

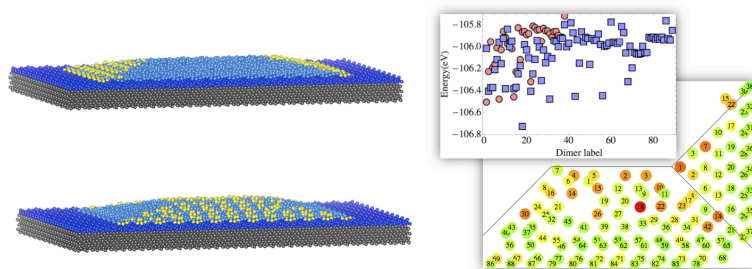
オーダー N 法 DFT プログラムの開発と半導体ナノ構造物質に対する応用

物質・材料研究機構¹、東京理科大学²、University College London³

S. Arapan¹、有田通朗^{1,2}、D. R. Bowler³、宮崎剛^{1,2}

我々は計算時間、必要なメモリ量が系の含む原子数 N に比例するオーダー N 法第一原理計算プログラム CONQUEST を開発してきた。「京」上での最適化、並列化を進めた結果、百万原子系に対しても構造最適化を含む第一原理計算が可能になっていることを最近示している。本講演では、まずプログラム開発として構造最適化と第一原理分子動力学を効率的に行うために最近 CONQUEST に導入した手法を紹介する。これにより、密度行列最適化計算に必要な回数を大きく減らすことに成功したこと、効率的な分子動力学が可能となったことを報告する。

また、応用計算例として Si 表面上に Ge をヘテロエピタキシー成長させた時に現れる 3 次元ナノ構造 (ハットクラスター) の成長過程に関するオーダー N 法大規模計算による研究を報告する。この研究において、我々は 10 万原子を越える系に対しても構造最適化計算に成功している。ハットクラスターはある成長条件下で幅を変えずに長さだけを增加させて成長することが実験結果として報告されている。本研究では最初に、ハットクラスターの構造モデルとして、約 2 万原子を含む横に長いハットクラスターの構造を求めた。計算の結果、高さによって Ge 間の平均距離が異なり、ストレス解放の程度が高さによって変わることを定量的に確認した。さらに、大小二つのファセット面上を Ge ダイマーが単一で吸着する際の多数の吸着位置に対して構造最適化計算を行い、吸着エネルギーの場所依存性を求めた。その結果、1) 頂点や尾根が特に安定、ファセット間の稜線も安定、2) 吸着位置が高い場合がより安定、3) 縦と横のファセット面上で大きな差は見られない、4) ファセット下部はぬれ面上よりも不安定、という結果が得られた。これらから、吸着ゲルマニウムはあるエネルギー障壁を越えた後はハットクラスターの上部に集まるという事が示唆される。さらに、吸着ゲルマニウムがテラス (不完全なファセット面) を形成する際の安定化エネルギーを小さなファセット面上の上部、下部、そして大きなファセット面上の上部から形成する場合について計算した。その結果、小さなファセット面上を上部から埋める場合が初期過程において安定であることが分かった。以上から、ハットクラスターの結晶成長は小さなファセット面の上部から始まると結論される。さらに、最近開始した、Si/Ge コアシェルナノワイヤの構造と電子状態に対する大規模第一原理計算による研究の現状も報告したい。



左図: Si(001)基盤上の Ge 3次元ハットクラスター構造。3次元島構造は4つのファセット面(すべて{105}面)から出来ている。左図上は、小さなファセット面上、左図下は、大きなファセット面上の吸着候補位置。縦 13nm、横 20nm、約 2万原子(19973原子)を含んだ系。

右図: 吸着 Ge ダイマーのエネルギー。丸は小さなファセット上、四角は大きなファセット上の吸着位置に対するもの。右図下は、吸着 Ge のエネルギーの場所依存性。濃い点の方が薄い点より安定