

第一原理分子動力学法による 2 次元 GaN の新規構造探索

First-principles molecular dynamics study of two-dimensional bilayer GaN

産総研 CD-FMat¹, 産総研 MathAM-OIL² ○ 屋山巴¹, Anh Khoa Augustin Lu², 森下徹也^{1,2}, 中西毅^{1,2}

AIST CD-FMat.¹, AIST MathAM-OIL.², °Tomoe Yayama¹, Anh Khoa Augustin Lu², Tetsuya

Morishita^{1,2}, Takeshi Nakanishi^{1,2}

E-mail: yayama.tomoe@aist.go.jp

2次元物質はバルク物質とは異なる性質を示すことから近年注目を集めている[1]。特に、ダングリングボンドを持つ2次元物質は環境に応じて種々の構造を示すことが知られており、複雑化する2次元物質の構造と特性の関わりを正しく理解することが求められる[2-4]。本研究ではIII族窒化物の2次元2層シート構造に着目し、第一原理分子動力学(FPMD)法を用いて有限温度下での安定構造を探索し、さらに得られた種々の構造について電子状態の解析を行った。

本研究では、パッケージソフトウェアVASPを用いて、密度汎関数理論に基づくFPMD計算を行った。4×4、6×6、12×12の異なる周期を持つセルを用いて計算を行った。一般化勾配近似(GGA)に基づくPerdew-Burke-Ernzerhof(PBE)らによる交換汎関数を用い、射影演算子補強波法(PAW)に基づく擬ポテンシャルを使用した。k点サンプリングは、4×4と6×6セルを用いた計算では2×2×1のメッシュ点、12×12セルを用いた計算ではΓ点とした。平面波基底のカットオフエネルギーは400eVとした。

FPMD計算の結果、有限温度において準安定状態を含む複数の安定構造が得られた。Fig. 1に構造を示す。(a)はバルクから切り出した構造(Bulk 2-layerモデル)で、初期構造である。(b)はGaとN原子が同一面内に配置した構造(flatモデル)、(c)と(d)はそれぞれバックリングを持ち、本研究において新規に見いだされた構造である(Opt100、Opt1100モデル)。構造安定性の

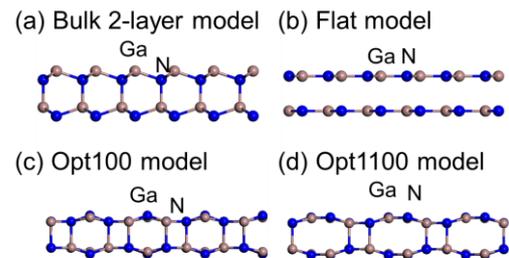


図 1: 2 層 GaN の初期構造と準安定構造。

要因を明らかにするため、構造変化に伴うエネルギー変化を調べた。flatモデルはBulk 2-layerモデルに比べ、約0.4eV/atomエネルギーが低いことがわかった。flatモデルの層間距離を変化させると、距離の増大・減少ともにエネルギーが上昇することから、flat構造はエネルギー極小構造であることがわかり、準安定構造のひとつであると考えられる。実際に、Bulk 2-layerを初期構造として構造最適化を行うと、flatモデルが安定構造として得られることを確認している。しかしながら、flat構造からバックリングを生じさせたOpt-100、Opt-1100はさらに低いエネルギーを示し、バックリングが構造安定化に大きく寄与することが明らかとなった(Opt100とOpt1100のエネルギーはほぼ同じであった)。発表では、電子状態の詳細についても報告する。

【参考文献】

- [1] Y. Gao et al., *Appl. Phys. Express* **9** (2016) 095201.
 [2] Z. Y. Al Balushi et al., *Nat. Mater.* **15** (2016) 1166-1171. [3] M.J.S. Spencer and T. Morishita (Eds.), *Silicene*, Springer, Switzerland 2016. [4] A. K. A. Lu, et al., *J. Phys. Chem. C*, in press.