

NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2024

講演概要集

AM-1 (10:50~11:20)

窒素飽和吸着 Cu(001)面のステップ端状態の起源

小森 文夫 (東大物性研)

窒素吸着飽和面 Cu(001)表面では単層ステップが高い密度で形成され、それらが吸着によって生じた格子歪みエネルギーを緩和している。そして、STMによりステップ端に局在した1次元状態が観察されている。そこで、PHASEを用いた電子状態計算により格子定数の関数としてバンド構造を調べたところ、観測されたステップ端状態は、局所的な格子拡張によって表面バンド底のエネルギーが低くなることによって生じていることがわかった。

AM-2 (11:20~11:50)

水素・電子トンネルによる光触媒 TiO₂上水素ガス生成と酸素欠陥による光触媒反応活性

加藤 弘一 (東大生産研)

光触媒 TiO₂上で水から水素ガスが発生することは、本多藤嶋効果としてよく知られている。水素ガスの生成過程として、TiO₂上で水素原子とポーラロンのトンネルによって起きることを理論計算により明らかにしてきた。また、TiO₂はバンドギャップが大きいので、自然光の一部しか利用できないが、酸素欠損を作ることにより、触媒効率を飛躍的に上げることができる。この過程の解明にも取り組んでおり、紹介したい。

PM1-1 (13:00~13:25)

ノンコリニア DFT 計算による Fe 添加 Mn_3Sn の安定磁気構造評価

田上 勝規 (株式会社アスムス)

六方晶 Mn_3Sn は面内ノンコリニア磁性をとるのに対し、同じ構造の Fe_3Sn は面内強磁性をとることが知られている。また、 Mn_3Sn に僅かに Fe 原子をドーブすると、面直強磁性になるという報告もある。本講演では、Mn サイトを Fe 原子で少しずつ置換した系の磁気安定構造について、仮想結晶近似の下で得られた計算結果を紹介する。

PM1-2 (13:25~13:55)

Si 酸化膜中 Si 輸送に関する原子レベルの考察

影島博之¹、秋山亨²、白石賢二³ (1 島根大学、²三重大学、³名古屋大学)

Si 酸化中には、酸化反応が起きている酸化膜/Si 界面から Si が酸化膜中を輸送される。我々は第一原理計算を用いて、その輸送過程を原子レベルで同定することに成功した。理論拡散係数は実験と矛盾がない。さらに、Si 酸化膜は単なるアモルファスではなく、原子レベルで見ると、様々な大きさと歪みを持った水晶的部分、クリストバライト的部分、空洞とから構成され、その構成の仕方から定義される様々な「膜質」を持つと考えられる。

PM2-1 (14:15~14:45)

液体のエントロピーの第一原理計算

白井光雲^{1,2}、靱田浩義³、佐藤和則³、Sangil Hyun⁴ (1 阪大・産研、²日越大学、³阪大工、⁴韓国 KICET)

(最終ページを見てください)

PM2-2 (14:45~15:05)

GaSb 基板上的 InGaSb/AlInGaSb 量子カスケードレーザの MBE 成長

安田 浩朗、関根 徳彦、寶迫 巖 (情報通信研究機構)

量子カスケードレーザ(QCL)は半導体多重量子井戸構造でのサブバンド間光学遷移を利用した中赤外からテラヘルツ(THz)周波数領域で発振するレーザである。THz-QCL のさらなる性能向上のため、我々は従来の GaAs 材料系に代えて電子の有効質量が小さい InGaSb 材料系を用いることを提案した。PHASE/0 を用いて InGaSb/AlInGaSb の格子整合条件を求め、GaSb 基板上に厚さ 3 μm の InGaSb/AlInGaSb THz-QCL 活性層を分子線エピタキシー (MBE) 装置で成長した。

PM2-3 (15:05~15:25)

風化黒雲母中の層間原子拡散に対する断熱ポテンシャル

小田 将人 (和歌山大学)

工業排熱を有効利用するために熱電素子が注目されている。これまで、高温領域(>800°C)で機能する材料は非常に少なかった。我々は、土壤粘土鉱物に注目し高温領域の熱電素子開発に取り組んでいる。風化黒雲母(WB)は高温領域でも ZT を示すため有力な候補であるが、その ZT の起源、特に電気伝導の起源が明らかになっていない。本研究では WB の層間原子の拡散ポテンシャルを算出することでイオン伝導の可能性を議論する。

PM2-4 (15:25~15:55)

Al₂O₃ ゲート絶縁膜の欠陥低減に向けた過熱水蒸気アニール技術

尾崎 史朗 (富士通株式会社)

高周波デバイスに適用可能な Al₂O₃ ゲート絶縁膜を実現するため、欠陥低減に向けた過熱水蒸気アニール技術を検討した。原子層堆積法にて成膜した Al₂O₃ を過熱水蒸気雰囲気下でアニールすることで、残留不純物である水酸基の脱水縮合反応が促進され、酸素空孔等の欠陥低減に有効であることを化学構造分析から考察した。

液体のエントロピーの第一原理計算

白井光雲^{1,2}、舩田浩義³、佐藤和則³、Sangil Hyun⁴

¹ 阪大・産研、² 日越大学、³ 阪大工、⁴ 韓国 KICET

今日、DFT に基づく電子状態計算により固体の物性予測はほとんど精密科学と呼ばれる域に達している。しかし液体に対してはほとんど応用されていない。液体には基底状態というものがないことが DFT による熱力学関数の計算を阻んでいる。応用面からは、液体の性質、特に熱力学的関数が予測できないことは、物質開発において重大な桎梏となっている。液体の熱力学的関数がなぜ難しいのか、最大の問題はエントロピー S である。内部エネルギー U は何とか求めたとして、 S を求める実際的な方法が知られていないのである。液体の微視的理論によれば、原理的には分配関数 Z は多体粒子相関関数 $g_M(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_M)$ で表される。しかし実際のところこのような関数は知られていない。近似を使ったとしてそれが十分か誰にも分からない。これでは新たな材料の性質予測に利用することはできない。

一方、熱力学によるとエントロピー S は比熱 $C(T)$ を次のように

$$S(T) = \int_0^T \frac{C(T')}{T'} dT' \quad (1)$$

積分することで得られる。比熱は $C = dU/dT$ つまり内部エネルギーを T で微分することで得られる。物質の内部エネルギー U とは、その物質の微視的全エネルギーの熱平衡時における時間平均 $U = \overline{E_{\text{tot}}(t)}$ で与えられる。 T の関数としての $E_{\text{tot}}(t)$ は第一原理計算に基づく分子動力学 (FP-MD) シミュレーションでは最も良く定義される量であるから、FP-MD により液体でもエントロピーが求まることになる。以上、原理は非常に簡単である。これまでこの方法が使われなかったことの方が不思議である。実際の計算における技術的問題はあるが、それよりも概念的な問題がある。それは液体の比熱をどうやって求めるか標準理論がないこと、より根本的には液体の熱平衡状態の理解が不十分であることが原因と思える。筆者らはガラス転移における比熱の跳びの問題にこの方法を適用してきたが [1,2]、従来その分野で行われている液体比熱の計算方法 [3] との違いがそのことを示す。従来方法 [3] によると、液体でも局所的にはフォノンという概念が成り立ち、固体の場合と同じようにフォノンにボーズアインシュタイン統計を適用して比熱を求める。しかしこの方法で液体の熱平衡状態を記述すると問題が生じる。液体の熱平衡状態の本質はエネルギーの緩和過程にある。このことは熱浴を入れない断熱 FP-MD で良く記述される。これにより液体 Na の比熱を計算し、そのエントロピーを求めた。計算と実験 [4] との一致は良い。我々の断熱シミュレーションという取り扱いの正しさが検証されたといえる。

[1] K. Shirai, K. Watanabe, and H. Momida, *J. Phys.:Condens. Matter* **34**, 375902 (2022)

[2] K. Shirai, K. Watanabe, H. Momida, and S. Hyun, *J. Phys.:Condens. Matter* **35**, 505401 (2023).

[3] D. Bolmatov, V. V. Brazhkin, and K. Trachenko, *Sci. Rep.* **2**, 421 (2012); K. Trachenko and V. V. Brazhkin, *Rep. Prog. Phys.* **79**, 016502 (2016); J. E. Proctor, *Phys. Fluids* **32**, 107105 (2020); M. Baggioli *et al*, *Phys. Rev. E* **104**, 014103 (2021).

[4] C. B. Alcock, M. W. Chase, and V. P. Itkin, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **23**, 385 (1994).