

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(V)

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

伊藤允人、中本正幸、文宗鉉 (静岡大院工)

Masato Ito, Masayuki Nakamoto, Jonghyun Moon (Graduate School of Eng., Shizuoka Univ.)

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

【はじめに】我々は、Field Emitter Arrays(FEAs)を用いた過酷な環境でも耐えられる宇宙用デバイスを提案しており、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 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(100)において電子状態を調べ、仕事関数が低下したことを報告した¹⁾。O の導入する位置によって格子歪が変わる可能性があるため、O の導入する位置についても考慮する必要がある。そこで本研究では、第一原理計算を用いて Cr_3Si に導入する O の位置を変えることによる仕事関数の変化を調べ、 $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$ 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】 Cr_3Si のスラブモデルと、 Cr_3Si の(4/3 0 0),(200),(400)に O を導入した $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$ のスラブモデル(Fig1)を作成した。これまでは O を導入する位置を(4/3 0 0)に固定して計算していた。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²⁾の成果を利用した。

【結果】 Cr_3Si 、また Cr_3Si の(4/3 0 0),(200),(400)に O を導入した $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$ のそれぞれの仕事関数は 3.6eV、3.4eV、3.6eV、3.4eV となった。(400)に O を導入した $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$ 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。O を(4/3 0 0),(400)に導入することにより仕事関数が 0.2eV 下がった。(200)に導入した場合は変わらなかった。O を導入する位置を変化させることにより、Si-O 結合や Cr-O 結合の比率が変わり、格子歪に影響を及ぼしたと考えられる。

【結論】 Cr_3Si に導入する O の位置を変化させて、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。 Cr_3Si に導入する O の位置により仕事関数に影響を及ぼすことがわかった。このことから、 Cr_3Si に導入する O の位置を変えることで仕事関数が更に低下する可能性があるため、 $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$ の仕事関数が低下する理由の解明につなげることができる。

- 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) 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」

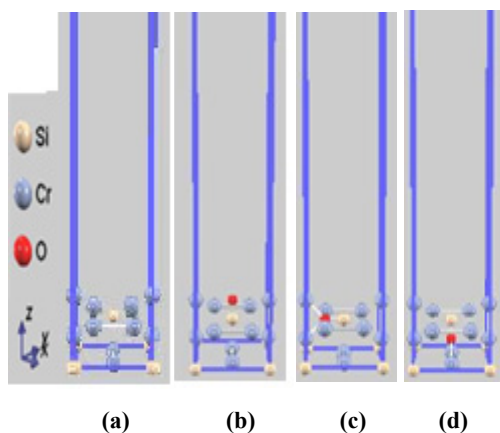


Fig.1 Slab model of (a) Cr_3Si . Slab models of $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$ having an oxygen atom on (b) (4/3 0 0), (c) (200), and (d) (400).

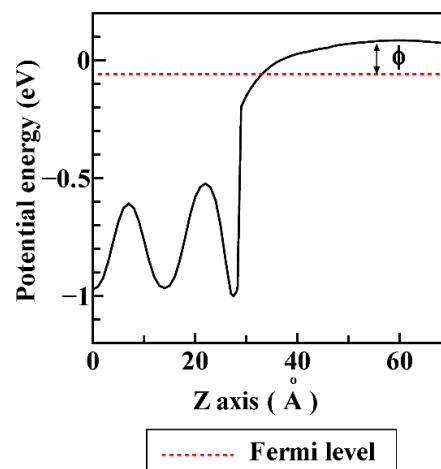


Fig.2 Relation between potential energy and Z-axis of $\text{Cr}_3\text{Si} \cdot \text{SiO}_2$ having an oxygen atom on (400).