

酸化物物性の系統的計算

High-throughput calculations of oxide properties

京大工¹, JST さきがけ² ○熊谷 悠^{1,2}

Kyoto Univ.¹, JST PRESTO², °Yu Kumagai^{1,2}

E-mail: yuukuma@gmail.com

【緒言】酸化物は、薄膜トランジスタや大容量不揮発性メモリなどへの応用のみならず、強誘電性、酸素イオン伝導、熱電変換、触媒、光触媒などの基礎研究に関しても盛んに行われている。これら酸化物の持つ性能をより引き出すためには、その物性を高精度かつ系統的に知ることが重要となる。そこで本研究では、既報酸化物に対して網羅的に第一原理計算を実行し、計算材料データベースを構築することを目的とした。

【計算方法】Materials Project[1]に含まれる酸化物を対象に、(1)非磁性である、(2) 0.1 eV 以上のバンドギャップを有する、(3)アニオンが酸素のみで構成されている、(4)空間群が P1 でない酸化物を抽出し、網羅的に第一原理計算を実行した。この時、計算フローの制御とエラー処理には、マテリアルズプロジェクトのプログラム群[2]を基盤に、我々が開発したプログラムを用いた。尚、第一原理計算は VASP コード[3]により行い、交換相関汎関数には PBEsol 型の一般化勾配近似[4]を用いた。

【結果】計算物性値の一例として、3,213 酸化物中の誘電定数とバンドギャップの相関図を右に示す。電子系誘電定数(ϵ_{ele})では、その最大値がバンドギャップとおおよそ反比例の関係があることがわかるが、格子系誘電定数(ϵ_{ion})は負の相関はあるものの、 ϵ_{ele} に見られる程の明瞭な関係性は見られない。またワイドギャップ酸化物の中で高い ϵ_{ion} を示すものが存在するが、これは理論計算により報告されている高压相の岩塩型 BeO である[5]。また一般に ϵ_{ion} は ϵ_{ele} より大きい値を示すことから、高誘電体材料の探索には ϵ_{ion} の最適化が重要であると思われる。本講演では、これら大規模計算データを用いた、機械学習による予測モデル構築についても議論する。

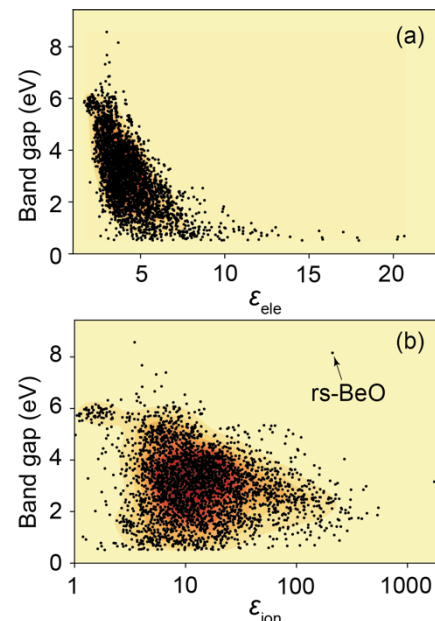


Figure. Calculated (a) electronic and (b) ionic contributions to dielectric constants.

[1] A. Jain *et al.*, APL Mater. **1**, 011002 (2013).

[2] S. P. Ong *et al.*, Comp. Mater. Sci. **68**, 314 (2013); A. Jain *et al.*, Concurr. Comput.: Pract. Exper. **27**, 5037 (2015); K. Mathew *et al.*, Comp. Mater. Sci. **139**, 140 (2017).

[3] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).

[4] J. P. Perdew *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 136406 (2008).

[5] K. Yim, *et al.*, NPG Asia Mater. **7**, e190 (2015).