

第一原理計算による電子状態解析

○太田 優一^{*1)}

■キーワード 第一原理計算、密度汎関数理論、電子状態、バンド理論

1. 第一原理計算による高精度な物性予測
2. コンピュータシミュレーションによる材料設計
3. 新規材料探索

■背景

近年、材料開発の現場でも第一原理計算というコンピュータシミュレーションが活用されている。第一原理計算とは、基本的に原子の種類と位置を与えるだけで、その系の電子状態を計算する手法のことである。本発表では、最近注目されている材料を例に第一原理計算による電子状態解析の例を紹介する。

■解析事例

(1) 解析手法

密度汎関数理論に基づいた第一原理計算を実施した。計算コードは Gnu GPL で配布されている Quantum Espresso^[1] (QE) を使用した。このコードでは、平面波展開+擬ポテンシャル法で計算する。下記の計算例では、スーパーセルを構築し、原子の入れ替えや削除を行うことで欠陥や不純物の状態を模擬した。

(2) 窒素 (N) ドープ炭化珪素 (SiC) の電荷密度分布

次世代パワーデバイスの材料として SiC が盛んに研究されている。この材料は結晶成長中に N が混入することが知られており、その N がドナーとしての役割を果たす。この N が炭素 (C) サイトに置換して入るとどうなるかを、第一原理計算によって解析した。計算モデルは 4H-SiC で、C を 1 つ N に置き換えたものを採用した。図 1 に電荷密度分布を示す。C と N の両方に高い電荷分布をしていることが分かる。このように等高線で電荷分布を可視化することで、電荷の偏りや結合様式を明らかにすることができる。

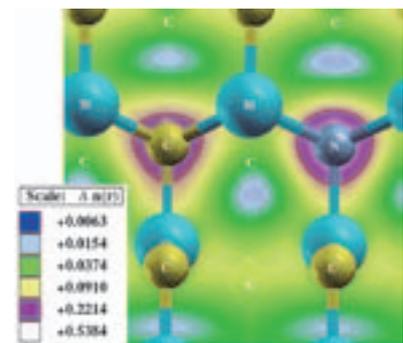


図 1. 4H-SiC の電荷密度分布

(3) 窒素欠陥を有する窒化ガリウム (GaN) の構造最適化

GaN は青色発光ダイオードの材料として実用化されている^[2]。この材料は有機金属気相成長法 (MOCVD) などで作製すると、N 欠陥が発生しやすいことが知られている。N 欠陥が発生したときに結晶の構造がどのように変化するかを、原子間に働く力を最小にすることで明らかにした。

図 2 に構造最適化に伴い、Ga 及び N 原子が変位している様子を示す。図中の緑色の矢印が原子間に働いている力を、白い点線で表記した部分が本来窒素があるべき場所を示している。矢印の方向が示すように、窒素欠陥に向かって近接する Ga 原子が変位し、エネルギーを低くしようとしている様子が見て取れる。

以上のように、欠陥や不純物といった実験では解析しにくい情報を第一原理計算によって、高い精度で予測することが可能である。

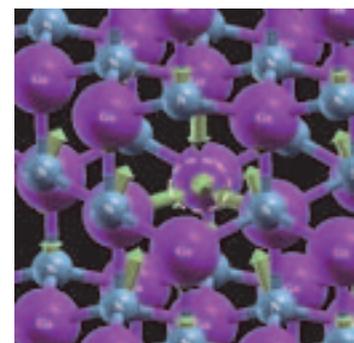


図 2. GaN の構造緩和の様子

■今後の展開

- ・有効遮蔽体法 (Effective Screening Medium: ESM)^[3] による帯電した表面の第一原理計算
- ・企業や大学などとの共同研究 (新規材料開発)
- ・平成 27 年度下半期セミナー開催 (第一原理計算による電子状態計算入門)

参考文献

- [1] P. Giannozzi *et al.*, Phys.: Condens. Matter, Vol.21, p.395502 (2009)
 [2] S. Nakamura and G. Fosol, "The Blue Laser Diode" (1998)
 [3] M. Otani *et al.*, Phys. Rev. B, Vol.73, p.115407 (2006)

*1) 電子半導体技術グループ