

第一原理計算手法に基づくルチル型TiO₂ 中の酸素空孔挙動の解析

大阪大学 基礎工学研究科

二宮 雅輝, 藤平 哲也, 林 侑介, 酒井 朗

目的 第一原理計算手法により、ルチル型TiO₂中の酸素空孔の挙動および剪断面構造との相関を明らかにする。

内容 ルチル型TiO₂の構造をもとに、(121)剪断面および(132)剪断面を含むスーパーセルモデルを構築し、第一原理計算により最安定構造と酸素空孔形成エネルギーを計算した。計算には第一原理電子状態計算コードであるOpenMXを用いた。

結果 いずれの剪断面構造モデルにおいても、酸素空孔サイトが剪断面に近づくほど、空孔形成エネルギーが高く、不安定になる傾向が見出された。また、(132)剪断面と比べて(121)剪断面は、酸素空孔の形成エネルギーに与える影響がより大きいことが明らかになった。

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ
並列化

SQUID

約5400時間
8.8GB
160並列