

Tran–Blaha modified Becke–Johnson 交換ポテンシャルを利用した半導体 に対する光学定数推算の精度検証

Assessing the performance of the Tran–Blaha modified Becke–Johnson exchange potential for optical constants of semiconductors in the ultraviolet–visible light region

○ 中野 晃佑¹, 酒井 智弘²

(1. 旭硝子株式会社 先端技術研究所, 2. 旭硝子株式会社 商品開発研究所)

○ Kousuke Nakano¹, Tomohiro Sakai²

(1. Innovative Technology Research Center, 2. New Product R&D Center, Asahi Glass Co. Ltd.)

E-mail: kosuke.nakano@agc.com

近年, 計算材料科学・情報科学の技術を活用して材料を探索する「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」に注目が集まっている. MIにおいては, 密度汎関数理論(DFT)に基づいて, 目的の物性, もしくは目的の物性と相関が取れている値(記述子)を計算し, 計算値のデータベースを作成するという試みがなされることが多いため, DFT計算の精度検証は必須の事項となっている. 今回我々は, 半導体の紫外–可視光領域(UV–Vis)領域における光学定数(屈折率 n , 及び減衰係数 k)に注目した. 光学定数は, 色素, 顔料, 薄膜, レンズなどの産業上重要な材料の設計時に利用される基本的な物性であるが, 精度が担保された実験データは少ない. DFTの範囲内では, Tran–Blaha modified Becke–Johnson 交換ポテンシャル(TB–mBJ) [1] と乱雑位相近似(RPA)に基づく誘電関数 [2] を利用して半導体の光学定数を予測することがしばしば行われているが, この計算手法がどの程度実験値を再現できるかについて, 網羅的かつ定量的に検証された結果は今まで報告されていなかった. 本発表では, TB–mBJを利用し, *Handbook of Optical Constants of Solids* (Academic Press, 1985, 1991, 1998) から選択した半導体に対してバンドギャップ E_g , 屈折率 n , 及び減衰係数 k を計算し, 実験値と比較した結果(e.g. 図1)を報告する.

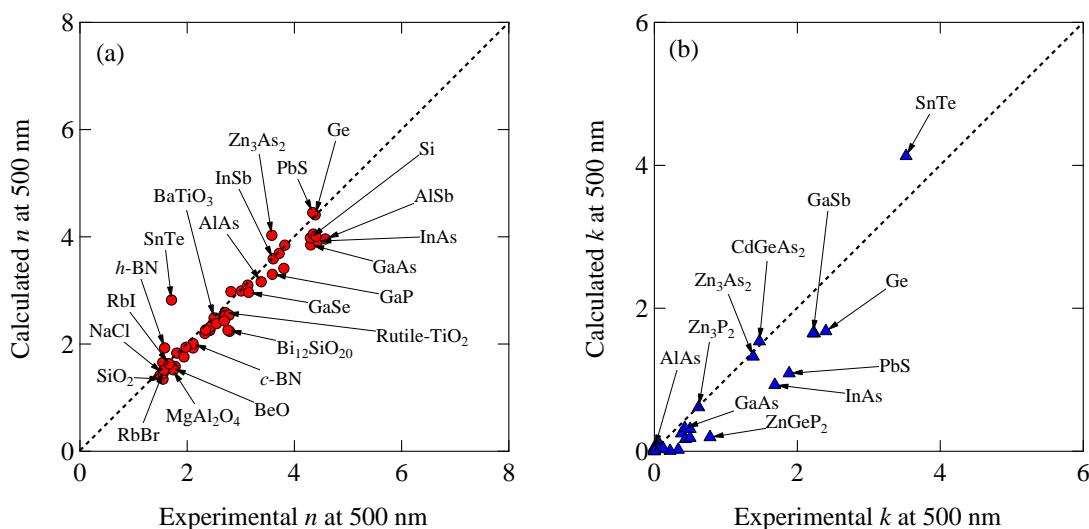


図1: Comparison between DFT calculations and experiments for (a) n and (b) k at 500 nm. [3]

[1] F. Tran and P. Blaha, Phys. Rev. Lett. **102**, 226401 (2009).

[2] C. Ambrosch-Draxl and J. O. Sofo, Comput. Phys. Commun. **175**, 1 (2006).

[3] K. Nakano and T. Sakai, J. Appl. Phys. **123**, 015104 (2018)