

NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2023

講演概要集

AM-1 (11:00~11:40)

Si 量子井戸における谷分離の研究に対する第一原理計算の有用性について

林 稔晶¹、影島 博之²、登坂 仁一郎¹、西口 克彦¹ (¹NTT 物性基礎研、²島根大学)

光触媒による、水から分解した H 原子の拡散、H 原子の集合、そして H₂ 分子の生成を DFT+U 理論と遷移状態理論を基にして明らかにした。H₂ 分子の生成は水から分離した H 原子の共通 O 原子上への拡散・集合に始まり、熱励起を通さずに、H 原子のトンネル現象による H₂ 分子脱離として起きるといふ全体像が見えてきている。

AM-2 (11:40~12:10)

Pt(111)面上の CePt₂ 単原子層近藤格子の STM/STS 観察とその電子状態

小森 文夫 (東大生産技術研究所)

CePt₂ 層と Pt₃ 層が交互に積層された構造をもつ CePt₅ 結晶は、転移温度約 1 K の反強磁性体である。そして、その薄膜を Pt(111)面上にエピタキシャル成長させることができ、低次元近藤格子の可能性など電子状態と磁性に興味もたれている。講演では、Pt(111)面上に作製した CePt₂ 単層膜について、STM/STS を用いて測定した表面構造と電子状態の実験結果*、および Phase0 を用いた電子状態計算の結果と課題を紹介する。

*K. Ienaga et al., Phys. Rev. B **104**, 165419, 2021.

PM1-1 (13:10~13:40)

Cu 基板上 hBN の CVD 成長の理論研究

今村 僚、影島 博之 (島根大院自然科学)

極薄の二次元半導体層状材料は、集積回路内のトランジスタの数に関するムーアの法則を拡張する可能性を秘めている。単結晶 hBN 基板上に作成された高品質の剝離グラフェンのデバイスは、SiO₂ 上のデバイスよりほぼ 1 桁優れた移動度を備えている。hBN は CVD 成長で三角形に成長することが報告されており、そのメカニズムは明らかになっていない。そこで我々は DFT 計算を使って、成長メカニズムに関する理論研究を行った。

PM1-2 (13:40~14:00)

GaN 中における V_{Ga}-V_N 複合欠陥移動反応ポテンシャル

小田 将人 (和歌山大学)

次世代パワーデバイスに向けたチャネル材料として窒化ガリウム(GaN)が注目されている。GaN は欠陥密度が大きいことが応用上の課題である。さらに、GaN 中の各種欠陥が、アニール処理などによって移動・集合し大型欠陥へと成長してしまうことが大きな問題となっている。しかし、欠陥が移動するミクロな機構はまだほとんど解明されていない。本研究では、V_{Ga}-V_N 複合空孔欠陥の移動反応に注目し、その断熱ポテンシャルを見積もる。

PM1-3 (14:00~14:20)

GaAs(111)B 上に成長した単層 MoTe₂ のエネルギー的安定性

奈良 純 (物質・材料研究機構)

近年注目されている vdW 積層物質 TMDC の利用のために大面積、単一相の構造の作成が求められている。最近になって GaAs 基板上に大面積の 2H-MoTe₂ を作成することに成功したとの報告があった。そこでは 3 種類のモアレ模様が見つかり、それぞれ基板 GaAs と MoTe₂ の積層周期、角度が異なっていた。本研究ではそれらの構造のエネルギー的安定性について格子ミスフィット、ツイスト角などの観点から調べた結果を報告する。

PM2-1 (14:40~15:10)

ZnDTP 由来トライボフィルム用原子間ポテンシャルの開発と摺動現象への適用

榊間大輝¹、岡澤拓史¹、久米一輝¹、小林森²、河口健太郎²、宮内勇馬²、泉聡志¹
(¹東大工、²マツダ株式会社)

潤滑油添加剤である ZnDTP は、滑り摩擦下で界面にトライボフィルムを形成して耐摩耗性を発現する。しかしながらその形成、耐摩耗機構は未だ明らかではない。本講演では、PHASE/0 を活用して行ったトライボフィルムの主成分であるリン酸亜鉛と酸化鉄の界面へと適用可能な原子間ポテンシャルの開発と、古典分子動力学計算により明らかになったトライボフィルム/酸化鉄界面の構造変化と耐摩耗機構について説明する。

PM2-2 (15:10~15:30)

機械学習ポテンシャルを用いたタングステンカーバイドの変形と破壊の分子動力学解析

佐谷 彩夏 (阪大基礎工)

高硬度、高靱性を有し、切削工具などの主材料として用いられる WC-Co 超硬合金の変形と破壊を分子動力学法を用いた原子シミュレーションにより解析し、その優れた力学特性の起源に迫る。分子動力学解析には、第一原理計算をもとに新たに構築した超高速かつ高精度の機械学習ポテンシャルを用いる。

PM2-3 (15:30~15:50)

PHASE/0 を用いたセシウム吸着風化黒雲母の溶融塩反応機構解明

飯野 千秋 (和歌山大学)

和田石は湿度センサなどへの応用が期待されているが、生成方法はまだ確立されていない。我々は、風化黒雲母(WB)を塩化カルシウムと共に溶融塩電解処理することで和田石などに構造変化が起こることを明らかにした。しかし、詳細な反応過程など、わかっていないことはまだ多い。本研究では、WB から和田石に構造変化する際の化学式のモデルを作成し、PHASE/0 を用いて反応過程の熱力学的考察を行った。