

領域密度汎関数理論・量子エネルギー密度

京都大学大学院工学研究科 機械物理工学専攻 立花研究室 (物性工学講座・量子物性学分野)
E-mail: akitomo@kues.kyoto-u.ac.jp

研究の概要 1 (ストーリー)

領域化学ポテンシャル非相等性原理

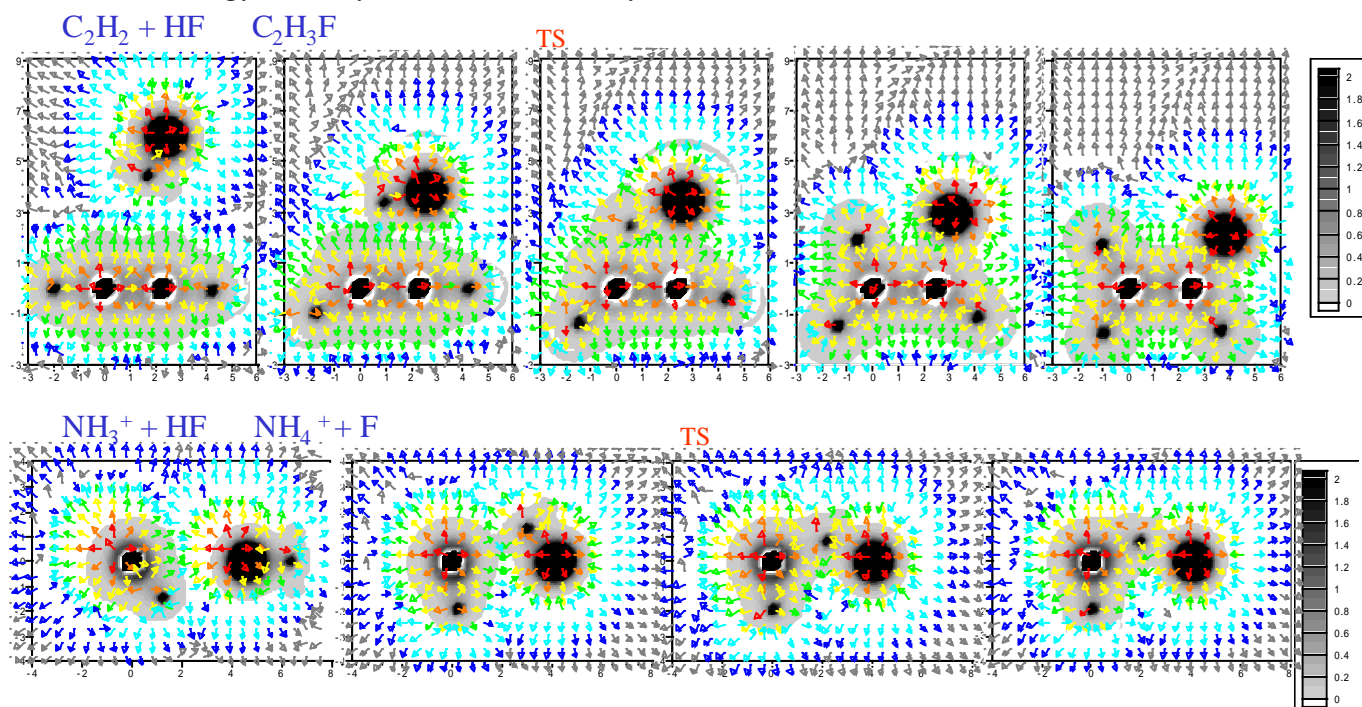
- ・Onsagerの局所平衡仮説をもとに、領域を隔てる界面を通してはたらく量子力学的相互作用を考慮した非平衡熱力学を定式化
- ・領域の領域電子数と領域電子エネルギーを定義し、領域間にはたらく量子力学的効果を表す新しい物理量を導入して、全系が化学平衡に到達した場合の領域電気化学ポテンシャル相互の関係を定式化 (量子力学的質量作用の法則)

これにより、たとえ全系が化学平衡に到達したとしても、全系に広がる定在波のフェルミ準位と領域化学ポテンシャル、および、領域化学ポテンシャル同士はそれぞれ互いに等しくならないことを証明しました。

化学的相互作用の新しい描像

通常、相対性理論は化学の分野で小さな補正としてのみとらえられてきましたが、そうではなく、相対性理論のよりどころである近接作用の観点から導き出されたQEDのハミルトニアンは、非相対論極限においてすら全く新しい化学的相互作用描像をあたえることを初めて明らかにしました。その結果、全空間の積分値としてのエネルギーは従来ab initioハミルトニアンによるものと等しいが、化学的相互作用の局所的描像は全く新しいものであり、相対性理論に基づく正しい近接作用の観点から確固たる描像が得られ、従来の遠隔作用に基づく化学的相互作用の描像はことごとく塗り替えられます。

Kinetic energy density & tension density



- ・とりわけ、運動エネルギー密度や張力密度が化学結合の生成・切断の全く新しい描像を与える。
- ・分子系だけでなく、周期系モデルにも応用できる。

エレクトロニクスデバイス材料の量子設計 制御に関する理論的研究

京都大学大学院工学研究科 機械物理工学専攻 立花研究室 (物性工学講座・量子物性学分野)
E-mail: akitomo@kues.kyoto-u.ac.jp

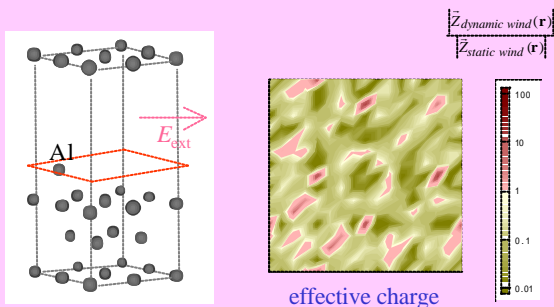
研究の概要 2

エレクトロニクスデバイス特性を予測することは、高性能なデバイス材料を設計する上で不可欠となっています。計算機の進歩によって、第一原理計算によるデバイス材料の構造・物性解析や新規物質の予測は重要な研究手法として認識されるようになりましたが、実際の実験条件においてこれらのデバイス材料は電場や電流の影響を大きく受けており、その効果を考慮した電子状態を導出しなければなりません。当研究室では外部電場や電流の効果を考慮する第一原理計算のプログラムコードを製作し、領域密度汎関数理論に基づく量子エネルギー密度を用いて各種デバイス材料結晶・表面や異種電子材料コンタクト界面の電子構造を明らかにするとともに、デバイス材料の量子設計・制御・信頼性の理論的指針を与えています。

最近のトピックスから..

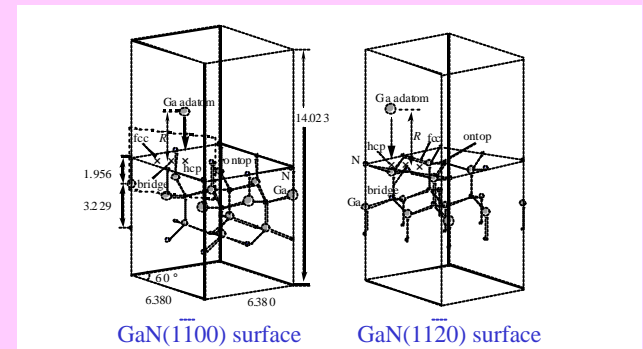
エレクトロマイグレーションのシミュレーション

エレクトロマイグレーションとは、強電流によって表面上やバルク中の原子が移動していく現象である。電子状態計算をもとにエレクトロマイグレーションを起こす原子核を波束に置き換えたシミュレーションを行い、波束の運動エネルギー密度・張力密度・有効電荷を新しく定義して、局所的に生じるストレスや電荷密度分布を議論する。



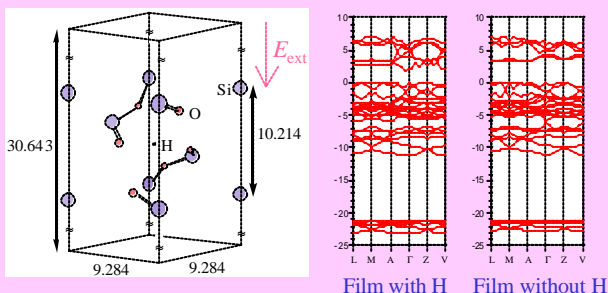
結晶成長のシミュレーション

GaN結晶表面のさまざまな面方位について、Ga原子・N原子が吸着するプロセスを第一原理計算により検討した。吸着サイトや吸着原子の表面からの距離等に著しい面方位依存性が示され、結晶成長のドライビングフォースの描像は量子エネルギー密度により明らかになった。



絶縁体薄膜の電子物性・信頼性予測

SiO₂薄膜モデルや結晶構造について、外部電場存在下で酸化膜内に取り込まれた層間水素原子が電子状態に与える影響をバンド構造や量子エネルギー密度によって解析し、絶縁破壊のメカニズム解明に取り組んでいる。層間水素原子の存在はバンド構造に大きく影響し、これが絶縁破壊の一因になっていることが示された。絶縁破壊に関与する層間水素原子のダイナミクスについても検討した。



高誘電体結晶・表面の誘電物性予測

ZrO₂やHfO₂等の高誘電体結晶構造について、第一原理計算により得られた波動関数から導出される誘電物性について議論した。開発した外部電場下の電子状態を求める計算手法や量子エネルギー密度による解析により結晶内における分極の様子や微視的な電子ストレスの描像が明らかになった。さらに、摂動論により格子振動も考慮した誘電率の計算プログラムコードを開発している。

