

第一原理伝導計算による分子エレクトロニクス、不揮発性メモリ材料の理解

First-principles transport calculation and analysis of molecular electronics and nonvolatile memory cell.

中村恒夫

H. Nakamura

産業技術総合研究所ナノシステム研究部門

Nanosystem Research Institute, AIST, Umezono 1- 1-1, Tsukuba 305-8568

ナノ接合系、対向電極に挟まれたナノ構造体での電気伝導やエネルギー交換過程は、ナノエレクトロニクスや熱電変換デバイス^[1]など、様々な現象・機能の基礎過程の一つである。この過程を理論シミュレーションから理解し、物質材料設計へと繋げていくため、我々は電気伝導、熱伝導や電子-フォノン相互作用、**current-induced dynamics** を含めた、第一原理計算スキーム確立による、デバイスシミュレータ開発の努力を行っている。

第一原理計算の最も大きな利点は、計算に都合の良い特定の分子や材料を追い回すだけでなく、精密計測や材料開発の場において問題となる「実在系」に対して、その物性を予測、現象を解析できることにある。今回の発表では、分子エレクトロニクス、ナノエレクトロニクス材料それぞれについて、我々の開発している理論計算方法を応用した例について紹介する。

分子エレクトロニクスについては、分子合成、伝導度計測（公募班木口代表グループ）との共同研究による、単一分子に動的抵抗変化機構についてその成果を奉公する。また、ナノエレクトロニクス材料として、酸化還元型抵抗変化メモリ(**ReRAM**)セルをとりあげ、**Filament** モデルでの高抵抗状態(**HRS**)と低抵抗状態(**LRS**)について、酸素欠陥と界面酸化が**HRS/LRS** 比に及ぼす影響、**LRS** での非弾性電流まで含めた計算による、**ReRAM** 性能の温度依存性について議論を行う。

[1] H. Nakamura, T. Ohto, T. Ishida, and Y. “Thermoelectric Efficiency of Organometallic Complex Wires via Quantum Resonance Effect and Long-Range Electric Transport Property”, *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 1045 (2013)

