

インシリコスクリーニングによる新規窒化物半導体の発見

Discovery of Novel Nitride Semiconductors via *In Silico* Screening

東工大フロンティア研/元素戦略研究センター¹、物材機構 MI²I² °大場 史康^{1,2}

IIR-LMS and MCES, Tokyo Tech¹, MI²I, NIMS², °Fumiyasu Oba^{1,2}

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

新物質・新材料の探索を目的としてスクリーニングを行う際、多くの機能が点欠陥、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決定するには多大な労力を要する。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、新物質・新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・格子欠陥特性の高精度予測のための手法開発を進めており[1-3]、これにより信頼性の高いスクリーニングが可能になると考えている。本講演では、このような計算手法を概説するとともに、図1に示すような新しい窒化物半導体の探索への応用例[4]を紹介する。

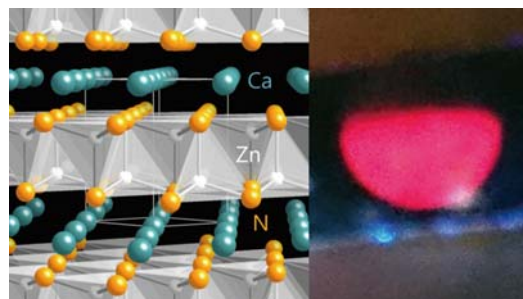


図1. 第一原理計算を用いたスクリーニングにより予測された新物質 CaZn_2N_2 の結晶構造 (左) と高圧合成により得られた多結晶試料からのフォトルミネッセンス (右)。

【謝辞】本講演において紹介する研究成果は、京都大学 日沼洋陽氏、田中功氏、東京工業大学 熊谷悠氏、畠山泰典氏、Lee Burton 氏、佐藤光氏、村場善行氏、飯村壮史氏、平松秀典氏、細野秀雄氏、ウィーン大学 Andreas Grüneis 氏、Georg Kresse 氏との共同研究により得られた。また、文部科学省元素戦略プロジェクト、JSPS 科研費新学術領域研究、JST イノベーションハブ構築支援事業の支援を受けた。

[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. Hinuma, T. Hatakeyama, Y. Kumagai, L. A. Burton, H. Sato, Y. Muraba, S. Iimura, H. Hiramatsu, I. Tanaka, H. Hosono, and F. Oba, *Nat. Commun.* **7**, 11962 (2016).