

Theoretical calculations of Peierls potentials of glide dislocations in inorganic semiconductor crystals

名古屋大学 大学院工学研究科 松永克志

目的 化合物半導体結晶の塑性変形能は、周囲の光環境により大きく変化する。この起源は、塑性変形の担い手である転位と光との相互作用であると考えられている。そこで、光照射により生成されるキャリアと転位の相互作用を電子・原子レベルで解明するため、DFT計算を行った。

内容 すべり転位を含む、500原子から1,000原子程度のスーパーセルを用いて、構造最適化により最安定構造を求めた。DFT計算にはVASP-PAW法を用いた。転位の運動障壁計算にはNEB法を用いた。

結果 キャリアの有無に依存して、転位コアの安定構造が変化することが明らかとなった。また転位コアの安定構造に依存して、転位の運動障壁が大きく変化することを見出した。これらの結果は、これまでの実験結果を合理的に説明しうるものである。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

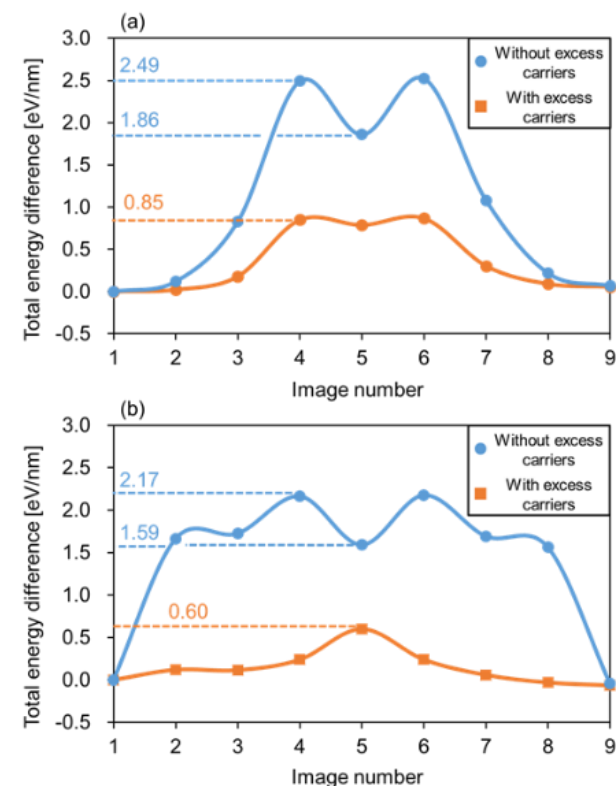


図 NEB計算による転位の運動障壁計算 (GaPの例)