

第一原理計算を用いた転写モールド法エミッタ用 導電性セラミック材料の電子状態(Ⅲ)

Electrical States of Conductive Ceramic Material for Transfer Mold Field Emitter Arrays by First-Principles Calculation (Ⅲ)

静岡大院工 °石川原俊夫, 中本正幸

Graduate School of Eng., Shizuoka Univ., °Toshio Ishikawara, Masayuki Nakamoto

E-mail: m-nakamoto@rie.shizuoka.ac.jp

【はじめに】 我々は、Field Emitter Arrays(FEAs)を用いた苛酷な環境でも耐えられる宇宙用デバイス提案しており、その実現のため、中本研独自の低仕事関数材料である導電性セラミック $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$ の研究を行っている。第一原理計算を用いて単位格子一層の Cr_3Si 結晶構造に格子欠陥を生じさせ、更に酸素 O を導入することで $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$ の結晶構造を仮定し電子状態を調べ、仕事関数が低下したことを報告した¹⁾。本研究では、結晶の信頼性を高めるため Cr_3Si の単位格子を二層にしたスラブモデルを仮定し、格子欠陥を生じさせ、 $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$ の仕事関数が低下するメカニズムの解明の手がかりを得る。

【実験】 まず、 Cr_3Si の単位格子一層の場合の完全結晶のスラブモデルと格子欠陥を生じさせたスラブモデルを Fig.1(a), (b)に示し、単位格子二層の場合の完全結晶のスラブモデルと格子欠陥を生じさせたスラブモデルを Fig.1(c), (d)に示す。仕事関数はバルクと表面の二つの影響を受けている。単位格子を一層から二層にすることで、バルクを含んだ状態に近づけたスラブモデルを作成した。次に第一原理計算を用いて仕事関数を計算した。用いたソフトウェアは PHASE ver.10.01 であり、革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト²⁾の成果を利用した。

【結果】 単位格子二層の格子欠陥を生じさせた Cr_3Si スラブモデルのポテンシャルエネルギーと Z 軸距離の関係を Fig.2 に示す。仕事関数は 3.7eV となった。単位格子二層の完全結晶の仕事関数は 4.3eV であった。格子欠陥を生じさせることで仕事関数が 4.3eV から 3.7eV まで低下した。格子欠陥を生じさせることで表面の原子数の面密度が小さくなったため、仕事関数が低下した。また、単位格子一層の完全結晶、および単位格子一層の格子欠陥を生じさせた Cr_3Si スラブモデルの仕事関数はそれぞれ 4.4eV、3.6eV となることを報告した¹⁾。単位格子を一層から二層にし、バルクを含んだ状態に近づけても、単位格子一層と二層の仕事関数は同程度となったことから、より信頼性のある計算値を得られることができた。

【結論】 第一原理計算を用いて単位格子二層の表面に格子欠陥を生じさせた Cr_3Si のスラブモデルを仮定し、仕事関数を計算した。単位格子を二層にすることで、バルクを含んだ結晶構造に近づけたスラブモデルにした。単位格子一層の場合と比較しても二層の場合の仕事関数は同程度となったことから、より信頼性のある計算値を得られることができた。 $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$ が低仕事関数であることの解明につながる可能性がある。

1) 石川原俊夫 他, 2013 年秋季第 74 回応用物理学関連連合講演会講演予稿集 18a-A13-2, p.07-086(2013).

2) CISS フリーソフトウェア, ナノ・物質・材料・マルチスケール機能シミュレーション PHASE ver.10.01, 文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」.

