

金属および半導体表面における原子配列や
物性に関する研究

◆ 分子解析グループ ◆

金属および半導体表面における原子配列や
物性に関する研究

岡山理科大学総合情報学部

助教授 矢城陽一郎



金属および半導体表面における 原子配列や物性に関する研究

岡山理科大学総合情報学部

矢城陽一郎

解析支援ネットOKAYAMA

第一回セミナー



表面とは？

固体をある特定の方向で切り出したときにできる面

固体内部とは原子の配列が変わる



表面特有の物性が現れる



研究目的

固体素子の小型化などに伴い、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。

固体表面における短距離秩序、原子や分子の吸着や脱離過程、表面再構成構造などの現象の研究を、分子動力学に基づく計算やモンテカルロシミュレーションなどを駆使して行う。



解析(研究)手法

- モデル計算(半経験的・半現象論的)
- 第一原理計算(非経験的)



モデル計算

ある実験結果をもとに、その結果を再現するような理論モデルを構築し、計算(シミュレーション)を行い、実験事実を説明する.

現象の原因・本質を探る.



第一原理計算

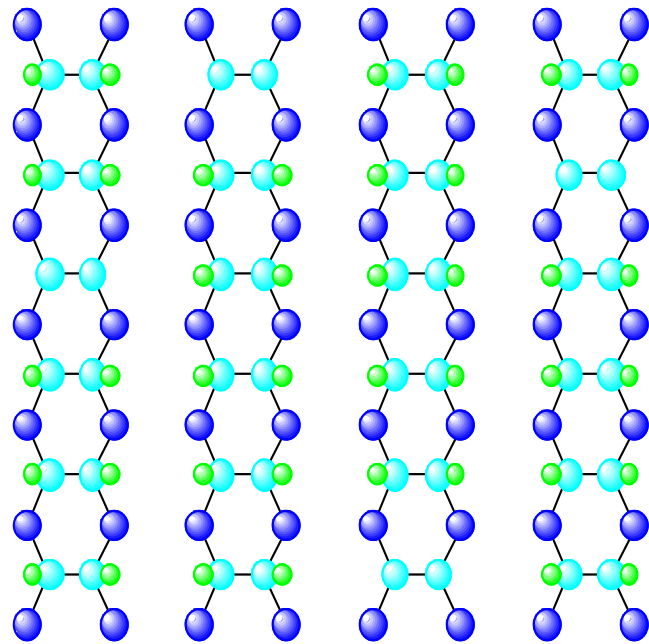
- 非経験的
- ソフトウェア
PHASE(アドバンスソフト)



研究例(モデル計算)

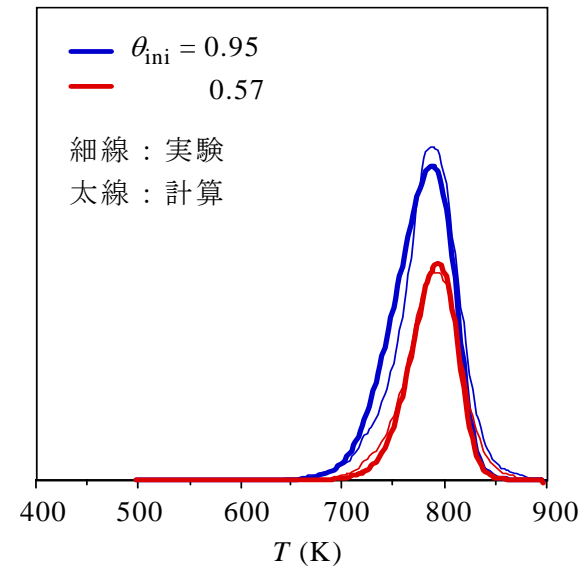
- H/Si(100) の昇温脱離
- In/Si(111) 構造変化

H/Si(100) の昇温脱離



- 吸着水素原子
- 第一層シリコン原子
- 第二層シリコン原子

水素原子の吸着量や、
吸着水素間の相互作用
をパラメータとして、
シミュレーションを行う

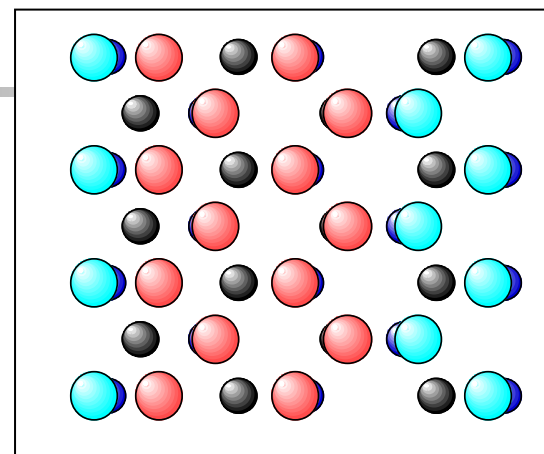
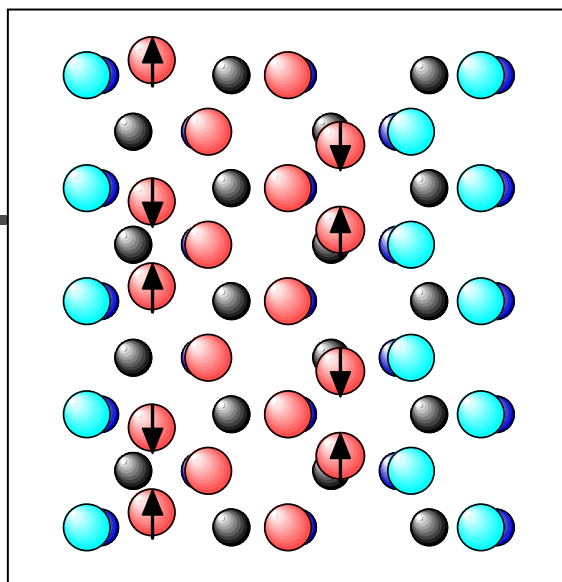
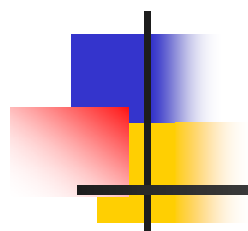


昇温脱離スペクトル

In/Si(111) 構造変化

インジウム原子が一次元的に配列

● インジウム原子
● シリコン原子



低温相
絶縁体

← $T_c = 130 \text{ K}$ →

高温相
金属