

○久保百司<sup>1</sup>、菊地宏美<sup>1</sup>、坪井秀行<sup>1</sup>、古山通久<sup>1</sup>、畠山 望<sup>1</sup>、遠藤 明<sup>1</sup>、高羽洋充<sup>1</sup>、  
Carlos A. Del Carpio<sup>1</sup>、梶山博司<sup>2</sup>、篠田 博<sup>2</sup>、宮本 明<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>東北大学大学院工学研究科応用化学専攻(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

<sup>2</sup>広島大学大学院先端物質科学研究科(〒739-8530 広島県東広島市鏡山 1-3-1)

<sup>3</sup>東北大学未来科学技術共同研究センター(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

## 【緒言】

プラズマディスプレイは高輝度、高精細の画質を大画面・薄型で実現可能なディスプレイであり、更なる長寿命化、消費電力の低減、大画面化などが求められている。プラズマディスプレイの性能向上には、MgO 保護膜の二次電子放出能の向上、耐電場性・耐スパッタ性の向上、作製プロセスの効率化、発光特性の向上などの解決が求められている。そこで本研究では、量子分子動力学法に基づき、プラズマディスプレイの理論的設計を目的に、材料設計、プロセス設計、デバイス設計の全てを可能とするマルチスケールシミュレータを開発した。

## 【方法】

量子分子動力学計算、電子状態計算には、当研究室で開発した Tight-Binding 近似に基づく Colors プログラムを、電気伝導度計算には、当研究室で開発した Colors-Cond プログラムを、非平衡分子動力学計算には、当研究室で開発した New-RYUDO プログラムを使用した。

## 【結果と考察】

本研究で開発したプラズマディスプレイ設計のためのマルチスケールシミュレータのコンセプトを図 1 に示す。具体的な計算結果を下記に示す Tight-Binding 量子分子動力学法を用いて MgO の二次電子放出能評価を行ったところ、Si などのドーパントにより 2 次電子放出能を向上できることを明らかにした。次に、量子分子動力学法を用いて、電場下での MgO 保護膜の耐久性評価を行ったところ、MgO(111)面が最も高い耐電場性を有することを明らかにした。さらに非平衡分子動力学法を用いて、MgO 保護膜のスパッタ耐性を評価したところ、スパッタによる構造破壊に加えて再結晶化の評価が重要であること、さらに MgO(111)面が最も再結晶化速度が速いことなどを明らかにした。また、量子分子動力学法を活用することにより、

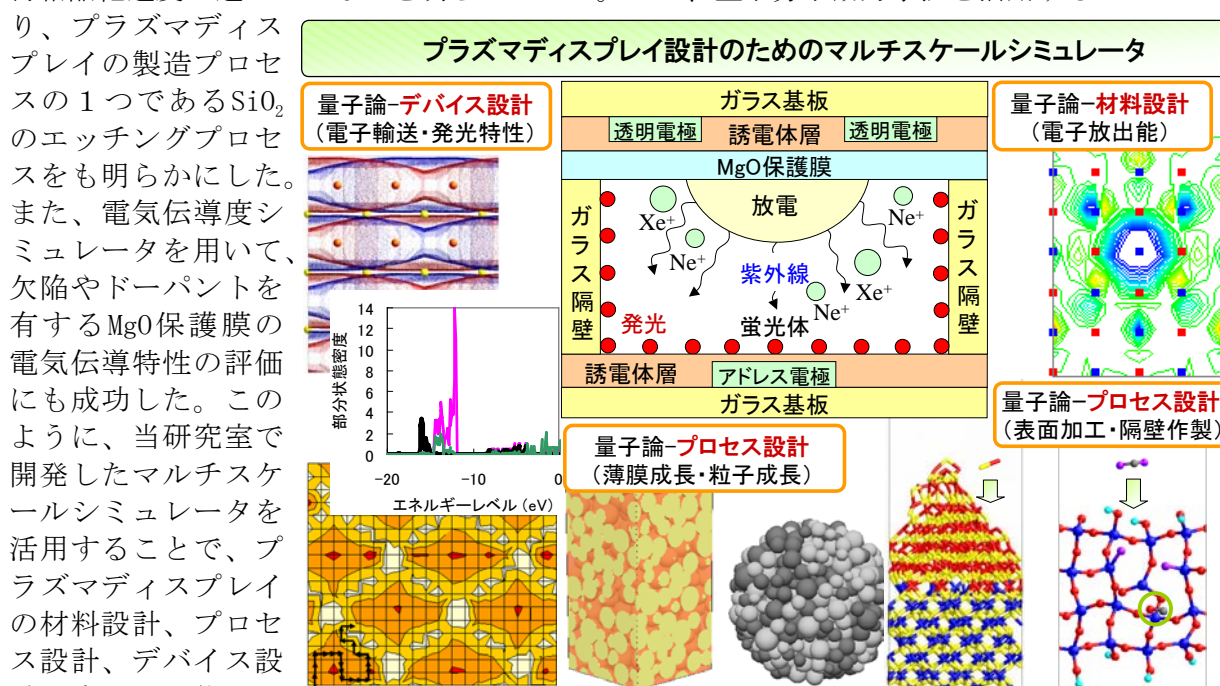


図 1 プラズマディスプレイ設計のためのマルチスケールシミュレータ