

計算科学による表面・ナノ構造の研究

Keywords: ナノ構造、物質特性、シミュレーション

ナノセオリー分野 量子物性シミュレーショングループ

奈良 純

NARA.Jun@nims.go.jp | https://samurai.nims.go.jp/profiles/nara_jun



研究の背景 ナノ構造の形成過程、その物質特性にはまだ不明なことが沢山あります。特に近年では様々な表界面・ナノ構造について原子レベルでの構造解析や物質特性を調べる必要性が高まっています。

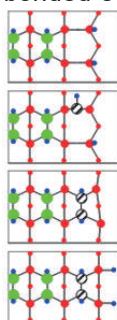
研究の狙い 実験的知見によらない計算科学的手法を実験と相補的に使用することにより、精度の高い解析が可能となります。本手法を物質表面やナノ物質の構造解析・機能解析に適用して材料設計に役立てることが出来ます。

最先端研究トピックス

水素終端Si表面におけるSi島の成長メカニズム

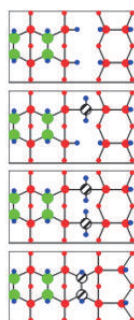
rebonded edge

nonrebonded edge



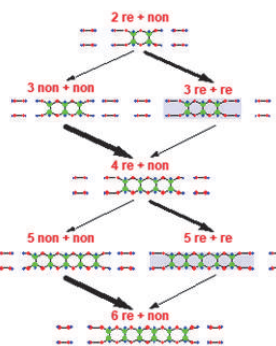
$E_{ad} = -0.1 \text{ eV}$

$E_{ad} = 1.1 \text{ eV}$



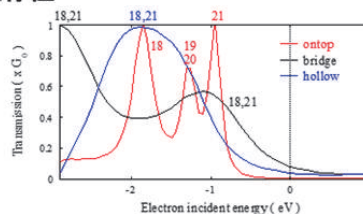
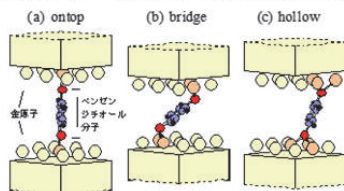
$E_{ad} = 0.8 \text{ eV}$

$E_{ad} = 0.8 \text{ eV}$



rebond端のみの島が形成されるメカニズム

ベンゼンジチオール分子の伝導特性の接点依存性



文献

- ・J. NARA et al., Phys. Rev. Lett., 100 (2008) 026102/1-026102/4.
- ・J. NARA et al., J. Chem. Phys., 121 (2004) 6485-6492.

まとめ

- 表面ナノ構造の形成過程の研究
- 単分子構造の電気伝導特性の研究
- 特許件数: 1

実用化への目標

- 半導体デバイス作成への寄与
- 機能性分子の探索