

半導体の物性予測と物質探索 — 先端計算科学からのアプローチ

Predictions of the Properties of Semiconductors and Materials Exploration:

An Approach Based on Cutting-Edge Computational Science

○大場 史康^{1,2} (1. 東工大応セラ研・MCES、2. 物材機構 MI²I)

○Fumiyasu Oba^{1,2} (1.MSL and MCES, Tokyo Tech, 2. MI²I, NIMS)

E-mail: oba@msl.titech.ac.jp

物質・材料のスクリーニングを行う際、多くの材料機能が点欠陥、表面、界面といった格子欠陥に由来することを踏まえ、基礎物性のみならず、格子欠陥を精確に評価することが重要となる。例えばバンドギャップや有効質量、点欠陥の電子準位や形成エネルギー、ヘテロ界面のバンドオフセット等が、半導体材料や半導体ヘテロ構造を設計・探索する上での最も基本的な情報である。しかし、多数の候補物質について、これらを実験により系統的に決定するには多大な労力を有する。そこで、理論計算により高精度かつ系統的な予測ができれば、物質・材料探索の加速につながると考えられる。

我々は第一原理計算による半導体の基礎物性および格子欠陥特性の高精度予測のための手法の開発と応用を進めている[1-5]。点欠陥については、スーパーセル法における欠陥間の静電相互作用等を的確に補正することにより、比較的小さなモデルを用いても希薄な点欠陥の形成エネルギーや電子準位の予測が可能になる[3, 4]。表面や界面におけるバンドアライメントも高い精度で予測できるようになってきており[1, 2]、これらの計算を候補物質について系統的に実行することで、信頼性の高いスクリーニングが可能になると考えられる。本講演では、このような計算手法を概説するとともに、新しい半導体の探索や特異な点欠陥複合体構造の予測への応用例を紹介する。

【謝辞】本講演において紹介する研究は、文部科学省元素戦略プロジェクト「東工大元素戦略拠点」、JSPS 科研費新学術領域研究「ナノ構造情報のフロンティア開拓—材料科学の新展開」、JST イノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I)」の支援により行われた。

[1] A. Grüneis, G. Kresse, Y. Hinuma, and F. Oba, *Phys. Rev. Lett.*, **112**, 096401 (2014).

[2] Y. Hinuma, A. Grüneis, G. Kresse, and F. Oba, *Phys. Rev. B*, **90**, 155405 (2014).

[3] Y. Kumagai and F. Oba, *Phys. Rev. B*, **89**, 195205 (2014).

[4] Y. Kumagai, M. Choi, Y. Nose, and F. Oba, *Phys. Rev. B*, **90**, 125202 (2014).

[5] R. Ishikawa, N. Shibata, F. Oba, T. Taniguchi, S. D. Findlay, I. Tanaka, and Y. Ikumura, *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 065504 (2013).