

計算化学的手法による有機物・無機物の熱物性・輸送特性予測

Investigation of thermal and transport properties of organic and inorganic compounds

京都大学大学院工学研究科 機械理工学専攻 熱物理工学分野 松本充弘

研究成果概要

本研究は、量子論的效果を考慮した分子モデルに基づき、さまざまな物質の凝縮相の性質(相変化挙動や輸送現象を含む)を分子シミュレーションにより評価することを目的とする。これまでの予備検討に基づき、密度汎関数 (density functional) 法と強結合 (tight binding) 近似に基づくオープンソースパッケージである DFTB+ を利用することとし、最新版をさまざまなツール類と共に独自に本スパコンシステムにインストールしたうえで、計算をはじめている。

今年度は、半導体材料を主な計算対象として、次の2つについて計算を進めており、いずれも、国内学会で発表するまでに至っているが、引き続き種々の解析を行う予定である。

(1) 水素化アモルファスシリコンの生成と構造解析: 太陽電池の主要材料の1つである水素化アモルファスシリコン(a-Si:H)は、

生成条件によるわずかな構造の違いが大きな電子物性の違いをもたらすことが知られている。熔融、スパッタリング、CVD など生成法の違いがマイクロ構造や電子物性に与える影響を調べている (Fig. 1)。

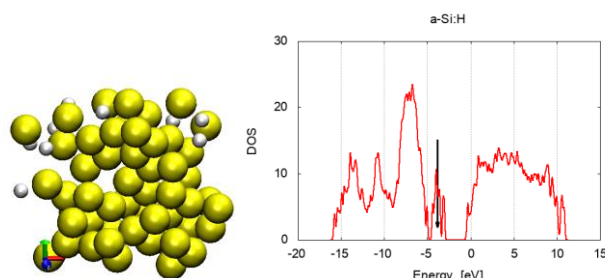


Fig.1: Example of a-Si:H fabricated by melting. Snapshot and DOS.

(2) 半導体ナノファイバーの物性: カーボンナノチューブの電子物性については数多くの報告があるが、それ以外の半導体ナノ材料については未解明の材料が多い。SiC系ナノチューブを例として chirality が電子物性等に与える影響を調べている (Fig. 2)。

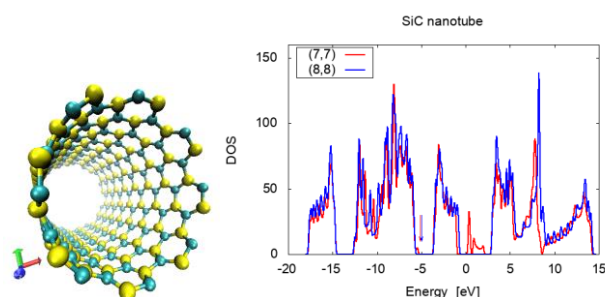


Fig.2: Example of SiC nanotube. Snapshot and DOS. Arrows indicate the Fermi level.

発表論文(謝辞なし)

- [1] 李海麗, 松本充弘, “DFTB study of hydrogenated amorphous silicon,” 分子シミュレーション討論会(2019年12月, 名古屋), 122P.
- [2] 羅啓崙, 松本充弘, “Density functional calculations: Electronic structures of silicon carbide,” 分子シミュレーション討論会(2019年12月, 名古屋), 124P.