

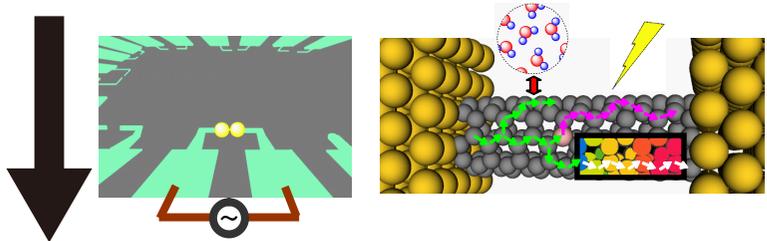
飛松啓司, 寺澤麻子, 山本貴博, 多田朋史, 渡邊聡

東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻



## 背景

ナノテクノロジーの隆盛と共に  
ナノ構造体・ナノデバイスの研究が盛んに。



ナノスケールにおける実験技術は  
進んできているものの、ナノサイズの  
試料の電気抵抗を精度よく測るための  
解析手法・理論が未だに確立されていない。

(接触抵抗・量子効果・端子の影響, etc.)



実験の状況を適切に再現する

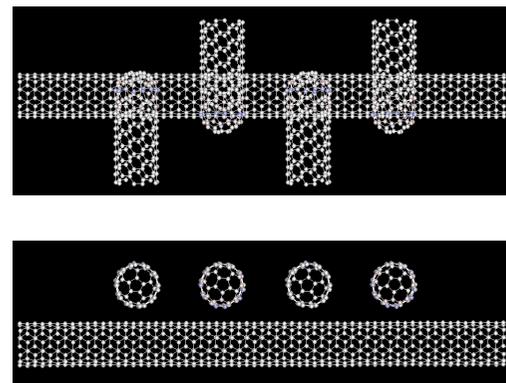
大規模シミュレーションによる解析と

計測技術への理論確立が強く望まれている。

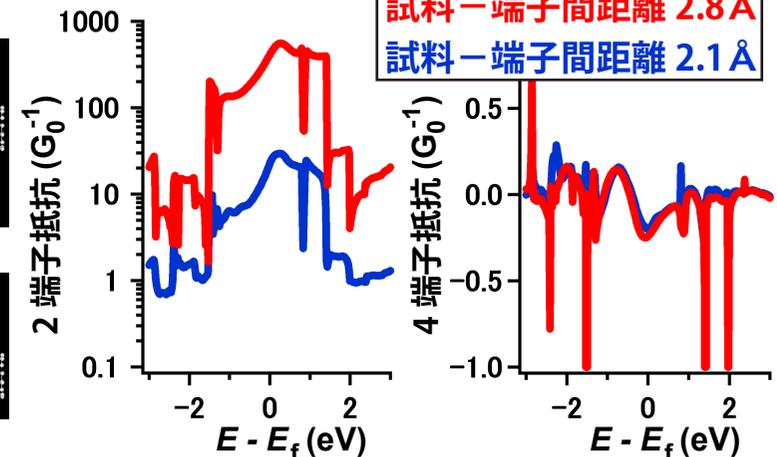
## 本研究：4端子法による電気特性計測を解析

- ✓ DFTB 法・Green 関数法・Mode matching 法<sup>1</sup>
- 第一原理計算のパラメータを用いて開放系の電子状態を高速計算
- ✓ Fermi 分布の連分数展開<sup>2</sup>・Extended Anderson 法<sup>3</sup>・MPI

1PE あたりの Green 関数の計算量を削減



カーボンナノチューブの4端子測定



2端子抵抗値

4端子抵抗値

(東京大学 HA8000 にて 16 ノード 256 並列で合計 4 時間の計算)

ナノスケールにおいても 4 端子抵抗値は 2 端子抵抗値に比べて  
試料・端子間距離 (接触抵抗) の影響を受けないことがわかった。  
また、抵抗値の振動などナノスケール特有の現象を確認し、  
これらの現象を詳細に解析する手がかりを得た。