

ナノ物性計測シミュレータの開発

研究代表者：

東京大学大学院工学系研究科

渡邊聡

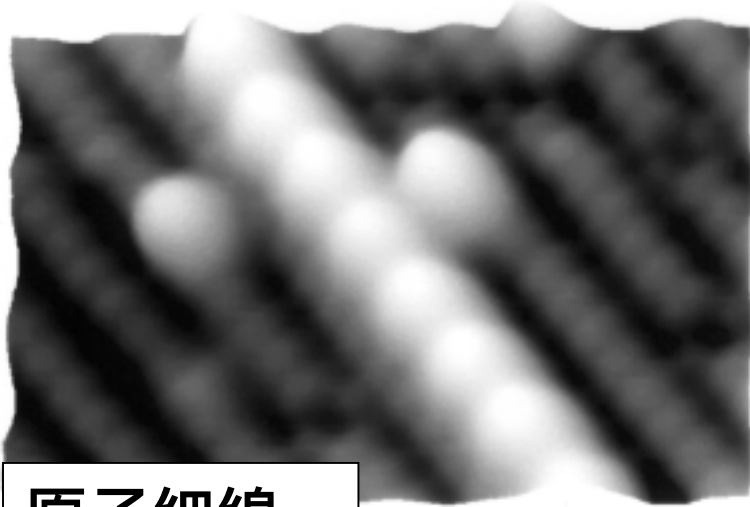
主な共同研究者：

東京理科大学理学部物理学科

渡辺一之

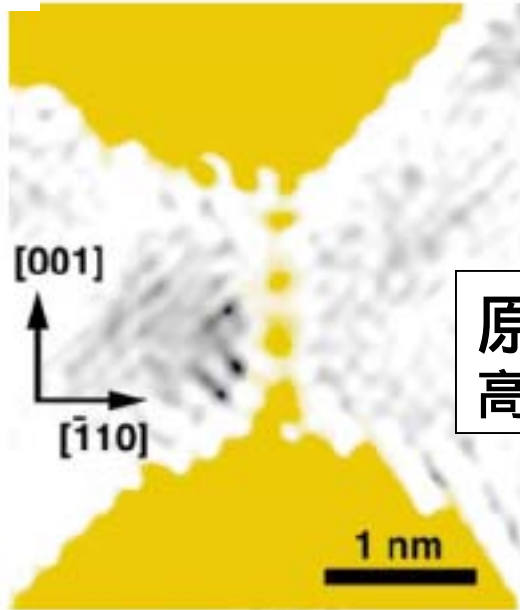
研究背景(1)

ナノ物性計測の重要性

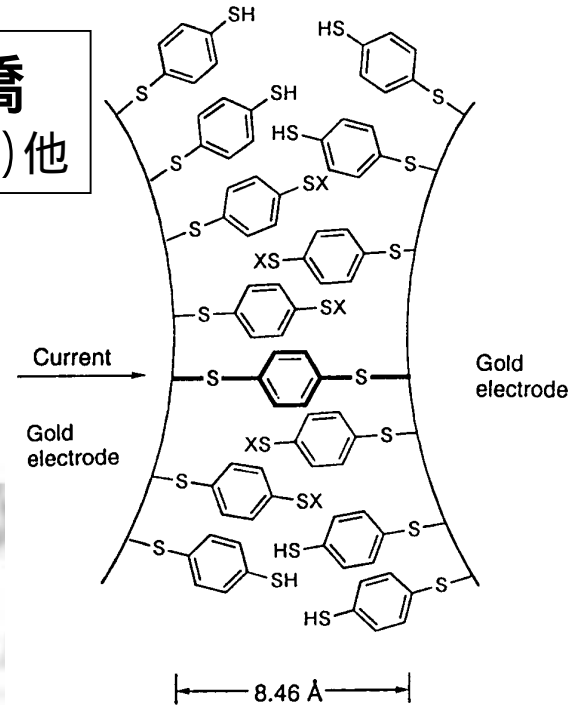


原子細線
橋詰(日立)他

作製されたナノ構造
の局所物性を知る
ことが重要課題
ナノ物性計測



単分子架橋
Reed(Yale大)他



原子架橋
高柳(東工大)他

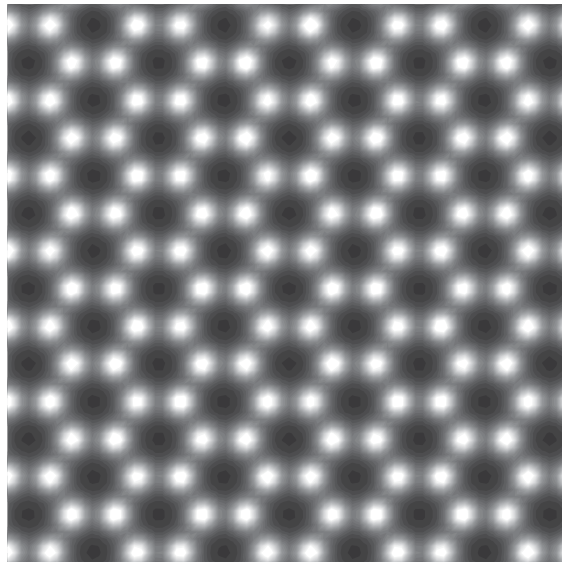
研究背景(2)

ナノ物性計測におけるシミュレーションの重要性

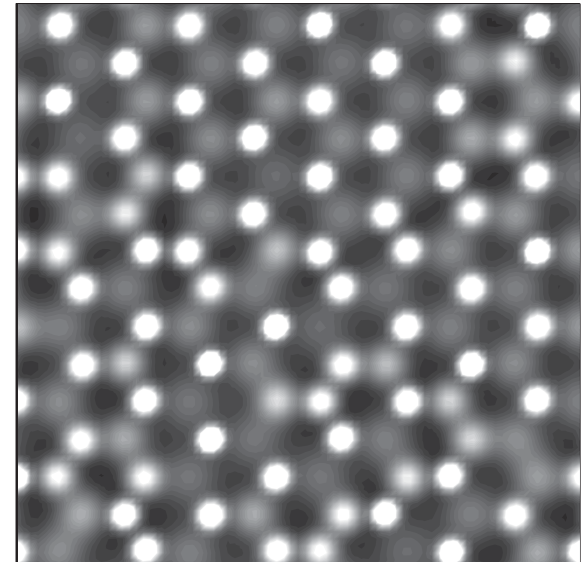
実験結果の解釈が難しくなっている - プローブや外場との相互作用のため。直感や簡単なモデル
しばしば誤った解釈

**シミュレーションによる
解析支援が重要**

例) 銀吸着シリコン
表面の室温STM像



実験とよく一致する像



モンテカルロ計算の
スナップショットの像

10年前の理解: 確定した安定構造に対応した像

現在の理解: 不規則に揺らぐ表面構造の時間平均像

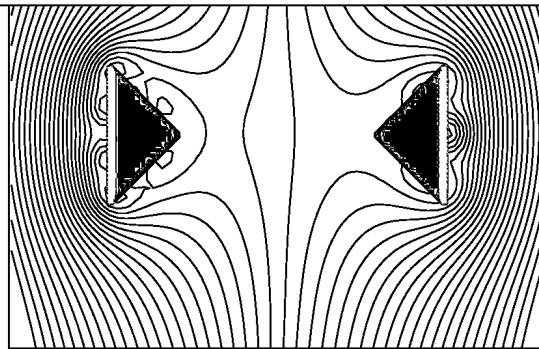
本グループのこれまでの成果 (JST-CRESTの助成)

電場中の電子状態計算の方法・プログラム開発とその応用

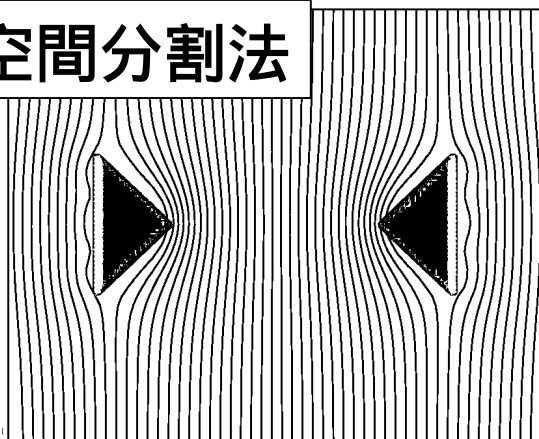
空間分割法 - 複数孤立物体系
一様電界中のシリウムピラミッド

半無限電極法 - 電流
微小突起の電界電子放出スペクトル

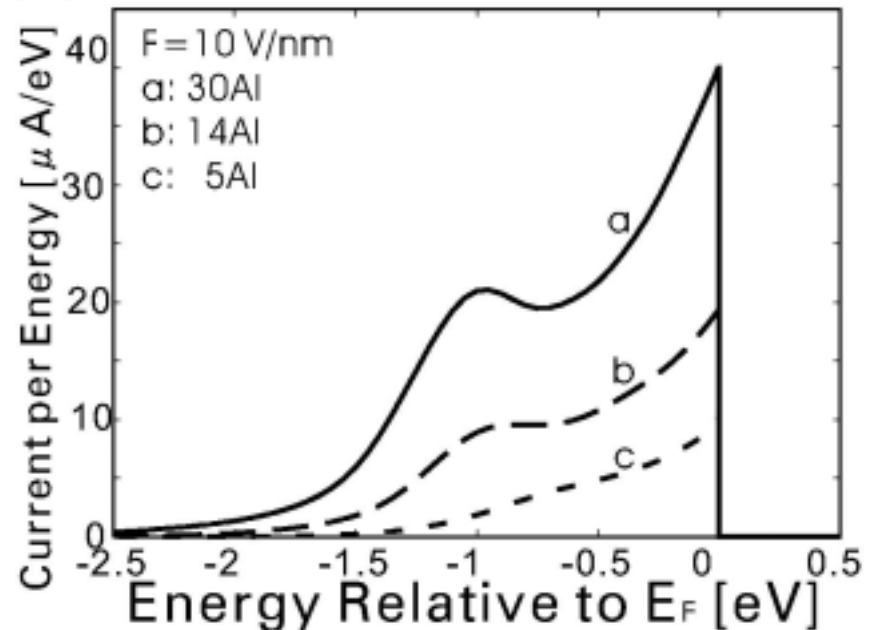
通常の方法



空間分割法



4.63nm



研究目的

ナノ物性計測の計測量を予測するシミュレータ の開発 特に電氣的刺激を印加する計測

- 重要かつ未発達な分野 / 本グループで方法論開発済

- 実験データ解析を支援するツール
- 微視的な物理現象やナノ構造物性と計測量との
相関の解明
 - 物性・物理現象に関する情報を計測量から信頼性高く
予測する解析手法の確立
- プローブや外場等との強い相互作用が集中する
局所領域における新規物理現象の探索
- 新しい計測手法の探索

研究構想

既存の成果

局所電界場
中の電子状態
計算プログラム

- 複数孤立
物体系
- 単一 & 複数半
無限電極系
など

本研究

小規模モデル系用
シミュレータ開発

- 既存プログラム + 計測手法別
モジュール -

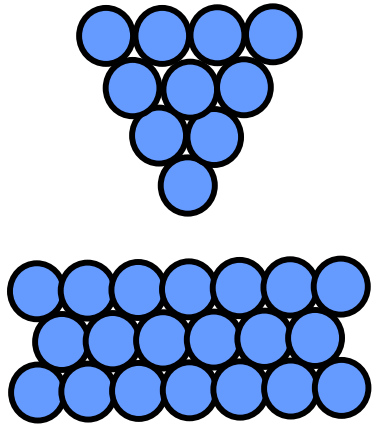


実用的ナノ物性計測
シミュレータ開発

- 大規模系対応のため
効率アップ・高速化 -

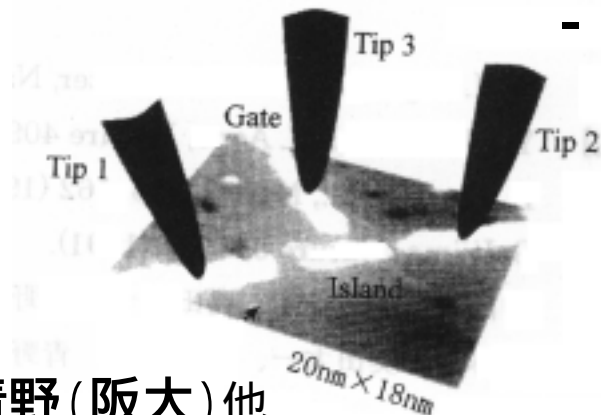
研究項目(1)

走査プローブ計測シミュレータ

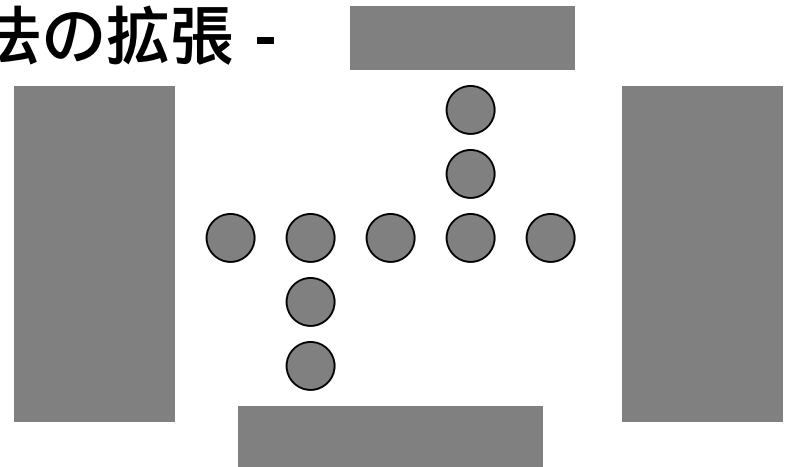


- 半無限電極法の応用 -
- ・局所トンネル障壁高さ計測のシミュレータ
(プローブ位置微小変化に対する電流変化)
- ・ケルビン力顕微鏡シミュレータ
(バイアス電圧微小変化に対する力変化)

多端子電気特性計測シミュレータ



- 半無限電極法の拡張 -



研究項目(2)

キャパシタンス計測シミュレータ

従来型半導体素子や単電子素子の特性を決める重要な量
キャパシタンス自体のシミュレーションが進行中。ミクロな電子状態とキャパシタンスとの関連が明らかになりつつある

計測量との関連をより明確化したシミュレータの開発

局所物理現象の計測への影響の解析

- ? 計測中にプローブ先端や試料の温度はどの程度変化するか
 - ? 計測中に原子構造はどの程度変化するか
 - ? これらの点が計測結果にどの程度影響するか
- いずれも現状では未解明 シミュレーションで解明
(方法論開発を含む)

研究項目間の関連性

既開発方法論の発展・展開 電気的
刺激を加えるナノ物性計測シミュレータ

走査プローブ計測

キャパシタンス計測

多端子電気特性計測

局所物理現象の計測への影響の解析
計測シミュレーションの信頼性向上

研究体制

渡邊聡 (東大・工)

- + 戸塚英臣 (日大・理工)
- + 研究員 宋応文、門平卓也
- + 事務員 安藤彩

渡辺一之 (東理大・理)

- + 研究員 山本貴博

走査プローブ計測シミュレータ

キャパシタンス計測シミュレータ

多端子電気特性計測シミュレータ

局所現象の計測への影響解析

実用的ナノ物性計測
シミュレータの開発

緊密な共同研究: それぞれが持つ
相補的な方法論を適所に用いる

期待される成果

- ・ ナノ物性計測シミュレータ
 - 小規模モデル系用 / より実用的なもの
 - 実験データ解析を支援するツールとして公開を目指す
- ・ 計測量と局所物理現象やナノ構造物性との相関の解明
 - 学問的な意義 / 実験データ解析を間接的に支援
- ・ 計測時の局所物理現象を解析するための方法論の整備
 - 既開発の方法論の整備・改良 + 新規方法論
- ・ プローブや外場等との強い相互作用が集中する局所領域における新規物理現象の発見
- ・ 新しい計測手法や最適計測条件等の提案