

# GaPにおける転位コア構造に関するDFT計算

名古屋大学大学院工学研究科 物質科学専攻 星野 聖奈

**目的** DFT計算を用いて、GaPにおけるすべり転位の転位コア構造を求める

**内容** 代表的な化合物半導体、GaPを対象にすべり転位の転位コア構造をDFT計算を用いて解析した。さらにNEB法を用いてすべり転位の運動経路の探索およびその障壁高さの評価を行った。

**結果** GaPのすべり転位は、Siと類似した転位コア構造を有することが判明した。また、その強固な共有結合性に起因して高い運動障壁を持つことが分かった。

## 利用した計算機

OCTOPUS汎用CPUノード群

ノード時間 約5000時間

並列化 4ノード並列

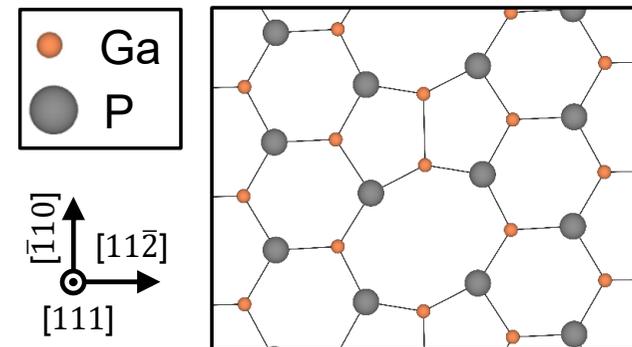


図 最適化計算によって得られたすべり転位の転位コア構造