

# コンピューティクス・アプローチによるナノ構造体の電子機能の解明と予測

東京大学大学院・工学系研究科・物理工学専攻 押山淳

**目的:** 量子論の第一原理に立脚した計算科学的手法により、ナノスケールの構造体の形状と電子機能の複合相関および非平衡ダイナミクスを解明し、さらには新機能を有するナノ構造体の提唱を行うこと

**内容:** 密度汎関数理論を理論手法の軸に据え、その近似手法の理論的發展を第一のターゲットとし、コンピュータ・サイエンス分野との学融合(コンピューティクス、<http://computics-material.jp/>)により、物質科学の進展を目指す。

平成24年度の主な成果:

1. 共有結合半導体中の伝導帯状態は内包空間(格子間チャンネル)に分布するfloating stateであることを発見した。半導体材料の結晶多型の違いにより、その内包空間の広がりを変化し、バンドギャップの顕著な変化が顕在化することを明らかにした。
2. Si半導体の酸化現象における、原子反応機構と対応する自由エネルギーの変化を明らかにし、lactone 分子ユニットの形成と二酸化炭素の脱離が、酸化反応の本質であることを明らかにした。

\* 利用した計算機システム: SX9

