

格子欠陥の高精度・高速計算手法の開発と電子材料 開拓への応用

P14

Development of Accurate and Efficient Defect Calculation Methods toward
Electronic Materials Exploration

大場 史康 oba@msl.titech.ac.jp

東京工業大学科学技術創成研究院フロンティア材料研究所/元素戦略研究センター

【緒言】物質・材料の設計や探索を行う際、多くの機能が点欠陥、転位、表面、界面といった格子欠陥に由来することを踏まえ、基礎物性のみならず、格子欠陥の特性を考慮することが重要となる。理論計算により高精度かつ系統的な物性・欠陥特性の予測ができれば、材料設計に関する有益な知見が得られるだけでなく、新物質・新材料探索の加速につながると考えられる。我々は東工大電子材料研究拠点において、第一原理計算による半導体の物性・欠陥特性の高精度・高速予測のための手法開発を進め、新物質・新材料の開拓に向けた系統的な計算データの生成並びに *in silico* (計算機中)スクリーニングへと展開している[1-3]。本発表では、その計算手法を概説するとともに、窒化物半導体のドーピング設計や新物質探索への応用例を実験グループによる実証と併せて紹介する。

【半導体のドーピング設計の例】 Cu_3N の固有点欠陥及びドープパントの系統的な第一原理計算の結果に基づいて、図 1 (上)に模式的に示すように、フッ素の格子間サイト挿入による化学ドーピングがその p 型化に有効であることを提案した。この理論予測は、走査型透過電子顕微鏡観察及び電子エネルギー損失分光マッピングによるフッ素の格子間サイト挿入の実証、さらには高移動度 p 型 Cu_3N 薄膜の実現につながっている[1]。

【新物質探索の例】基礎物性及び安定性の観点からの多様な候補物質の *in silico* スクリーニングにより、11 種類の新しい窒化物半導体を提案した[2]。そのうち、図 1 (下)に示す CaZn_2N_2 は、豊富な元素のみで構成され、赤色発光が期待できる直接遷移型のバンド構造や小さな有効質量を持つことから、有望な新物質と考えられる。この理論予測を受けて、実験グループが高圧合成を行った結果、予測通りの結晶構造を有する CaZn_2N_2 が得られ、さらにはバンド端からの赤色発光が実証された[2]。

【結言】以上の事例が示すように、本計算科学的アプローチは、半導体の設計や探索において有効な手法と考えられる。現在、系統的な計算結果の機械学習により物性・欠陥特性の予測モデルを構築することで、予測の飛躍的な効率化を進めるとともに、半導体の物性・欠陥特性の俯瞰的な理解を目指した研究を推進している。

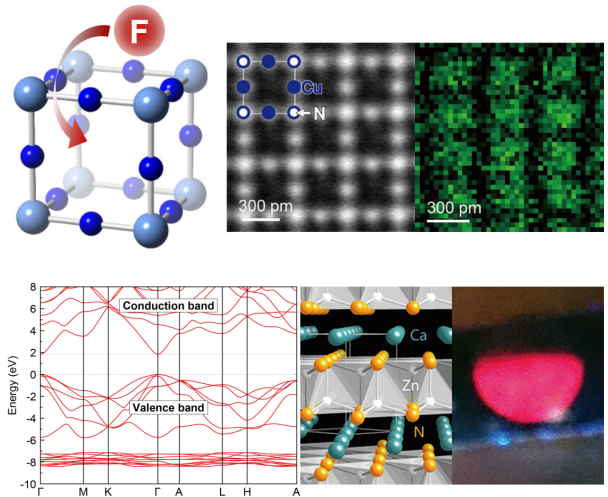


図 1 東工大電子材料研究拠点における理論計算と実験の連携による成果の例。(上)フッ素化学ドーピングによる Cu_3N の p 型半導体化の予測と実験による実証[1]。(下)希少元素を含まず赤色発光を示す新規窒化物半導体 CaZn_2N_2 の予測と実験による実証[2]。

【共著者(所属)】

高橋 亮・熊谷 悠(東京工業大学科学技術創成研究院フロンティア材料研究所)

【関連プロジェクト】

元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>電子材料研究拠点

【参考文献】

[1] K. Matsuzaki, K. Harada, Y. Kumagai, S. Koshiya, K. Kimoto, S. Ueda, M. Sasase, A. Maeda, T. Susaki, M. Kitano, F. Oba, and H. Hosono, "High-mobility p -type and n -type copper nitride semiconductors by direct nitriding synthesis and *in silico* doping design", *Adv. Mater.* **30**, 1801968 (2018).

[2] Y. Hinuma, T. Hatakeyama, Y. Kumagai, L. A. Burton, H. Sato, Y. Muraba, S. Iimura, H. Hiramatsu, I. Tanaka, H. Hosono, and F. Oba, "Discovery of earth-abundant nitride semiconductors by computational screening and high-pressure synthesis", *Nat. Commun.* **7**, 11962 (2016).

[3] A. Grüneis, G. Kresse, Y. Hinuma, and F. Oba, "Ionization potentials of solids: The importance of vertex corrections", *Phys. Rev. Lett.* **112**, 096401 (2014).

【関連 WEB】

[1] <https://www.msl.titech.ac.jp/~oba>