

## ナノサイエンスとシミュレーション

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 : ナノ, シミュレーション, 半導体表面

### 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。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。本研究室では、コンピュータ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

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、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きている。シリコンなどの半導体表面に金属原子を吸着させると、表面温度や金属原子の吸着量によって、金属原子が一行に並ぶという構造変化を起こすことがわかっている。このような表面は、ある表面温度以下では絶縁体（電流が流れない）的に、それ以上では金属（電流が流れる）的に振る舞うことも実験的に知られている。これらの現象を解明するために、理論モデルを構築し、コンピュータを駆使してシミュレーションを行っている。

### 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。