREST）、「電極間分子架橋系の電流特性における溶媒効果に関する理論的研究 III」、日本物理学会第 63 回年次大会、近畿大学本部キャンパス（東大阪市）、3/26, 2008
 46. 柴田紗知子^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2}（¹東京大学大学院工学系研究科、²科学技術振興機構 CREST）、「ケルビン力顕微鏡の探針に働く力の第一原理計算」、日本物理学会第 63 回年次大会、近畿大学本部キャンパス（東大阪市）、3/23, 2008
 47. 寺澤麻子^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2}（¹東京大学大学院工学系研究科、²科学技術振興機構 CREST）、「密度汎関数強束縛法を用いた四端子測定シミュレーション」、日本物理学会第 63 回年次大会、近畿大学本部キャンパス（東大阪市）、3/25, 2008
 48. 相馬聡文^{1,3}、小川真人¹、山本貴博^{2,3}、渡辺一之^{2,3}（¹神戸大学工学部、²東京理科大学理学部、³科学技術振興機構 CREST）、「ナノグラフェン素子における量子輸送シミュレーション」、第 55 回応用物理学関係連合講演会、日本大学理工学部 船橋キャンパス（船橋市）、3/27-3/30, 2008

③ポスター発表 (国際 83 件、 国内 63 件)

1. H. Totsuka^{1,3}, Y. Gohda^{2,3}, S. Furuya^{2,3}, and S. Watanabe^{2,3} (¹Nihon Univ., ²The Univ. of Tokyo ³CREST-JST), “Theoretical analysis of apparent barrier height on Al(100) surface”, *12th International Conference on Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy and Related Techniques*, (Eindhoven, Netherlands), 7/21, 2003
2. C. Hu^{1,2}, Y. Gohda^{1,2}, S. Furuya^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST), “Self-consistent Calculation of the Effects of Atomic Relaxation on Electrical Properties of Nanostructures in Electric Fields”, *International Conference on Advanced Materials* (Yokohama, Japan), 10/9, 2003
3. M. Noda^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST), “Tight-Binding Calculation of Electrical Properties of a Single Molecule Connected to a Few Semi-Infinite Electrodes”, *International Conference on Advanced Materials* (Yokohama, Japan), 10/10, 2003
4. M. Tanaka^{1,2}, Y. Gohda^{1,2}, S. Furuya^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST), “Ab Initio Evaluation of Capacitance Between Electrodes with a Nano Scale Gap”, *International Conference on Advanced Materials* (Yokohama, Japan), 10/10, 2003
5. H. Totsuka^{1,3}, Y. Gohda^{2,3}, S. Furuya^{2,3}, and S. Watanabe^{2,3} (¹Nihon Univ., ²The Univ. of Tokyo ³CREST-JST), “Theoretical analysis of apparent barrier height”, *Symposium “Scanning Probe Nanotechnology” in The 8th International Union of Materials Research Societies International Conference on Advanced Material* (Yokohama, Japan), 10/11, 2003
6. T. Kadohira^{1,2}, J. Nakamura³ and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST, ³Univ. of Electro-Communications), “Theoretical investigation of the honeycomb structure of the Au/Si(111)- $\alpha(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ surface using first-principles calculations”, *International Workshop on Smart Interconnects* (Atami, Japan), 11/7-8, 2003
7. M. Tanaka^{1,2}, S. Furuya^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab-Initio Study of Capacitance Between Electrodes with a Nanoscale Gap”, *International Workshop on Smart Interconnects* (Atami, Japan), 11/7-8, 2003
8. H. Totsuka^{1,3}, S. Furuya^{2,3}, and S. Watanabe^{2,3} (¹Nihon Univ., ²The Univ. of Tokyo ³CREST-JST), “First-principle analysis of apparent barrier height: Effects of bias voltage and tip atomic species”, *The 6th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations* (Tsukuba, Japan), 11/10, 2003
9. C. Hu,^{1,2} Y. Gohda,^{1,2} S. Furuya^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Effects of Electrode Spacing and Structural Optimization on the Conductance of Na Atomic Chains”, *The 6th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure*

- Calculations* (Tsukuba, Japan), 11/10, 2003
10. M. Noda^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “Tight-Binding Analysis of Current Distribution in a Porphin Molecule Connected to a Few Electrodes”, *7th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Nara, Japan), 11/19, 2003
 11. T. Kadohira^{1,2}, J. Nakamura³, and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST, ³Univ. of Electro-Communications), “First-principles study of the atomic and electronic structures of the Au/Si(111)- $\alpha(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ surface”, *7th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Nara, Japan), 11/20, 2003
 12. C. Hu^{1,2}, S. Furuya^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST) “Effects of Structural Relaxation on Conductance Oscillation in Atomic Chains”, *American Physical Society 2004 March Meeting* (Montreal, Canada), 3/22, 2004
 13. M. Tanaka^{1,2}, S. Furuya^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab Initio Study of Capacitance of Nanostructures”, *American Physical Society 2004 March Meeting* (Montreal, Canada), 3/22, 2004
 14. N. Nakaoka^{1,2} and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), “Partitioned Real-Space Density Functional Calculations: Principles and Applications”, *American Physical Society 2004 March Meeting* (Montreal, Canada), 3/22, 2004
 15. T. Kadohira^{1,2}, J. Nakamura³ and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST-JST, ³Univ. of Electro-Communications), “Reexamination of atomic and electronic structures of the Au/Si(111)- $\alpha(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ surface from first principles”, *16th International Vacuum Congress/12th International Conference on Solid Surfaces/8th International Conference on Nanometer-scale Science and Technology* (Venice, Italy), 6/28-7/2, 2004
 16. T. Yamamoto^{1,2}, K. Mii¹ and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science ²CREST-JST), “Low-Temperature Heat Transport in Graphite Nanostructures”, *16th International Vacuum Congress/12th International Conference on Solid Surfaces/8th International Conference on Nanometer-scale Science and Technology* (Venice, Italy), 6/28, 2004
 17. M. Araidai^{1,2} and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science ²CREST-JST), “Field Emission Mechanism of Graphite Nanostructures”, *16th International Vacuum Congress/12th International Conference on Solid Surfaces/8th International Conference on Nanometer-scale Science and Technology* (Venice, Italy), 6/28, 2004
 18. S. Watanabe^{1,2} (¹ The Univ. of Tokyo, ² CREST-JST), “Theoretical Calculations on Scanning Probe Microscopy measurements”, *Functionality of Organized Nanostructures* (Tsukuba, Japan), 11/30, 2004
 19. T. Tada^{1,2}, M. Kondo³, K. Yoshizawa³ and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST ³Univ. of Kyushu), “Theoretical approach to electrical transmission through

- molecular wires: Gaussian broadening and surface Green's function methods", *7th Engineering International Conference on Molecular-Scale Electronics* (San Diego, USA), 1/24-25, 2005
20. N. Kondo^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, K. Mii¹ and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), "Low-temperature thermal conductance in nanostructures", *American Physical Society 2005 March Meeting* (Los Angeles, USA), 3/21, 2005
 21. M. Araidai^{1,2} and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), "Field Emission Mechanisms of Covalently Bonded Nanostructures", *American Physical Society 2005 March Meeting* (Los Angeles, USA), 3/21, 2005
 22. T. Noguchi^{1,2}, M. Araidai^{1,2} and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), "Time-Dependent Density-Functional Calculations of Photoabsorption Spectra of Carbon Nanostructures", *American Physical Society 2005 March Meeting* (Los Angeles, USA), 3/21, 2005
 23. M. Tanaka^{1,2}, S. Furuya^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), "Theoretical Analysis of Displacement Current between Electrodes Based on Ab Initio Calculation", *8th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Stockholm, Sweden), 6/19-23, 2005
 24. R. Suzuki^{1,2}, M. Noda^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), "Tight-Binding Analysis of Electronic Conduction through Surface States Measured with Micro-Four-Point STM Probes", *8th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Stockholm, Sweden), 6/19-23, 2005
 25. T. Yamamoto^{1,2} and K. Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), "Effect of molecular vibrations on electronic transport in molecular bridges", *8th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Stockholm, Sweden), 6/19-23, 2005
 26. M. Araidai^{1,2}, S. Souma^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), "Ab initio study on electronic transport in carbon nanostructures", *8th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Stockholm, Sweden), 6/19-23, 2005
 27. T. Noguchi^{1,2}, M. Araidai^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST-JST), "Time-dependent density-functional calculations of photoabsorption spectra of organic molecules and carbon nanostructures", *8th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Stockholm, Sweden), 6/19-23, 2005
 28. R. Suzuki^{1,2}, M. Noda^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), "Tight-Binding Analysis of Surface Electronic Conduction Measured with Micro-Multi-Point STM Probes", *13th International Conference on Scanning Tunneling*

Microscopy/Spectroscopy and Related Techniques (Sapporo, Japan), 7/3–8, 2005

29. M. Araidai^{1,2}, S. Souma^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science ²CREST–JST), “Ab Initio Scattering State Calculation of Field Emission from Nanostructures”, *International Symposium on Surface Science and Nanotechnology* (Omiya, Japan), 11/14–17, 2005
30. S. Souma^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2} and K. Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science ²CREST–JST), “Electronic Transport Properties of Graphite Ribbon Bridges under Finite Bias Voltages”, *International Symposium on Surface Science and Nanotechnology* (Omiya, Japan), 11/14–17, 2005
31. M. Noda^{1,3}, C. Fischer², T. Kadohira^{1,3}, G. Ceder², and S. Watanabe^{1,3} (¹The Univ. of Tokyo, ²MIT, ³CREST JST), “First–Principles Study of Stable Structures of Au/Si(111) Surfaces”, *International Symposium on Surface Science and Nanotechnology* (Omiya, Japan), 11/14–17, 2005
32. T. Kadohira^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “First–principles study of conduction through a Na atomic sheet”, *International Symposium on Surface Science and Nanotechnology* (Omiya, Japan), 11/14–17, 2005
33. M. Tanaka^{1,2}, S. Furuya^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “First Principles Study of Joule Heat Due to Displacement Current in NC–AFM Measurements”, *International Symposium on Surface Science and Nanotechnology* (Omiya, Japan), 11/14–17, 2005
34. T. Tada^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Submatrix inversion to approach ab–initio Green’s function method with GAUSSIAN for electrical transport”, *International Symposium on Surface Science and Nanotechnology* (Omiya, Japan), 11/14–17, 2005
35. R. Suzuki^{1,2}, M. Noda^{1,2}, T. Tada^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Tight–Binding Calculation of Electronic Conduction through Tamm Surface States Measured with Micro–Multi–Point STM Probes”, *International Symposium on Surface Science and Nanotechnology* (Omiya, Japan) , 11/14–17, 2005
36. T. Tada^{1,2}, and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Submatrix inversion to approach ab–initio Green’s function method with GAUSSIAN for electrical transport”, *International Symposium on Molecular Scale Electronics* (Tsukuba, Japan), 12/5–6, 2005
37. T. Yamamoto^{2,3}, K. Watanabe^{2,3}, and S. Watanabe^{1,3} (¹The Univ. of Tokyo, ²Tokyo Univ. of Science, ³CREST JST), “Gate–Voltage Control of Molecular Motions in Fullerene Bridges”, *International Symposium on Molecular Scale Electronics* (Tsukuba, Japan), 12/5–6, 2005
38. S. Souma^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST–JST), “Nonequilibrium Electronic Transport in Graphite Ribbon Bridges”, *International*

Symposium on Molecular Scale Electronics (Tsukuba, Japan), 12/5-6, 2005

39. K. Watanabe^{1,2}, T. Arizono¹, F. Nishimura^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Energetics and dynamics of nanopeapod”, *Seventh International Conference on the Science and Application of Nanotubes* (Nagano Japan), 6/22, 2006
40. T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Influence of phonon-defect scattering on thermal transport in carbon nanotubes”, *Seventh International Conference on the Science and Application of Nanotubes* (Nagano Japan), 6/22, 2006
41. Z. C. Wang^{1,2}, T. Kadohira^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “First Principles Study toward the Understanding of Atomic Switch using Ag₂S”, *The Univ. of Tokyo and Univ. of Toronto 5th Graduate Student Workshop* (Tokyo Japan), 2006, 6/8
42. T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab-initio Green’s function study of NMR chemical shifts of molecular junction”, *International Conference on Nanoscience and Technology 2006* (Basel, Switzerland), 7/30-8/4, 2006
43. T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo University of Science, ²CREST JST), “Theory of phonon thermal transport in defective carbon nanotubes”, *International Conference on Nanoscience and Technology 2006* (Basel, Switzerland), 7/30-8/4, 2006
44. M. Araidai^{1,2}, K. Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Ab Initio Calculation of Force on Tip Atoms under Field Emission”, *International Conference on Nanoscience and Technology 2006* (Basel, Switzerland), 7/30-8/4, 2006
45. M. Tanaka^{1,2}, S. Furuya^{1,2} and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “First-Principles Analysis of Nanoscale Capacitance of STM Tip-Sample System”, *The 24th European Conference on Surface Science* (Paris, France), 9/6, 2006
46. H. Totsuka^{1,2}, S. Furuya^{2,3} and S. Watanabe^{2,3}, (¹ Nihon Univ., ²CREST JST, ³ The Univ. of Tokyo), “Theoretical study of influence of a Na cluster on local tunneling barrier height on Al(100) Surface”, *The Univ. of Tokyo International Symposium and The 10th ISSP International Symposium on Nanoscience at Surfaces* (Kashiwa, Japan), 10/12, 2006
47. M. Tanaka^{1,2}, S. Furuya^{1,2} and S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Capacitance and Conductance of Atomic Point Contact”, *The Univ. of Tokyo International Symposium and The 10th ISSP International Symposium on Nanoscience at Surfaces* (Kashiwa, Japan), 10/12, 2006
48. M. Noda^{1,2}, C. Fischer³, T. Kadohira^{1,2}, G. Ceder³, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST, ³MIT), “First-Principles Investigation on the Au/Si(111)-(5x2) Structure”, *The Univ. of Tokyo International Symposium and The 10th ISSP International Symposium on Nanoscience at Surfaces* (Kashiwa, Japan), 10/10-13, 2006

49. T. Tada^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab-initio Green’s function study on NMR chemical shifts of Hydrogen molecular junction”, *The Univ. of Tokyo International Symposium and The 10th ISSP International Symposium on Nanoscience at Surfaces* (Kashiwa, Japan), 10/10–13, 2006
50. M. Morooka^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Loop phonon current at zero-transmission dips in graphitic ribbons with structural defects”, *The Univ. of Tokyo International Symposium and The 10th ISSP International Symposium on Nanoscience at Surfaces* (Kashiwa, Japan), 10/10–13, 2006
51. Y. Nakazawa^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Electronic transport properties of CNT under gate voltage by DFT+NEGF method”, *The 9th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations* (Seoul, Korea), 11/6–8, 2006
52. T. Yamamoto^{1,2}, M. Morooka^{1,2}, K. Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Loop Thermal Current in Graphitic Ribbons with Structural Defects”, *14th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy* (Izuatagawa, Japan), 12/7–9, 2006
53. T. Tada^{1,2}, A. Tawara^{1,2}, T. Matsuyama^{1,2}, S. Watanabe^{1,2}, S. Tanibayashi³, H. Sekino³, (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST, ³Toyohashi Univ. of Technology), “Ab initio Green’s function study on NMR–STM simulation of hydrogen molecular junction”, *14th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy* (Izuatagawa, Japan), 12/7–9, 2006
54. S. Furuya^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab Initio Study of Electric Properties of Atomic Chains”, *International Conference on Quantum Simulators and Design* (Higashi Hiroshima, Japan), 12/3–6, 2006
55. T. Kadohira^{1,2}, T. Tada^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Parameter generation for a simulator of nanoscale electric conduction by functional tight binding method”, *International Conference on Quantum Simulators and Design* (Higashi Hiroshima, Japan), 12/3–6, 2006
56. Y. Girard^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Current Induced Forces on Adatoms on Carbon Nanotubes”, *13th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods* (Trieste, Italy), 1/11–13, 2007
57. T. Shimamoto^{1,2}, T. Noguchi^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Photoabsorption of Nanographene by Time-Dependent Density Functional Theory”, *13th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods* (Trieste, Italy), 1/11–13, 2007
58. S. Souma^{1,2}, M. Ogawa¹, T. Yamamoto^{2,3}, K. Watanabe^{2,3} (¹Kobe Univ., ²CREST JST,

- ³Tokyo Univ. of Science), “Current–Voltage Characteristics and Local Current Distributions in Graphene Nano–Ribbon Devices”, *International Symposium on Frontiers in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo, Japan) 6/7, 2007
59. M. Araidai^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “First–Principles Study on Surface Atom Evaporation under Electron Field Emission”, *International Symposium on Frontiers in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo, Japan), 6/7, 2007
60. M. Morooka^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Circulating Phonon Current at Zero–Transmission Dips in Defective Graphene Nanoribbons”, *International Symposium on Frontiers in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo, Japan), 6/7, 2007
61. T. Takahashi¹, T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Phonon wavepacket scattering simulations on graphene nanoribbon junctions”, *International Symposium on Frontiers in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo, Japan), 6/7, 2007
62. A. Tawara^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Theoretical study of waters surrounding a molecular bridge between electrodes”, *International Symposium on Frontiers in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo, Japan), 6/7, 2007
63. T. K. Gu¹, Z. C. Wang^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Electrical transport in atomic switches of Ag–Ag₂S–Ag and Cu–Cu₂S–Cu”, *International Symposium on Frontiers in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo, Japan), 6/7, 2007
64. A. Terasawa^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Development of multi–probe transport simulator based on density–functional tight–binding method”, *International Symposium on Frontiers in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo, Japan), 6/7, 2007
65. S. Shibata^{1,2}, Y. Nakamura, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab initio study of forces between electrodes with a nanoscale gap toward the understanding of Kelvin probe force microscopy”, *International Symposium on Frontiers in Computational Science of Nanoscale Transport* (Tokyo, Japan), 6/7, 2007
66. M. Araidai^{1,2}, K. Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “First–principles study on surface atom evaporation under field emission”, *ISSP International Workshop and Symposium on Foundations and Applications of the Density Functional Theory* (Kashiwa, Japan), 8/1, 2007
67. A. Tawara^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab initio

- simulation of electron conduction through single molecules in water solution”, *CREST-Nanolink joint international workshop on Electron transport through a linked molecule in nano-scale* (Tokyo, Japan), 8/18, 2007
68. S. Furuya^{1,2}, S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Electric Properties of Atomic Chains under Finite Bias Voltages: A First-Principles Study”, *CREST-Nanolink joint international workshop on Electron transport through a linked molecule in nano-scale* (Tokyo, Japan), 8/18, 2007
 69. K. Yamada^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2}, K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Von Neumann equation study on time-dependent inelastic transport in nanoscale devices”, *The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science* (Seoul, Korea), 9/14, 2007
 70. Z. C. Wang^{1,2}, T. K. Gu¹, T. Tada^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “First-principles study on atomic and electronic structures and quantum transport properties of solid electrolyte atomic switch”, *The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science* (Seoul, Korea), 9/14, 2007
 71. S. Shibata^{1,2}, H. Nakamura^{1,2}, T. Tada^{1,2} and S. Watanabe^{1,2} (¹The Univ. of Tokyo, ²CREST JST), “Ab initio study of forces acting on electrodes for microscopic understanding of Kelvin probe force microscopy”, *The 10th International conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy* (Antalya, Turkey), 9/17, 2007
 72. T. K. Gu¹, Z. C. Wang^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “First-principles investigation on atomic switches of Ag-Ag₂S-Ag and Cu-Cu₂S-Cu”, *The 10th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations* (Higashi Hiroshima, Japan), 10/30, 2007
 73. T. Hayakawa^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2} and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Control of Magnetic Properties of Graphen Nano Ribbons by Electric/Magnetic Field”, *The 10th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations* (Higashi Hiroshima, Japan), 10/30, 2007
 74. T. Takahashi^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2} and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Molecular dynamics study on interfacial resistance of graphene nanoribbon junctions”, *9th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Tokyo, Japan), 11/12, 2007
 75. Yvan Girard^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2} and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Forces Induced by the Current On Adatoms on Metallic and semiconducting Carbon Nanotubes”, *9th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Tokyo, Japan), 11/12, 2007
 76. K. Yamada^{1,2}, T. Yamamoto^{1,2} and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST),

- “Transient Inelastic Transport Behavior of Atomic Contacts: Tight-Binding Calculation Based on the von Neumann Equation”, *9th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Tokyo, Japan), 11/12, 2007
77. H. Totsuka^{1,3}, S. Watanabe^{2,3}, (¹ Nihon Univ., ² The Univ. of Tokyo, ³CREST JST), “Theoretical Study of Tip-Induced Band Bending and Local Tunneling Barrier Height on H-Terminated Si(100) Surface”, “Transient Inelastic Transport Behavior of Atomic Contacts: Tight-Binding Calculation Based on the von Neumann Equation”, *9th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures* (Tokyo, Japan), 11/12, 2007
78. A. Tawara^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “Theoretical study of benzene-1,4-dithiolate molecular bridge between Au electrodes in water solution.”, *Materials Research Society 2007 Fall Meeting* (Boston, USA), 11/28, 2007
79. S. Shibata^{1,2}, H. Nakamura, and S. Watanabe^{2,3} (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “First-Principle Calculation of Forces Acting on Scanning Probe for Microscopic Analysis of Kelvin Probe Force Microscopy”, *15th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy* (Izuatagawa, Japan), 12/6, 2007
80. A. Terasawa^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “Development of multi-probe transport simulator based on density-functional tight-binding method”, *15th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy* (Izuatagawa, Japan), 12/6, 2007
81. H. Totsuka^{1,3}, S. Watanabe^{2,3}, (¹ Nihon Univ., ² The Univ. of Tokyo, ³CREST JST), “Theoretical Study of Tip-Induced Band Bending and Local Tunneling Barrier Height on H-Terminated Si(100) Surface”, *15th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy* (Izuatagawa, Japan), 12/6, 2007
82. T. Yamamoto^{1,2}, K. Yamada^{1,2} and K. Watanabe^{1,2} (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Polaron Effects on Transient Current Behavior of Atomic Contacts”, *15th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy* (Izuatagawa, Japan), 12/6, 2007
83. T. K. Gu¹, Z. C. Wang^{1,2}, T. Tada^{1,2}, S. Watanabe^{1,2}, (¹The Univ. of Tokyo ²CREST-JST), “First Principles Study Toward the Understanding of Atomic Switches Through Ag₂S and Cu₂S”, The 2nd International Conference on Physics of Solid state Ionics (Yokohama, Japan), 12/18, 2007

(国内学会)

1. 門平卓也^{1,2}、中村淳³、渡邊聡^{1,2} (¹東京大学大学院工学系研究科 ²科学技術振興機構 CREST ³電気通信大学電子)、「Au/Si(111)- $\alpha(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ 表面構造の理論研

- 究」、表面低次元ナノ構造機能物質の創製と物性、東京大学山上会館(東京都文京区)、7/8, 2003
2. 野田真史^{1,2} 渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科² 科学技術振興機構 CREST)、「強結合法による³ 電極間分子の電流分布計算 II」、日本物理学会 2003 年秋季大会, 岡山大学津島キャンパス(岡山市)、9/20, 2003
 3. 田中倫子^{1,2}、合田義弘^{1,2}、古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科² 科学技術振興機構 CREST)、「ナノスケールコンデンサの静電容量の原子レベル計算 -電極表面原子構造依存性-」、日本物理学会 2003 年秋季大会, 岡山大学津島キャンパス(岡山市)、9/20, 2003
 4. 戸塚英臣^{1,3}、古家真之介^{2,3}、渡邊聡^{2,3} (1 日本大学理工学部² 東京大学大学院工学系研究科³ 科学技術振興機構 CREST)、「トンネル障壁高さへの探針原子種の影響」、日本物理学会 2003 年秋季大会, 岡山大学津島キャンパス(岡山市)、9/20, 2003
 5. 谷林慧^{1,3}、多田朋史²、渡邊聡^{1,3}、吉澤一成² (1 東京大学大学院工学系研究科² 九大工³ 科学技術振興機構 CREST)、「Au(111)-チオール系有機分子クラスターの理論計算(2)」、日本物理学会 2003 年秋季大会, 岡山大学津島キャンパス(岡山市)、9/20, 2003
 6. 門平卓也^{1,2}、中村淳³、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科² 科学技術振興機構 CREST)³ 電気通信大学電子)、「Au/Si(111)- $\alpha(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ R30°表面構造の理論研究」、第 23 回表面科学会講演大会, 早稲田大学(東京都新宿区)、11/28, 2003
 7. 胡春平^{1,2}、古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科² 科学技術振興機構 CREST)、「Na 原子鎖コンダクタンスへの電極間距離と構造最適化の影響」、日本物理学会第 59 回年次大会, 九州大学箱崎キャンパス (福岡市)、3/27, 2003
 8. 門平卓也^{1,2}、中村淳³、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科² 科学技術振興機構 CREST)³ 電気通信大学電子)、「第一原理計算による Au/Si(111)- $\alpha(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ 表面構造の研究」、日本物理学会第 59 回年次大会,九州大学箱崎キャンパス(福岡市)、3/28, 2003
 9. 洗平昌晃^{1,2}、中村泰弘¹、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部² 科学技術振興機構 CREST)、「ナノ構造からの電界電子放射機構」、日本物理学会第 59 回年次大会, 九州大学箱崎キャンパス (福岡市)、3/27, 2003
 10. 野田真史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 科学技術振興機構 CREST、² 東京大学大学院工学系研究科)、「強結合法による³ 電極間ポルフィリン分子の電子輸送計算」、分子スケールエレクトロニクス研究会、自然科学研究機構 岡崎カンファレンスセンター (岡崎市)、4/9, 2004
 11. 戸塚英臣^{1,2}、古家真之介^{1,3}、渡邊聡^{1,3} (1 科学技術振興機構 CREST、² 日本大学理工学部、³ 東京大学大学院工学系研究科)、「Al 表面上のトンネル障壁高さの理論解析: 測定法の違いについて」、日本物理学会秋季大会、青森大学 (青森市)、9/15, 2004

12. 山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2}、野田真史^{1,3}、渡邊聡^{1,3} (1.科学技術振興機構 CREST、
2.東京理科大学理学部、3.東京大学大学院工学系研究科)、「ナノスケール伝導体の電流
による熱発生」、*日本物理学会秋季大会*、青森大学 (青森市)、9/15, 2004
13. 野口智之^{1,2}、中岡紀行^{1,2}、洗平昌晃^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1.科学技術振興機構 CREST、
2.東京理科大学理学部)、「時間依存密度汎関数法による炭素ナノ構造の光学吸収スペ
クトル」、*日本物理学会秋季大会*、青森大学 (青森市)、9/15, 2004
14. 田中博郎¹、山中遙¹、渡辺一之^{1,2} (1. 東京理科大学理学部、2 科学技術振興機構
CREST)、「吸着タンゲステン表面の仕事関数に関する第一原理計算」、*第24回表面
科学講演大会*、早稲田大学総合学術情報センター国際会議場 (東京都新宿区)、11/8,
2004
15. 野口智之^{1,2}、中岡紀行^{1,2}、洗平昌晃^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1. 東京理科大学理学部、2 科
学技術振興機構 CREST)、「時間依存密度汎関数法による有機分子の光学吸収スペク
トル」、*第24回表面科学講演大会*、早稲田大学総合学術情報センター国際会議場 (東
京都新宿区)、11/8, 2004
16. 近藤尚明^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1. 東京理科大学理学部、2 科学技術振興機
構 CREST)、「分子動力学法による金属ナノワイヤーの熱的性質」、*第24回表面科学
講演大会*、早稲田大学総合学術情報センター国際会議場 (東京都新宿区)、11/8, 2004
17. 古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1.科学技術振興機構 CREST、2.東京大学大学院工学系研
究科)、「Al 原子鎖の有限バイアスでの電気特性 II –原子鎖と電極の相互作用によ
る効果–」、*日本物理学会第60回年次大会*、東京理科大学野田キャンパス(野田市)、
3/24, 2005
18. 田中博郎¹、渡辺一之^{1,2} (1. 東京理科大学理学部、2 科学技術振興機構 CREST)、「第
一原理計算によるタンゲステン表面の吸着子構造と仕事関数の相関」、*日本物理学会
第60回年次大会*、東京理科大学野田キャンパス(野田市)、3/24, 2005
19. 門平卓也^{1,2}、田中倫子^{1,2}、古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1. 東京大学大学院工学系研究
科、2. 科学技術振興機構 CREST)、「ジェリウム薄膜における電気伝導の解析」、*日
本物理学会第60回年次大会*、東京理科大学野田キャンパス(野田市)、3/24, 2005
20. 鈴木良治^{1,2}、古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1. 東京大学大学院工学系研究科、2. 科学技
術振興機構 CREST)、「強束縛法による多探針STM電気伝導のシミュレーション」、
日本物理学会第60回年次大会、東京理科大学野田キャンパス(野田市)、3/24, 2005
21. 宋応文^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1. 東京大学大学院工学系研究科、2. 科学技術振興機構 CREST)、
「Grid におけるナノ物性計測シミュレータの性能評価」、SACSIS 2005 - 先進的計算基
盤システムシンポジウム、つくば国際会議場・エポカルつくば(つくば市)、5/19, 2005
22. 門平卓也^{1,2}、田中倫子^{1,2}、古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1. 東京大学大学院工学系研究
科、2. 科学技術振興機構 CREST)、「原子シートの電気伝導」、2005 年日本物理学会
秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)、9/21, 2005

23. 田中倫子^{1,2}、古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1. 東京大学大学院工学系研究科、2. 科学技術振興機構 CREST)、「NC-AFM 探針-試料間に誘起する変位電流によるジュール熱の第一原理」、2005 年日本物理学会秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)、9/21, 2005
24. 古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1. 東京大学大学院工学系研究科、2. 科学技術振興機構 CREST)、「Al 原子鎖の有限バイアスでの電気特性Ⅲー不純物による効果ー」、2005 年日本物理学会秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)、9/21, 2005
25. 中村泰弘^{1,2}、田中倫子^{1,2}、古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1. 東京大学大学院工学系研究科、2. 科学技術振興機構 CREST)、「ジェリウム電極に働く力の電極間距離およびバイアス電圧依存性の第一原理計算による解析」、2005 年日本物理学会秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)、9/21, 2005
26. 王中長^{1,2}、門平卓也^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1. 東京大学大学院工学系研究科、2. 科学技術振興機構 CREST)、「Density Functional Study of Electronic Structure and Conductance of Ag-Ag₂S-Ag System」、2005 年日本物理学会秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)、9/20, 2005
27. 山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、2 科学技術振興機構 CREST)、「フラレン架橋の非弾性電子輸送と分子運動制御」、2005 年日本物理学会秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)、9/21, 2005
28. 洗平昌晃^{1,2}、相馬聡文^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、2 科学技術振興機構 CREST)、「時間依存密度汎関数法とリカージョン伝達行列法による電界電子放射現象の解析」、2005 年日本物理学会秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)、9/21, 2005
29. 中村泰弘^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1. 東京大学大学院工学系研究科、2. 科学技術振興機構 CREST)、「第一原理計算によるジェリウム電極間力の解析:電極間距離およびバイアス電圧依存性」、日本表面科学会講演大会、大宮ソニックシティ(さいたま市)、11/17, 2005
30. 中村泰弘^{1,2}、門平卓也^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1. 東京大学大学院工学系研究科、2. 科学技術振興機構 CREST)、「ジェリウム電極に働く力の電極間距離およびバイアス電圧依存性の第一原理計算による解析 II」、日本物理学会 61 回年次大会、愛媛大学城北キャンパス (松山市)、3/30, 2005
31. 古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1. 東京大学大学院工学系研究科、2. 科学技術振興機構 CREST)、「第一原理計算による電極表面ナノ構造の静電容量」、日本物理学会 61 回年次大会、愛媛大学城北キャンパス (松山市)、3/3, 2005
32. 古家真之介、渡邊聡 (東京大学大学院 工学系研究科、(独)科学技術振興機構)、「Al 原子鎖の電気特性に不純物原子が与える影響」、日本物理学会 61 回年次大会、愛媛大学城北キャンパス (松山市)、3/30, 2005
33. 洗平昌晃^{1,2}、相馬聡文^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、2 科学技術振興機構

- CREST)、「炭素ナノ構造からの電界電子放出に関する第一原理計算」、日本物理学会 61 回年次大会、愛媛大学城北キャンパス (松山市)、3/30, 2005
34. 中澤義基^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「空間分割密度汎関数法による二重接合系電子状態の解析」、日本物理学会 61 回年次大会、愛媛大学城北キャンパス (松山市)、3/30, 2005
35. 野口智之^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「グラファイトリボンの光学吸収スペクトル計算」、日本物理学会 61 回年次大会、愛媛大学城北キャンパス (松山市)、3/30, 2005
36. 近藤尚明^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2}、宋応文^{2,3} (1 東京理科大学 理学部、² 東京大学大学院 工学系研究科、³ 科学技術振興機構 CREST)、「カーボンナノチューブを伝導するフォノン波束の分子動力学シミュレーション」、日本物理学会 61 回年次大会、愛媛大学城北キャンパス (松山市)、3/30, 2005
37. 多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「第一原理グリーン関数法による単一分子接合の NMR 化学シフト計算」、日本物理学会秋季大会、千葉大学西千葉キャンパス(千葉市)、9/25, 2006 年
38. 野田真史^{1,2}、C. Fischer³、門平卓也^{1,2}、G. Ceder³、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST、³MIT)、「第一原理計算による Au/Si(111) 微斜面の安定構造評価」、日本物理学会秋季大会、千葉大学西千葉キャンパス(千葉市)、9/25, 2006 年
39. 洗平昌晃^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「電界電子放射により表面原子に働く力の第一原理計算」、日本物理学会秋季大会、千葉大学西千葉キャンパス(千葉市)、9/25, 2006
40. 諸岡雅弘^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「グラファイトリボン中の局所欠陥による完全フォノン反射と渦熱流」、日本物理学会秋期大会、千葉大学西千葉キャンパス(千葉市)、9/25, 2006
41. 中澤義基^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「局在基底密度汎関数法+非平衡グリーン関数法によるカーボンナノチューブ・デバイスの電気伝導解析」、日本物理学会秋季大会、千葉大学西千葉キャンパス(千葉市)、9/25, 2006
42. 野田真史^{1,2}、C. Fischer³、門平卓也^{1,2}、G. Ceder³、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST、³MIT)、「Si (775) 表面上に形成された Au/Si (111) 5×2 構造の安定性評価」、日本物理学会 2007 年春季大会、鹿児島大学郡元キャンパス (郡元市)、3/20, 2007 年
43. 田中倫子^{1,2}、古家真之介^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「原子点接触構造のキャパシタンスとコンダクタンス」、日本物理学会 2007 年春季大会、鹿児島大学郡元キャンパス (郡元市)、3/20, 2007 年

44. 戸塚英臣^{1,3}、渡邊聡^{2,3} (¹ 日本大学理工学部物理学科、² 東京大学大学院工学系研究科、³ 科学技術振興機構 CREST)、「Si(100)表面の理論研究：トンネルコンダクタンスと局所トンネル障壁高さ」、日本物理学会 2007 年春季大会、鹿児島大学郡元キャンパス (郡元市)、3/20, 2007
45. 俵有央^{1,2}、松山登志也^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (¹ 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「電極間分子架橋系の電流特性における溶媒効果に関する理論的研究」、日本物理学会 2007 年春季大会、鹿児島大学郡元キャンパス (郡元市)、3/20, 2007
46. 洗平昌晃^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (¹ 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「電界電子放射により表面原子に働く力の第一原理計算 II」、日本物理学会 2007 年春季大会、鹿児島大学郡元キャンパス (郡元市)、3/20, 2007
47. 中澤義基^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (¹ 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「ゲート電圧によるカーボンナノチューブの電気伝導制御」、日本物理学会 2007 年春季大会、鹿児島大学郡元キャンパス (郡元市)、3/20, 2007
48. Yvan Girard^{1,2}, Takahiro Yamamoto^{1,2}, Kazuyuki Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Current Induced Forces on Adatoms on Carbon Nanotubes”, 日本物理学会 2007 年春季大会、鹿児島大学郡元キャンパス (鹿児島市郡元市)、3/20, 2007
49. 相馬聡文^{1,3}、小川真人¹、山本貴博^{2,3}、渡辺一之^{2,3} (¹ 神戸大学工学部、² 東京理科大学理学部、³ 科学技術振興機構 CREST)、「グラファイトリボンの電気伝導におけるゲート電極の効果」、日本物理学会 2007 年春季大会、鹿児島大学郡元キャンパス(郡元市) 、3/20, 2007
50. Yvan Girard^{1,2}, Takahiro Yamamoto^{1,2}, Kazuyuki Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Current-Induced Forces on Adatoms on Metallic and Semiconducting Carbon Nanotubes”, 第 33 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム、九州大学病院キャンパス百年講堂 (福岡市)、6/12, 2007
51. Toru Takahashi^{1,2}, Takahiro Yamamoto^{1,2}, Kazuyuki Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “Phonon Wavepacket dynamics simulation on graphene nanoribbon junctions”, 第 33 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム、九州大学病院キャンパス百年講堂 (福岡市)、6/12, 2007
52. 諸岡雅弘^{1,2}、高橋徹^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (¹ 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「グラフェンナノリボンのフォノン伝導に及ぼす SW 欠陥の影響－非平衡グリーン関数法と波束法による解析－」、日本物理学会第 62 回年次大会、北海道大学(札幌市)、9/22, 2007
53. Yvan Girard^{1,2}, Takahiro Yamamoto^{1,2}, Kazuyuki Watanabe^{1,2}, (¹Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST), “ Forces on Adatoms Adsorbed on Conductive Carbon

- Nanotubes”, 日本物理学会第 62 回年次大会、北海道大学(札幌市)、9/22, 2007
54. 柴田紗知子^{1,2}、中村泰弘、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「ナノスケール間隔の電極に働く力のバイアス電圧依存性に関する第一原理計算」、日本物理学会第 62 回年次大会、北海道大学(札幌市)、9/22, 2007
 55. 田中倫子¹、古家真之介²、渡邊聡^{2,3} (1 日本大学理工学部、² 東京大学大学院工学系研究科、³ 科学技術振興機構 CREST)、「第一原理計算による Al ポイントコンタクトの電気伝導特性」、日本物理学会第 62 回年次大会、北海道大学(札幌市)、9/22, 2007
 56. 寺澤麻子^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「密度汎関数強束縛法を用いた多端子伝導シミュレータの開発」、日本物理学会第 62 回年次大会、北海道大学(札幌市)、9/22, 2007
 57. 西村史生^{1,2}、斉田卓也¹、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2}、Eduardo Hernandez³ (1Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST, ³Institut de Ciència de Materials de Barcelona - CSIC Campus de Bellaterra)、「ナノピーポッドと多層カーボンナノチューブの熱伝導に関する分子動力学シミュレーション」、第 27 回表面科学講演大会、東京大学生産技術研究所 コンベンションホール (東京都目黒区)、11/2, 2007
 58. 俵有央^{1,2}、多田朋史^{1,2}、渡邊聡^{1,2} (1 東京大学大学院工学系研究科、² 科学技術振興機構 CREST)、「溶液中単分子架橋の電気特性の理論解析」、第 27 回表面科学講演大会、東京大学生産技術研究所 コンベンションホール (東京都目黒区)、11/2, 2007
 59. 尾澤佳世^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2}、渡邊聡^{2,3} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST、³ 東京大学大学院工学系研究科)、「分子架橋のアドミッタンスに関するタイトバインディング計算」 日本物理学会第 63 回年次大会、近畿大学本部キャンパス(東大阪市)、3/24, 2008
 60. 西村史生^{1,2}、斉田卓也¹、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2}、Eduardo Hernandez³ (1Tokyo Univ. of Science, ²CREST JST, ³Institut de Ciència de Materials de Barcelona - CSIC Campus de Bellaterra)、「多層カーボンナノチューブとナノピーポッドの熱伝導に関する非平衡分子動力学計算」 日本物理学会第 63 回年次大会、近畿大学本部キャンパス(東大阪市)、3/24, 2008
 61. 高橋徹^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「多層カーボンナノチューブの熱伝導に関する波束打ち込みシミュレーション」、日本物理学会第 63 回年次大会、近畿大学本部キャンパス(東大阪市)、3/24, 2008
 62. 早川健^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興機構 CREST)、「カーボンナノチューブの光誘起電気伝導計算」、日本物理学会第 63 回年次大会、近畿大学本部キャンパス(東大阪市)、3/24, 2008
 63. Yvan Girard^{1,2}、山本貴博^{1,2}、渡辺一之^{1,2} (1 東京理科大学理学部、² 科学技術振興

機構 CREST)、「Defect-induced spin-polarized electric current in carbon nanotubes」、日本物理学会第 63 回年次大会、近畿大学本部キャンパス(東大阪市)、3/24, 2008

(4)特許出願

①国内出願 (0 件)

ただし、局所トンネル障壁高さ計測のシミュレーション方法について 1 件出願準備中。

②海外出願 (0 件)

(5)受賞等

① 受賞

・ 野田 真史

Young Scientist Awards

"Tight-Binding Calculation of Electrical Properties of a Single Molecule Connected to a Few Semi-Infinite Electrodes", IUMRS-ICAM 2003, Pacifico Yokohama, Conference Center, Oct. 10, 2003.

・ 古家 真之介

Poster Award of 3rd COE 21 International Symposium on Human-Friendly Materials Based on Chemistry, Nov. 2005.

・ 山本 貴博

平成 18 年電気学会 C 部門 優秀論文発表賞 「カーボンナノチューブの熱伝導」
平成 19 年 9 月 14 日

・ 山本 貴博

第 2 回 (2008 年) 日本物理学会若手奨励賞 「ナノカーボン物質のフォノン輸
送理論」平成 20 年 3 月 23 日

② 新聞報道

・ 平成 15 年 9 月 8 日 日刊工業新聞

「試料表面ナノ構造物 非接触 AFM 像原子レベルで解明」
成蹊大と東大観察前の予測も可能

・ 平成 15 年 9 月 10 日 日刊工業新聞

「アルミ表面の電流の違い～電子の伝わり方が原因」
東大と日大シミュレータで解明

・ 平成 19 年 7 月 29 日科学新聞

「科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 CREST 研究成果から」
～開発したシミュレータを使って局所ポテンシャル障壁を評価～

7 研究期間中の主な活動

ワークショップ・シンポジウム等

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2002年 12月10日	第1回チームミーティング	東京大学工学部 4号館	10名	研究進捗状況報告とディスカッション
2003年 1月23日	第2回チームミーティング	東京大学工学部 4号館	11名	研究進捗状況報告とディスカッション
2003年 2月27日	研究チーム主催 シンポジウム「第 1回ナノ物性計 測ミニワークシ ョップ」	東京大学工学部 4号館	30名	酒井明教授・黒川修助手(京都大学)および中岡紀行氏・田中倫子氏・戸塚英臣氏(本チームメンバー)による講演・議論を行う。
2003年 4月15日	第3回チームミーティング	東京理科大学理 学部渡辺研究室	16名	研究進捗状況報告とディスカッション
2003年 6月24日	第4回チームミーティング	東京大学工学部 4号館	14名	研究進捗状況報告とディスカッション
2003年 10月21日	第5回チームミーティング	東京大学工学部 4号館	15名	研究進捗状況報告とディスカッション
2004年 2月27日	第6回チームミーティング	東京大学工学部 4号館	18名	研究進捗状況報告とディスカッション
2004年 6月7日	第7回チームミーティング	東京大学工学部 4号館	16名	研究進捗状況報告とディスカッション
2004年 7月27日	セミナー	東京理科大学	12名	Gang Zhang氏(シンガポール国立大・物理学科)によるセミナーとディスカッション
2004年 10月19日	第8回チームミーティング	東京大学工学部 4号館	15名	研究進捗状況報告とディスカッション
2005年 1月12日	第9回チームミーティング	東京大学工学部 4号館	16名	研究進捗状況報告とディスカッション
2005年 2月4日	セミナー	東京大学工学部 4号館	10名	真砂啓氏(大阪大・産業科学研究所)によるセミナーとディスカッション
2005年 3月19日	第10回チームミーティング	東京大学工学部 4号館輪講室	18名	研究進捗状況報告とディスカッション
2005年 4月8日	第11回チームミーティング	東京大学工学部 4号館216B室	22名	研究進捗状況報告とディスカッション
2005年 5月20日	第12回チームミーティング	東京大学工学部 4号館216A室	19名	研究進捗状況報告とディスカッション
2005年 7月26日	第13回チームミーティング	東京大学工学部 4号館216A室	21名	研究進捗状況報告とディスカッション
2005年 9月12日	第14回チームミーティング	東京大学工学部 4号館216B室	24名	研究進捗状況報告とディスカッション
2005年 10月18日	第15回チームミーティング	東京大学工学部 4号館216A室	22名	研究進捗状況報告とディスカッション

2006年 2月21日	第16回チームミーティング	東京大学工学部 4号館216A室	22名	研究進捗状況報告とディスカッション
2006年 5月9日	第17回チームミーティング	東京大学工学部 4号館216B室	19名	研究進捗状況報告とディスカッション
2006年 7月11日	第18回チームミーティング	東京大学工学部 室6号館4階演習室A	19名	研究進捗状況報告とディスカッション
2006年 10月17日	第19回チームミーティング	東京大学工学部 4号館216B室	19名	研究進捗状況報告とディスカッション
2006年 12月25日	第20回チームミーティング	東京理科大学理学部渡辺研究室	18名	研究進捗状況報告とディスカッション
2007年 4月26日	第21回チームミーティング	東京大学工学部 4号館216室	19名	研究進捗状況報告とディスカッション
2007年 7月27日	第22回チームミーティング	東京大学工学部 4号館205室	20名	研究進捗状況報告とディスカッション
2007年 9月28日	第23回チームミーティング	東京大学工学部 4号館205室	18名	研究進捗状況報告とディスカッション
2007年 12月27日	第24回チームミーティング	東京理科大学14号館1151室	18名	研究進捗状況報告とディスカッション

8 結び

本研究プロジェクトの約5年間の研究活動を振り返り、研究テーマの4本の柱である「走査プローブ計測シミュレータの開発」「多端子電気特性計測シミュレータの開発」「キャパシタンス計測シミュレータの開発」「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れを用いた理論解析」のすべてにおいて、多くの成果を得ることができたことを改めて実感した。境界マッチング密度汎関数法の基本性能の向上やケルビン力顕微鏡シミュレータ等において当初目標を完全には達成できなかった点もある一方、「局所物理現象の解析」を中心に当初予想していなかった興味深い成果を多数得ることができ、総合的に見た目標達成度はかなり高いと考えている。

本研究プロジェクトでは、ナノスケールの電気特性の理論解析について、多くの研究者が活発に研究を進めている電極間原子鎖・単分子架橋の伝導度の解析よりも、他の研究者が余り目を向けていないが将来重要となると思われるようなテーマを重点に取り上げる戦略をとった。ナノ構造のキャパシタンスや熱伝導の解析はその代表的な例であるが、どちらも多くの注目を集め、多数の招待講演や解説執筆の依頼を受けた。また、局所トンネル障壁計測の走査像シミュレーション、ケルビン力顕微鏡の量子論的シミュレーション等、世界で初めてといえる成果も多数得ることができた。一方、重点から意図的にはずした電極間原子鎖・単分子架橋の伝導度の問題においても、フォノン非弾性散乱の影響の解析や溶媒分子の影響の解析等において、タイムリーに有意義な知見を得ることができた。以上の点から、本研究プロジェクトで得られた成果の意義は高いといえよう。

ナノ物性計測の実験は、この5年間に一段と進歩した。その中で、ナノ物性計測シミュレーションの意義・有用性もますます大きくなっているように思われる。同時に、扱う対象系や定量性の点で、実験がシミュレーションに求めるものも一段と高くなっているように感じる。今後のナノ物性計測シミュレーション

シミュレーション研究においては、まずより多くの原子を含む対象を扱え、プローブ形状等についても考慮できるような、すなわち全体としてより大きな系を扱えるようなシミュレータの開発が必要であろう。そのためには、マルチスケールの方法論を含め、一段と高速な方法論の開発が望まれる。次に、本研究ではシミュレータに組み入れず、別項目で解析した「局所物理現象」をもシミュレータに組み込んでいくことが、今後の方向として重要である。今後の課題として重要なもう一つの点は、本研究においても足を踏み入れつつあったものだが、非定常なダイナミクス、例えばバイアス電圧を印加し始めた際の電子の挙動の変化や電流による原子移動の確率的プロセス等の考慮である。

また本研究の今後の研究展開は、必ずしもナノ物性計測に限るものではない。ナノスケールデバイスの動作の解析や設計指針の導出、さらにはナノスケール集積回路の動作解析といった課題に展開していくことも可能と考えている。ここでの「デバイス」は必ずしもコンピュータの演算素子・メモリに限らず、燃料電池等の電気化学的なシステムや生体分子計測のためのデバイス・システム等も含む。このような研究課題への注目は世界的に高まっているように感じるが、本研究の成果は、これらの課題に取り組む上でも大変有用な基盤となる。現在の成果で直ちにこれらの課題を解決できるわけではなく、今後研究を一層発展させる必要があるが、その際の重要課題は、上記のナノ物性計測シミュレーションの今後の課題と同様である。

研究代表者としては、研究期間の後半に学内の管理業務との両立の点でやや心残りがあり、この点をうまく進めていけば、原著論文発表等がもう少し増えたと思う。しかし、チーム全体としては、おおむねうまく研究遂行できたように思う。この点については、東京理科大学渡辺一之教授のグループが多くの興味深い成果を挙げ、また同グループとの連携によりチーム全体の研究が活性化したことが大変うまく進んだことが大きなポイントといえる。この点で渡辺一之教授には特に感謝している。また、助手(助教)・ポスドクレベルの研究者が単に研究成果を挙げただけでなく、多数の新しいアイデアを提案してくれたことは大変喜ばしかった。大学院生諸君も多くの成果を挙げ、また積極的に学会発表等に取り組んでくれたことと合わせ、本研究プロジェクト実施が若手研究者の育成に大いに役立ったと感じている。

戦略的創造研究推進事業は、他の大部分の研究開発事業に比べ、研究開発の実態に即したフレキシブルな対応をしやすい点で、大変研究を進めやすいと感じている。本研究で購入した計算機クラスター(写真1参照)、雇用した研究員・事務員、グラフィカルユーザーインターフェイス外注等々、本



写真 1: 本研究プロジェクトで購入した計算機クラスター。東京大学グループ(上図)および東京理科大学グループ(下図)の物。

事業による研究費のサポートは研究遂行上大変役立った。事務処理の面でも、きめ細かいサポートを受けられたと感謝している。近年、一部の研究者の不祥事が続いたため、フレキシブルな運営が難しくなる方向にあるのは大変残念である。研究者側が責任を自覚して取り組んでいくことが大切であるのはもちろんであるが、是非本事業の利点を失わずに研究開発の支援を今後も続けていただきたいと思っている。

最後に戦略的創造研究推進事業の関係諸氏、特に「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域の土居範久研究総括および研究事務所の方々と、本研究チームの全てのメンバー(一部の集合写真を写真2として添付)に感謝の意を表し、本報告書の結びとする。



写真2：本チームのメンバー（2007年9月28日チームミーティングにて）。