

連携講演会シリーズ

第20回 情報統合型研究交流会

協催：第1回 機能性材料研究拠点研究交流会

第一原理計算による アモルファス酸化物半導体の電子構造解析

教授 神谷 利夫



東京工業大学
フロンティア材料研究所
元素戦略研究センター

2016

7 / 19 13:30 – 14:30

NIMS 並木地区 WPI-MANA 棟
オーデトリウム

アモルファス酸化物半導体 (AOS) は、スマホ、ノートPC、大型有機EL TVなどの薄膜トランジスタ用半導体として実用化されている。一方、アモルファスかつ薄膜という制約から、構造解析の実験的手段は限られており、第一原理計算が強力な「実験ツール」となる。本講演では、代表的なAOSであるa-In-Ga-Zn-Oを中心に、原子構造、電子構造、欠陥構造に第一原理計算が果たしてきた役割を紹介したい。構造自由度が大きすぎるアモルファス物質では、計算結果の正当性をどのように保証するかが重要である一方で、実験結果の解釈にも落とし穴が潜んでいることもある。欠陥構造については、局所構造モデルおよび汎関数モデルの選択も結果に大きな影響を与えることがあり、広範な実験結果を含めて総合的な判断が必要になる。

世話人：木野日織、寺倉清之

連絡先：木野日織 内線4770, Kino.hiori@nims.go.jp

拠点運営室 内線6609, mii-i@ml.nims.go.jp