元素置換した結晶の対称性と第一原理電子・フォノン計算

Symmetry of substituted crystals and first-principles electron and phonon calculation

北陸先端大，○宮田 全展，小矢野 幹夫

JAIST, ○Masanobu Miyata and Mikio Koyano

E-mail: m-miyata@jaist.ac.jp

近年，計算機の性能の向上，第一原理計算のソフトウェアパッケージや高機能 GUI の普及に伴い，第一原理計算が固体物理における研究手法のツールの一つとして一般的になりつつある．中でも，第一原理計算コード OpenMX は，マルチノード並列計算において高い並列化効率[1]を有し，少ない基底で精度よく電子状態を計算できる第一原理計算コードとして注目を集めており，近年では電子輸送計算コード BoltzTraP やフォノン輸送計算コード ALAMODE とのインターフェースも実装された．特に，新規熱電材料のデザインを行う場合には，結晶構造に対して元素置換や欠陥を容易かつ自由に導入することが可能であり，導入した元素置換や欠陥が電子・フォノン輸送物性に及ぼす影響を理論的に調べる研究が精力的に行われている．しかしながら，元素置換や欠陥を導入すると一般には母体結晶の対称性が変化し，第一ブリルアンゾーンの取り方が変わるため，電子・フォノン状態の計算結果に影響を与える可能性がある．

本研究では，結晶対称性の解析ソフトウェアライブラリ Spglib [2]と OpenMX をつなぐインターフェースを開発し，元素置換した結晶の対称性と第一原理計算の結果について考察した．

Figure 1(a), (b)に Mg_2Si のブラベー格子及び基本単位胞の 2×2×1 のスーパーセルについて，(x, y, z) = (0, 0, 0)の Si 原子 1 つを Sn で置換した結晶を示す．(a) は Mg_2Si のブラベー格子に対して Sn を置換したものであり，(b)は Mg_2Si のセルを primitive cell に変換した後， 2×2×1 のスーパーセルを作成し，Sn で置換したものである．Figure 1(a), (b)はどちらも $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$ (x = 0.25)であるが，両者の単位構造を敷き詰めた空間は周期性が異なるため，空間群は Fig. 1(a), (b)において，それぞれ Pm-3m (Cubic)，Cmmm (Orthorhombic)と等しくならない．これは，結晶の周期ポテンシャルは空間の取り方に対して不変であるが，基本単位胞への変換操作と元素置換の操作が非可換のために起こる現象である．

当日は，この元素置換と結晶の対称性の違いが，電子・フォノン計算の結果に与える影響を考察し，報告する．

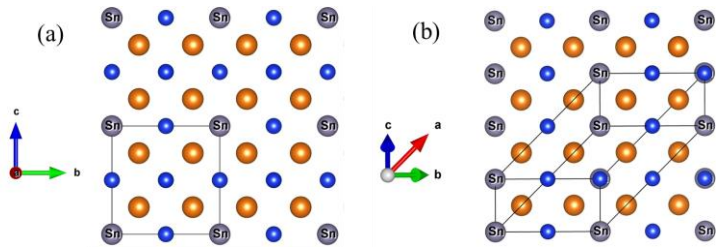

Fig. 1 Crystal structure of $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$ (x = 0.25). (a) Bravais lattice, (b) 2×2×1 primitive cell

[1] 豊田丈紫，的場彰成，宮田全展，小矢野幹夫，石川県工業試験場平成 30 年度研究報告 No. **68**，pp. 25.

[2] A. Togo et al., I. Tanaka, "Spglib: a software library for crystal symmetry search", arXiv:1808.01590 (2018).

© 2022年 応用物理学会