

セミナーのお知らせ

ナノからマイクロスケールまでの電子伝導シミュレーション ～波束ダイナミクスによるアプローチ～

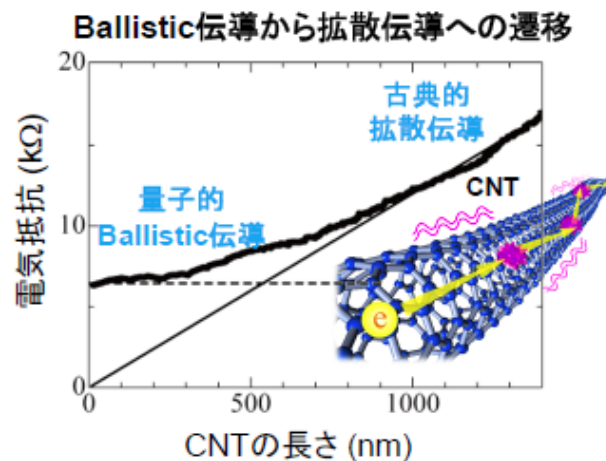
石井 宏幸 (筑波大学 数理物質系 物理工学域)

2012年10月26日(金) 15:30-17:00

東京理科大学 九段校舎北棟3階 共同研究室2

原子・分子レベルでデバイス構造を制御することが可能になった現在、エレクトロニクスの更なる発展のためには、デバイスの電気伝導物性を原子スケールから理解することが必要不可欠である。伝導物性を理解するためには一般に、電子が散乱されずに進む距離である平均自由行程とデバイスサイズの大小関係が重要と言われている。デバイスサイズが平均自由行程より十分大きい場合、電子はデバイス内で何回も散乱され、古典論的「拡散伝導」となる。これは現象論であるオームの法則に対応し、ボルツマン方程式を用いて説明できる。一方、デバイスサイズが平均自由行程よりも十分小さくなると、電子は散乱されずにデバイスを通る「弾道伝導」となり、コンダクタンスの量子化が観測される。これはランダウアー公式を用いて説明される。

このように従来、弾道伝導極限と拡散伝導極限でそれぞれ異なる理論が用いられてきた。ところが最近のシリコンデバイス、ナノカーボン系デバイスでは、平均自由行程とデバイスサイズが同程度で、弾道極限と拡散極限の中間に位置すると考えられる。このような中間領域の伝導現象を記述できる理論は存在しないため、私達は、波束の量子論に基づく時間発展計算と分子動力学を組み合わせた「時間依存波束拡散法」の開発を行っている。この手法は、時間発展計算を高速化することにより量子論に基づきながらナノスケールからマイクロスケールまで扱える計算法である。これをカーボンナノチューブなどに適用し、伝導における量子論から古典論領域への遷移（弾道伝導から拡散伝導の遷移）などを議論してきた。講演では、これらの研究結果について紹介する。



問い合わせ：山本貴博 (工学部第一部・教養教室／工学系研究科・電気工学専攻)