

## シミュレーションによる固体表面構造の研究

総合情報学部コンピュータシミュレーション学科  
矢城研究室

Keyword: 半導体表面, シミュレーション

### 1. 研究目的

固体素子の小型化など科学技術の進歩に伴い、固体内部とは大きく異なった表面特有の物性を知ることは非常に重要なものになってきている。本研究室では、計算機によるシミュレーションを用いて、様々な表面現象を理論的に説明する。

### 2. 研究内容

物質には全て表面というものが存在する。物質が小さくなってくると表面の占める割合が大きくなっていく。そうすると、物質内部の性質よりも表面の性質が大きく現れてくる。例えば、表面の原子配列は固体内部のそれとは対称性や周期性などが異なる。また、表面にゆっくりと飛んできた原子が表面に吸着したり、エネルギーのやりとりで、固体表面に吸着していた原子が表面から飛び出していくという現象が起きる。シリコンの表面に金原子を吸着させると、表面温度と金原子の吸着量によって、金原子が一行に並ぶという構造変化があることがわかっている。先に述べたように、半導体デバイスなどをより小型化していくためには、このような表面特有の性質を知ることは非常に重要なことになってくる。これらの現象を理論的に解明するために、現在、高性能になったコンピュータを駆使して表面特有の性質を解明する。

### 3. 応用の可能性

有機分子を吸着させた有機デバイスへの応用が考えられる。また、今後期待される分野として、金属原子が吸着した半導体表面構造が決定されると、その表面上に超伝導物質を結晶成長させるための情報が得られる。