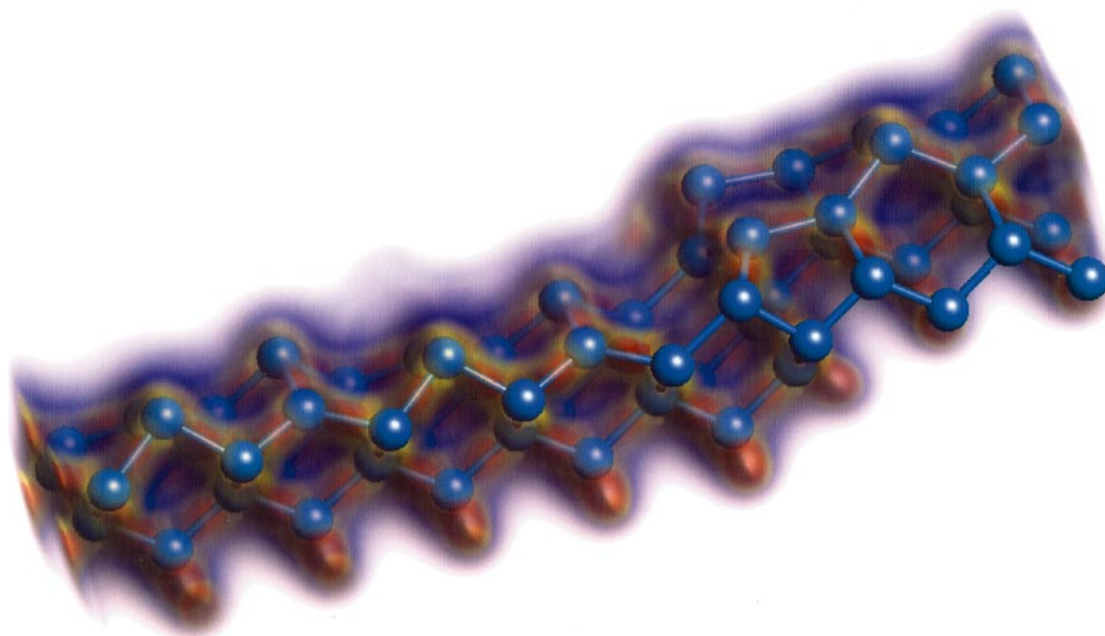


## First-Principles Quantum-Theoretical Approach and Microscopic Simulations

### 第一原理量子論的アプローチと 微視的シミュレーション

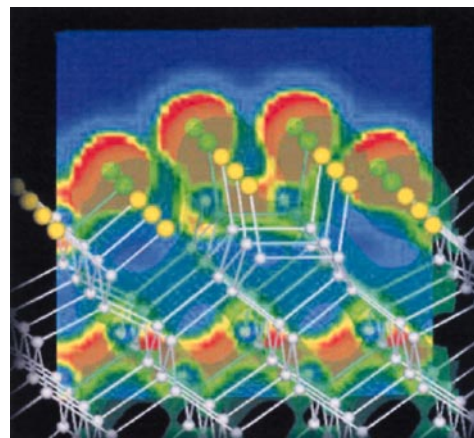
プロジェクトリ - ダ - 押 山 淳  
筑波大学 物理学系 教授



シリコン表面での原子スケールの階段（ステップ）構造と電子雲の分布

#### 1. 研究の目的

物には境界があります。気相との境界を表面とよび、別の物との境界を界面とよびます。その表面・界面は物質の中の方とは違う環境にあるので、表面・界面特有の現象が期待されます。また物ができる（結晶成長）ということは、物の境界が押し広げられるということであり、それは表面という舞台での原子反応の所産です。そうした物質の境界で、個々の原子がどのように振る舞い、物質が形成され、そして新しい物質の性質が決まっていくのかを、理論計算で解き明かしていくのが本プロジェクトの目的です。表面・界面での現象については、従来から多くの研究があります。しかし原子スケールで何が起きているのか、そしてその原子スケールでの素過程がマクロな物質の形態、機能とどのように結びついているのか、については我々は殆ど何も知りません。ミクロな素過程とマクロな現象の間のミッシング・リンクの発見、そしてそれに基づくマクロな現象のミクロな立場からの制御、これこそが本プロジェクトでのチャレンジです。ミクロな素過程を理論的に明らかにする手法がいわゆる第一原理計算です。それは経験的パラメータを排除し、量子力学の第一原理に立ち返った計算手法です。しかしそれは決してあるひとつの計算法ではありません。解明したい自然現象に最適な計算手法を創造し、現時点での最も信頼できる結果を、大規模数値計算によって導き出す、そうした営みのことを第一原理計算とよびます。従ってそれは計算機科学の発展とも不可分なものです。`原子スケール表面界面ダイナミクス`分野の他のプロジェクトと密接な協力関係を保ち、物質科学のフロンティアを押し広げるとともに、来世紀への新しい技術の芽を創り出すことを目指しています。



シリコン表面での臭素分子の吸着と解離の様子：原子構造と電子雲

## 2. 研究の内容

本プロジェクトでの研究は基本的に次のような要素から成っています。(a) 自然現象解明のための予想、(b) 最適計算手法の吟味と開拓、(c) 実際の現象への適用、(d) 得られた知見に基づく新現象の予言、の四つです。いずれにしてもコンピュータを相手の研究活動が大部分であり、高速なコンピュータ群とそれを結ぶネットワーク環境は、研究推進のためには不可欠の要素です。実際の研究は必ずしも筋書きどおりには進みませんし、むしろ予期せぬ事が起こることで、プレクスル- が得られることもしばしばあることです。現在進行中の研究テーマは以下のようなものです。

### (1) 半導体エピタキシャル成長の機構

半導体工業の現場では原子層を制御して微細な薄膜構造を形成することが行われています。しかし、良きにつけ悪きにつけ、予期せぬ形態の薄膜が出現します。例えば代表的な半導体であるSi表面での、ファセット(微小高指数面)の出現、また異種原子の導入によるエピタキシャル成長モードの改変(サファクタント効果)などは有名です。これらの現象の原因を探るために、表面での原子1個1個の吸着と拡散の機構を、密度汎関数法とよばれる第一原理計算で明らかにしました。原子ステップの存在とそのミクロな構造が、薄膜のマクロな形態の決定に重要であることが明らかになりつつあります。また第一原理計算によって明らかになったミクロな吸着・拡散機構をもとに、薄膜の形態そのものをコンピュータ上で予想する、量子論に基づくシミュレーションの研究も進めています。

### (2) 表面ナノ構造作成と新物性の基礎

近年、走査型のトンネル顕微鏡などを用いて、表面の原子スケールの構造を明らかにし、また原子操作(原子の引き抜きと再配置)によって、ナノ構造を形成することも盛んに行われています。しかしなぜそうした原子操作が可能であるのか、その物理的な機構は明らかになっていません。その解明のために、リカジョン・伝達法という新しい第一原理計算手法を開発し、原子操作のバイアス電圧依存性などの機構を明らかにしました。またそうして作成されたナノ構造の電子状態を調べ、量子伝導などの新現象の可能性を追及しています。

### (3) 高压化での相転移のシミュレーション

表面と同様に新物質の生成に適した環境として高压があります。外部圧力という異常な環境に原子群をおくことにより、新たな物質生成、物質相間の転移が期待されます。第一原理分子動力学法という手法により、グラファイト・ダイヤモンド転移、BCN化合物の構造転移の原子スケールでの機構を調べ、転移圧力などの予言をしました。実験グループとの協同でその予言を確かめたい、と考えています。

### (4) 炭素系新物質群の物性

フラレン、ナノチューブに象徴される、近年の炭素系新物質の発見は、物質科学に大きなインパクトを与えました。本プロジェクトではさらにその研究を発展させ、炭素及びケイ素によるフラレン構造、チューブ構造、さらにはそのハイブリッド構造の物性を第一原理計算から明らかにし、新機能を有する物質の探索を行っています。

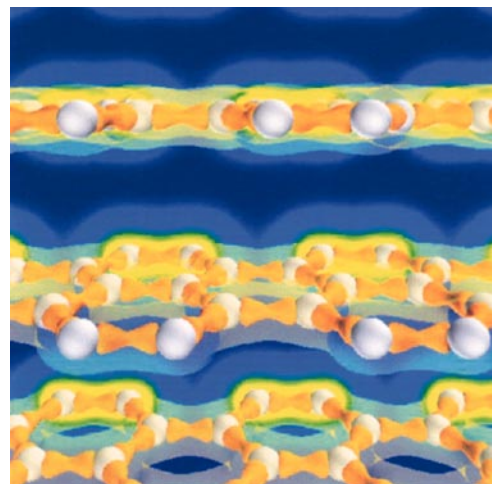
本プロジェクトではこのほかにも、半導体表面原子構造の解明、外部電場による表面原子移動効果、分子脱離のダイナミクス、大規模計算のためのオランダ新計算手法、などの研究が進められています。

## 3. 研究の体制

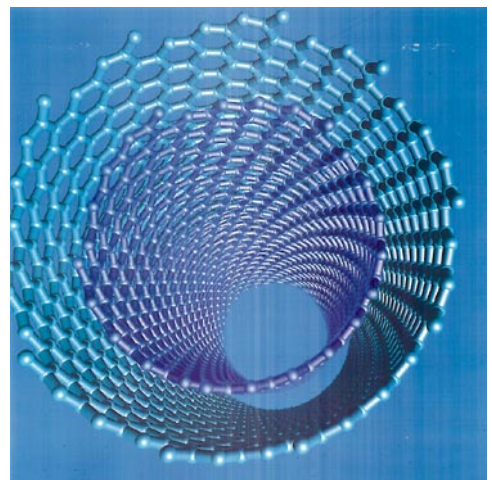
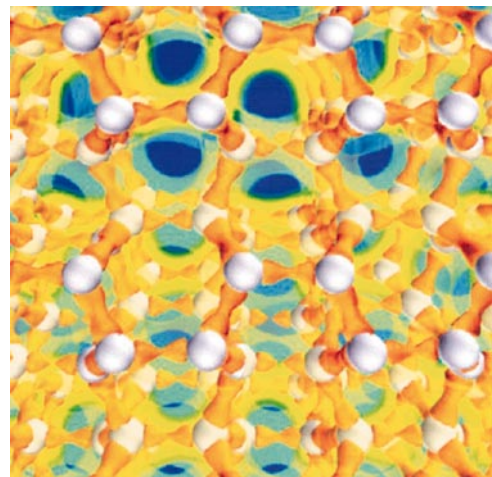
期 間：1996年10月～2001年3月

構 成：プロジェクトリーダー1名、コアメンバー3名、研究協力者12名(内学術振興会リサーチ・アソシエイト1名)で構成され、またそれぞれの研究室に属する大学院学生も研究に参加しています。

実施場所：主拠点は筑波大学ですが、他大学との協力方式でプロジェクトを進めています。東大物性研究所常行研究室及び大学院理学系研究科塚田研究室、東工大理学部斎藤研究室、が副拠点です。その他にも大学、民間を含む6箇所の研究機関との協同により研究が進められています。



低温高压でのグラファイト(上図)からダイヤモンド(下図)への相転移のシミュレーション



カーボン・ナノチューブの原子構造