

|          |   |
|----------|---|
| 氏名       | ふくもとあつお<br>福本敦勇   |
| 学位(専攻分野) | 博士(情報学)   |
| 学位記番号    | 論情博第8号  |
| 学位授与の日付  | 平成12年11月24日   |
| 学位授与の要件  | 学位規則第4条第2項該当  |
| 学位論文題目   | First-Principles Pseudopotential Study of Elastic, Electronic, and Structural Properties of Semiconductors and Insulators<br>(第一原理擬ポテンシャル法による半導体, 絶縁体の弾性的性質, 電子状態, 結晶構造の研究) |
| 論文調査委員   | (主査) 教授 宗像豊哲 教授 野木達夫 教授 松波弘之  |

### 論文内容の要旨

本論文は、密度汎関数法と擬ポテンシャル法を用いた第一原理的電子状態計算を結晶材料に応用する場合の計算手法の開発、およびその半導体、絶縁体の物性解析・予測への応用に関する研究をとりまとめたものであり、以下の章から構成されている。

第1章は序論で、本論文の基礎となる多電子系のシュレディンガー方程式を近似する密度汎関数法と、価電子のみを計算対象とするための擬ポテンシャル法の概念が述べられている。

第2章では基礎方程式及び具体的な計算アルゴリズムの詳細が5つの節に分けて述べられており、各節の主題は以下のとおりである。

第1節：電子状態計算の基礎方程式であるコーン・シャム方程式とそれを導き出す局所密度汎関数法。

第2節：原子核と内殻電子を一つのイオンとみなして、計算対象を価電子のみとして、計算の効率化をはかるノルム保存擬ポテンシャル法。

第3節：電子状態と原子配置の両方の自由度に関して同時に最適化を行ない、エネルギー最小の状態を求めるカー・パリネロ法。

第4節：最適化すべき自由度の数が大規模な系での電子状態計算に適した前処理付き共役勾配法のアルゴリズム。

第5節：第2節で述べられたノルム保存擬ポテンシャル法を、電子密度が局在した系に対しても効率よく計算するためのウルトラソフト擬ポテンシャル法。

第3章では、第2章で述べられた手法の、3つの応用計算とその結果が述べられている。

第1の応用(ダイヤモンド、シリコン、ゲルマニウムという周期表の同族に属する原子が作る同じ結晶構造の弾性的性質の違いや類似点の電子論から研究)：結晶の硬さや、歪みに対する応答に関してシリコンとゲルマニウムは類似の性質を持つものに対して、ダイヤモンドは大きな体積弾性率、小さなポアソン比を持つ。その理由を、これらの結晶の体積の違いの影響を取り除くようなエネルギーの無次元化を導入して解析し、シリコン、ゲルマニウムと異なり、炭素は内殻にp電子が存在しないことがその原因であることが示されている。

第2の応用(シリコン・カーバイド中の不純物状態に関する研究)：n型不純物として窒素、p型不純物としてアルミニウムを用いると、2種類考えられる置換位置のうち、より安定な位置で浅い不純物レベルを生成するという、半導体デバイスに好ましい性質が得られるが、p型不純物としてホウ素を用いると、結晶の条件によって安定な位置が異なるという結果が得られている。ここから低抵抗p型結晶を得るには、結晶が炭素過剰であることが望ましいことを予測し、実際この予測の正しさを指示する実験結果も得られていることが述べられている。

第3の応用(絶縁膜として用いられる五酸化タンタルの結晶構造の研究)：五酸化タンタルは斜方晶の構造は明らかになっているが、薄膜状で形成される六方晶の構造は実験では定められていない。本研究では、格子定数や配位数などの限られた情報から推測される構造の候補から、最も安定な構造を決め、これが参照可能な実験値と矛盾しないことが示されている。

第4章はまとめであり、本論文で選ばれた成果について総括している。

### 論文審査の結果の要旨

コンピュータの性能向上にともなって、様々な物理現象のシミュレーションで実験を再現する結果が得られている。本論文は材料物性分野での第一原理計算という大規模数値計算の手法、アルゴリズム、応用計算の結果についてまとめたものであり、得られた成果は以下のとおりである。

1. 論文の前半部では数値計算のアルゴリズムの詳細が述べられているが、その中でカー・パリネロ法において最も計算時間を要する部分、及び前処理付き共役勾配法における前処理部分で、申請者が独自に工夫したアルゴリズムが用いられている。
2. IV族の共有結合型結晶の弾性的性質への応用では、第一原理計算が実験では測定できない詳細な電子論的情報を用いて、ダイヤモンド特有の物性の発現機構の解析に成功している。
3. シリコン・カーバイドの不純物状態への応用では、低抵抗p型不純物を実現するための指針が理論的に提案され、実際にその指針が正しいことを示唆する実験結果も報告されていることから、新材料設計につながる情報を第一原理計算から得ることが可能であることが示されている。
4. 五酸化タンタルの結晶構造の予測では、実験データや経験的パラメータを参照すること無く計算が可能であるという第一原理計算の特徴を生かして、未知の結晶構造をコンピュータで予測可能である例が示されている。

以上、本論文は第一原理計算における大規模数値計算の具体的な計算手法、及びそれを材料物性の解析・予測に応用した結果についてまとめたものであり、学術上、実際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（情報学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成12年8月10日、論文内容とそれに関する事項について諮問を行なった結果、合格と認めた。