

# 化合物半導体の転位コア構造の第一原理計算

名古屋大学大学院工学研究科 物質科学専攻 松永克志、横井達矢

目的 化合物半導体の転位コアの原子・電子構造を第一原理計算により解析する。

内容 II-VI族およびII-V族化合物半導体について、 $30^\circ$ 部分転位のコア構造を原子レベルでモデル化して、過剰キャリアの有無が原子・電子構造にどのように影響するかを第一原理計算で解析した。

結果 過剰キャリアによって転位コアに存在する同種原子の結合が切れることで、再構成構造から未再構成構造へと変化することが明らかとなった。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	100 時間
使用メモリ	500 GB
並列化	4ノード 並列

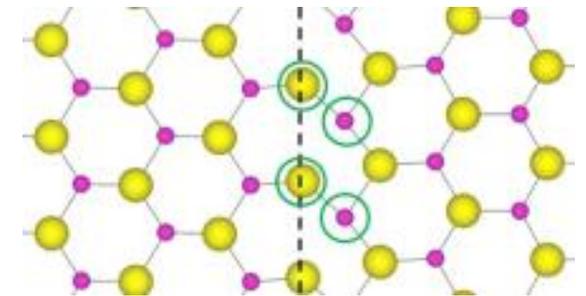


図1 転位コアの原子構造