

公益財団法人 立松財団 御中
様式 2021 A1,A2,B

2026年 1月 13日

所属: 名古屋大学大学院工学研
究科 物質科学専攻

氏名: 横井 達矢 印

**2023年度助成
研究経過・終了報告書**

※ゴシック文字で記入下さい。

研究テーマ	カルコゲン化合物半導体における機能性格子欠陥の原子・電子構造の解明とナノレベル制御
研究の結果	<p>カルコゲン(S、Se、Te)化合物半導体は、優れたキャリア移動度を示し、元素種によりバンド構造の調整やn型・p型の作製が可能のため、薄膜太陽電池や熱電変換デバイスに不可欠である。他方、実材料では点欠陥や不純物が存在し、通常は多結晶であるため転位や粒界も存在する。格子欠陥がもつ特異な原子構造は、キャリア移動度や熱伝導などの材料特性に著しく影響し、新奇物性の発現も示唆されている。よって次世代技術のニーズを満たすカルコゲン半導体材料の創成には、格子欠陥の原子・電子構造と特性を有機的に理解し、それに基づき有益な『機能性格子欠陥』を積極利用するナノレベル制御が必須である。本研究は、高精度記述子にもとづく多元系ニューラルネットワークポテンシャル(NNP)と第一原理計算を駆使し、カルコゲン半導体における点欠陥、転位、粒界といった格子欠陥の原子・電子構造を決定し、熱・電子特性解析の足掛かりとすることを目的として行った。</p> <p>本研究結果の一例として、代表的な化合物半導体であるPbTeを対象とし、内因的欠陥が格子熱伝導度(κ)に及ぼす影響を解明するため、NNPを構築して摂動分子動力学法(PMD)と組み合わせた。まず、NNPの予測能力を検証した結果、NNPはDFT計算の値を精度良く予測できており、他の点欠陥でも高い予測能力を維持していた。他方、経験的ポテンシャルではデータ点は大きく対角線から逸脱しており、点欠陥への適用は困難である可能性が高い。次に、PMDから得られた各点欠陥によるκの寄与を解析した。点欠陥の種類によってκへの影響は様々であり、格子間位置を占有するPbが最もκを低下させることが示唆された。次に、点欠陥がκに及ぼす影響を解析するため、κをκ^{atom}に分解し、分子シミュレーションから得られる様々な値との相関を調べた。その結果、完全結晶中の原子と点欠陥および点欠陥周りの原子とのフォノン状態密度の差は、κ^{atom}と比較的強い相関を示した。この傾向は調和近似から得られたフォノン状態密度でも見られた。これらの結果より、点欠陥は二次の力定数を通じてポテンシャルエネルギー局面を変化させ、これにより熱輸送が阻害されることがκ低下の要因の一つであると推測される。</p>
研究発表 (実績)	<p>【査読付き論文】</p> <p>・T. Yokoi, S. Fujii, Y. Ogura, K. Matsunaga, Origin of reduced thermal conduction by native point defects in PbTe: Perturbed molecular dynamics with neural network potential, Phys. Rev. B 112 (2025) 024111.</p> <p>【学会発表】</p> <p>・横井達矢、藤井進、小椋優、松永克志、化合物半導体中の点欠陥による格子熱伝導の低下機構の原子レベル解析、日本金属学会 2025年秋期(第177回)講演大会、2025年9月18日</p>

提出期限: 研究期間終了後、すみやかに助成金の「必要経費使途明細書」「領収書」と合わせて提出下さい。
年度をまたぐ場合は毎年3月末日までに、途中経過をご記入の上、報告願います。