

# 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 (IV)

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

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  $\text{Cr}_3\text{Si}$  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<sup>1)</sup>。また、 $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$  の X 線回折分析を行った結果、(210) にピークがあることを報告している<sup>2)</sup>。そこで本研究では、第一原理計算を用いて  $\text{Cr}_3\text{Si}$  の面方位を変更し、仕事関数を調べ、 $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$  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】  $\text{Cr}_3\text{Si}(210)$  の場合は計算の収束時間が非常にかかるので、面方位を (100) から  $\text{Cr}_3\text{Si}(210)$  直下の (840) に変更し、計算の収束時間を短くしたスラブモデル (Fig.1) を作成した。これまでは面方位を (100) のみの場合でスラブモデルを仮定して計算を行っていた<sup>1)</sup>。次に、第一原理計算を用いて電子状態を計算し仕事関数を調べた。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<sup>3)</sup>の成果を利用した。

【結果】  $\text{Cr}_3\text{Si}(840)$  の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。Fig.2 の仕事関数  $\phi$  は 4.2 eV となった。 $\text{Cr}_3\text{Si}(100)$  の場合の仕事関数は 4.4 eV であった。面方位を (100) から (840) に変更することにより、仕事関数は 4.4 eV から 4.2 eV となり 0.2 eV 低下することがわかった。

【結論】  $\text{Cr}_3\text{Si}$  スラブモデルの面方位を (100) から (210) 直下の (840) に変更し、第一原理計算を用いて電子状態を計算し仕事関数を調べた。面方位を (100) から (840) に変化させた場合、仕事関数が 0.2 eV 低下した。 $\text{Cr}_3\text{Si}$  のスラブモデルの面方位を変更し、格子欠陥や酸素 O を導入することで仕事関数が更に低下する可能性がある。

- 1) 石川原俊夫 他, 2014 年春季 第 61 回応用物理学関連連合講演会講演予稿集 17p-F5-15(2014).
- 2) 佐野恭央 他, 2012 年春季 第 59 回応用物理学関係連合講演会講演予稿集 p.07-122 (2012).
- 3) 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」

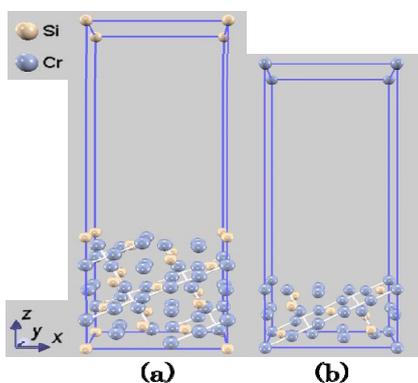


Fig.1 Slab model of (a)  $\text{Cr}_3\text{Si}(210)$   
and (b)  $\text{Cr}_3\text{Si}(840)$

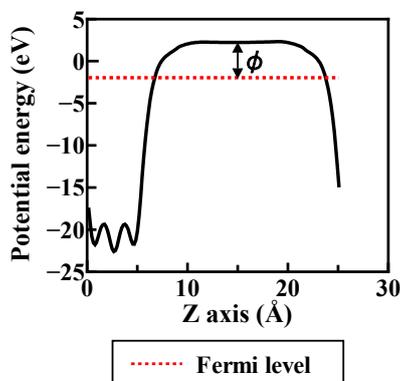


Fig.2 Relation between potential energy  
and Z-axis