

# 第一原理計算手法に基づくルチル型TiO<sub>2</sub>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** メモリスタ特性をはじめとするルチル型TiO<sub>2</sub>の物性に重要な影響を及ぼす酸素空孔の挙動および剪断面構造との相関を第一原理計算により明らかにする。

**内容** 代表的な剪断面である(121)および(132)剪断面を含むスーパーセルモデルを構築し、最安定構造と酸素空孔形成および移動エネルギーを評価した。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、剪断面近傍の酸素サイト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)剪断面近傍の方が酸素空孔の形成エネルギーに与える影響が大きいことが明らかになった。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
利用資源	1,000 SQUIDポイント
使用ソフトウェア	OpenMX
並列化	最大 160 CPU 並列

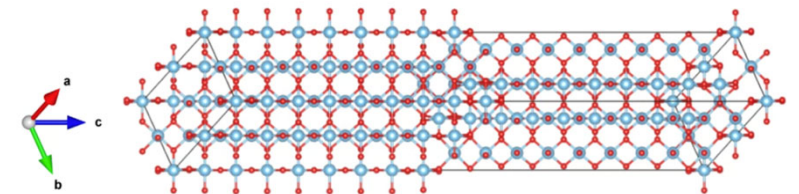


図 構築した(121)剪断面スーパーセルモデル