

ホウ素ドーブ非晶質炭素体の特性に関する第一原理分子動力学計算

Ab-initio Molecular Dynamics Study on the Properties of B-doping Amorphous Carbon

岡山大学院自然科学¹, 岡山大基礎研², 岳 強¹, 金山 大志¹, 松尾 航太¹,西川 僚馬¹, 中本 歴¹, 横谷 尚睦², 村岡 祐治²Okayama Univ.¹, Okayama Univ. RIIS.², Qiang Yue¹, Taishi Kanayama¹, Kota Matsuo¹,Ryoma Nishikawa¹, Reki Nakamoto¹, Takayoshi Yokoya², Yuji Muraoka²

E-mail: p37126c5@s.okayama-u.ac.jp

ホウ素ドーブ非晶質炭素体(α -C)の物性に関する実験と理論の研究は少なく、ホウ素ドーブ量に伴う α -Cの物性(sp^3 量や密度など)の変化について一貫した結論はない。密度汎関数理論に基づく分子動力学計算(AIMD)では、理想的な条件を仮想して、電子レベルで材料特性の研究ができる。

本研究では、ホウ素ドーブ α -Cの物性をAIMD計算により調べた。計算には、最先端の量子化学計算コードであるCP2K [1]を使用し、液体急冷法 [2]を活用した。初期構造モデルには、一定の空間にランダムに分布する280個の炭素とホウ素の粒子からなるものを用いた。また、Langevinアンサンブルを採用し、周期境界条件をX、Y、Z方向に設定した。計算において、まず粒子システムの温度を8000 Kに上げ、初期構造の影響を排除し粒子を十分に混合させるように8000 Kで2 psに保持した。続いて、液体状態の系の温度を 4×10^{15} K/sの冷却速度で8000 Kから0 Kまで急冷した。最後に構造最適化を実施した。本研究では、初期構造の密度を2.5 g/cm³に設定し、ホウ素ドーピングを0%、5%、10%、および15%に変えて計算を行った。

Kメッシュ計算にはGamma点のみを使用し、平面波エネルギーカットオフ値は、400 Ryを用いた。DZVP-MOLOPT-SR-GTH基底関数を電子波動関数の展開に、GTH擬ポテンシャルを価電子と原子核との相互作用を表すために、PBE汎関数を交換相関項を表すために使用した [3]。自己無撞着(SCF)収束精度は 10^{-6} に設定した。加えて、計算量を著しく軽減するために、Second-generation Car-Parrinello方法を利用した。その結果、対角化アルゴリズムを使用すれば、SCF収束を加速できることを発見した。

発表では、電子エネルギー準位に対するドーピング量の影響を、局所状態密度分布と部分状態密度分布によって調べた結果を紹介する。

参考文献

- [1] J. Hutter *et al.*, WIREs Comput Mol Sci. **4**, 15 (2014). [2] L. Rao *et al.*, Diam Relat Mater. **111**, 108211 (2021). [3] S. Koley *et al.*, J. Phys.: Conf. Ser. **780**, 012014 (2017).