

「理論・シミュレーションによる
より深い材料特性の理解：
第一原理計算によるBNポリタイプ
と関連物質の研究」(公開版)

FP11 First-Principles
Simulation Group II

CMSC



物質・材料研究機構

計算科学センター 第一原理反応グループ

小林一昭

(質問随時OK)

24 December, 2010, イブニングセミナー(虎ノ門、東京)

導入(きっかけ)

- **実験**: 小松等が初めて“**5H-BN**”を合成。
 - S. Komatsu, K. Okada, Y. Shimizu and Y. Moriyoshi, J. Phys. Chem. B **103** (**1999**) 3289.
- **実験**で**30H-BN**を合成、観測
 - S. Komatsu, K. Kobayashi, Y. Sato, D. Hirano, T. Nakamura, T. Nagata, T. Chikyo, T. Watanabe, T. Takizawa, K. Nakamura, and T. Hashimoto: Journal of Physical Chemistry C **114**, 13176 - 13186(**2010**).

導入(はじまり→今頃)

- で、“5H-BN”の電子状態って？。

- K. Kobayashi and S. Komatsu: J. Phys. Soc. Jpn. 76 (2007) 113707.

- で、“30H-BN”の電子状態って？。

- K. Kobayashi and S. Komatsu: "First-Principles Study of 30H-BN polytypes", Materials Transactions, Vol. 51, No. 9 (2010) 1497.

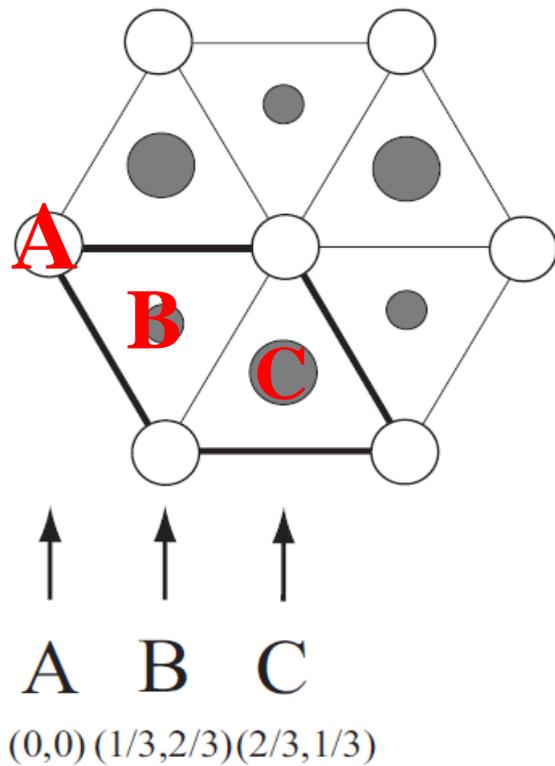
導入(ポリタイプ)

- **ポリタイプ**とは何か？
- **ポリタイプ**: 一次元の多形のこと。
 - 層状構造における c 軸方向の積層の仕方
 - A. R. Verma and P. Krishna: *Polymorphism and Polytypism in Crystals* (Wiley, New York, 1966).
- **SiC (シリコンカーバイド)** は、ポリタイプとして有名。実験、理論共多数の研究あり。

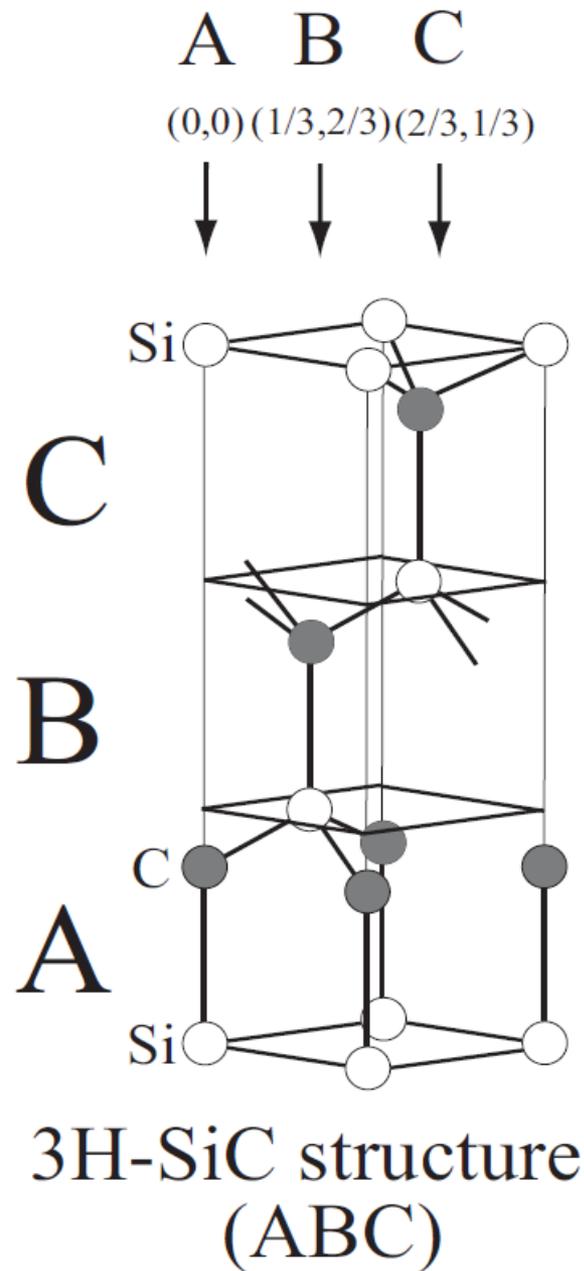
ここで扱うポリタイプ構造

- BN (2H~6H, 10H, 12H, 30H)
AIN(2H~6H, 10H, 12H, 30H)
SiC(2H~6H, 8H, 10H, 12H, 18H)
– 18H-SiC, 30H-AIN: 未だ計算途上
- **Hexagonality:** $H = \text{Number of hexagonal bilayer} / (\text{Total number of bilayer}) = h / (h+c)$
- ↓次は具体的なポリタイプ構造を示す。↓

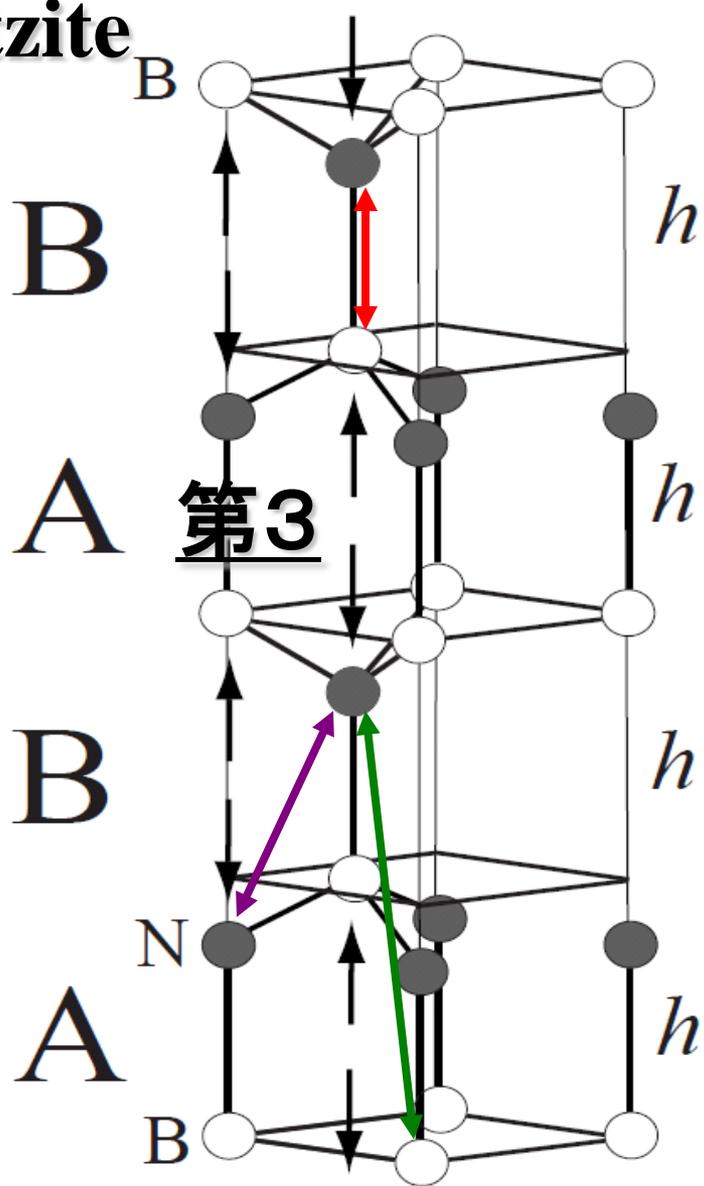
Top view



六方晶ポリタイプの
原子位置



Wurtzite



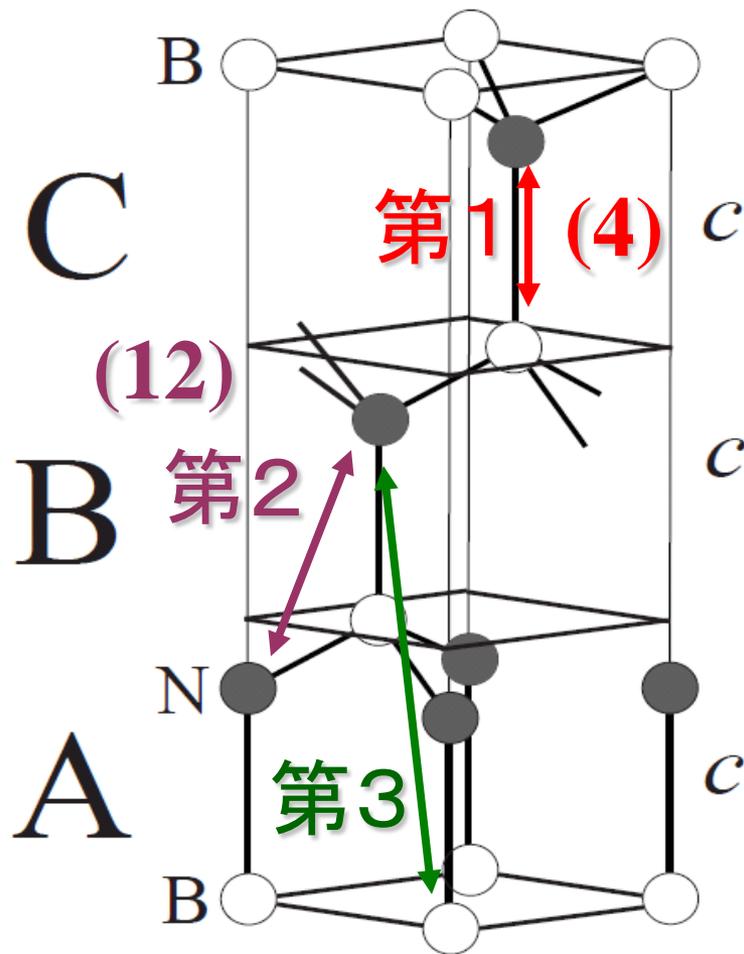
2H-BN structure
(AB)

$P6_3mc$

$H = 100\%$

$3H \Leftrightarrow 3C(\text{ZB})$

$H = 0\%$, $P3m1$



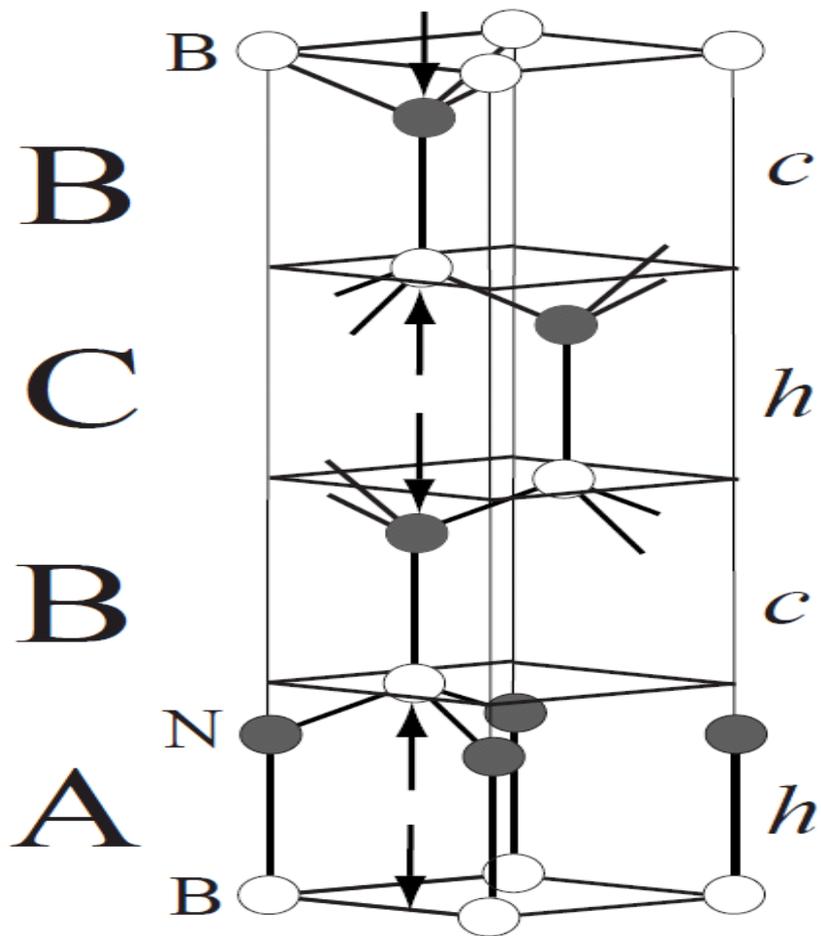
3H-BN structure
(ABC)

(*) 5Hまで唯一

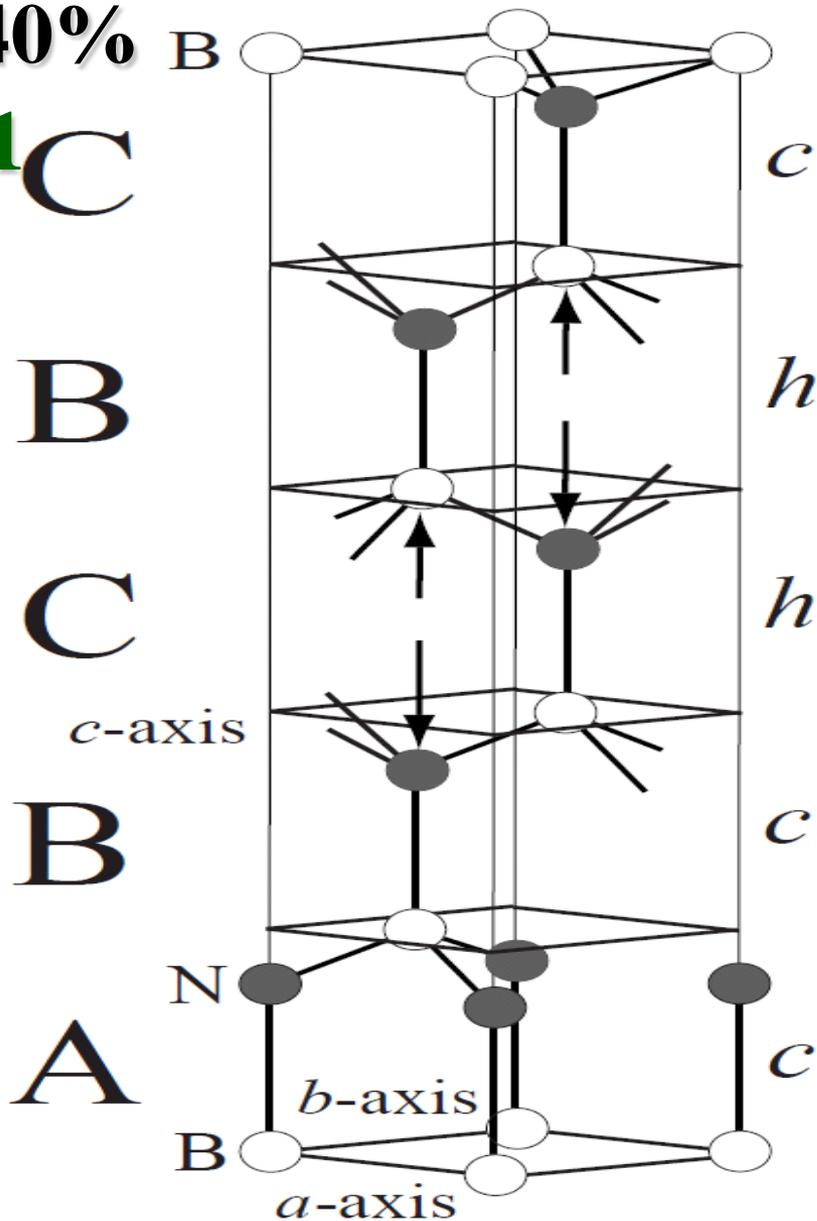
$H = 40\%$

$P3m1$

$H = 50\%$, $P6_3mc$



4H-BN structure
(ABCB)



5H-BN structure
(ABCBC)

5Hの積層の仕方(AA, BB, CC: ×)

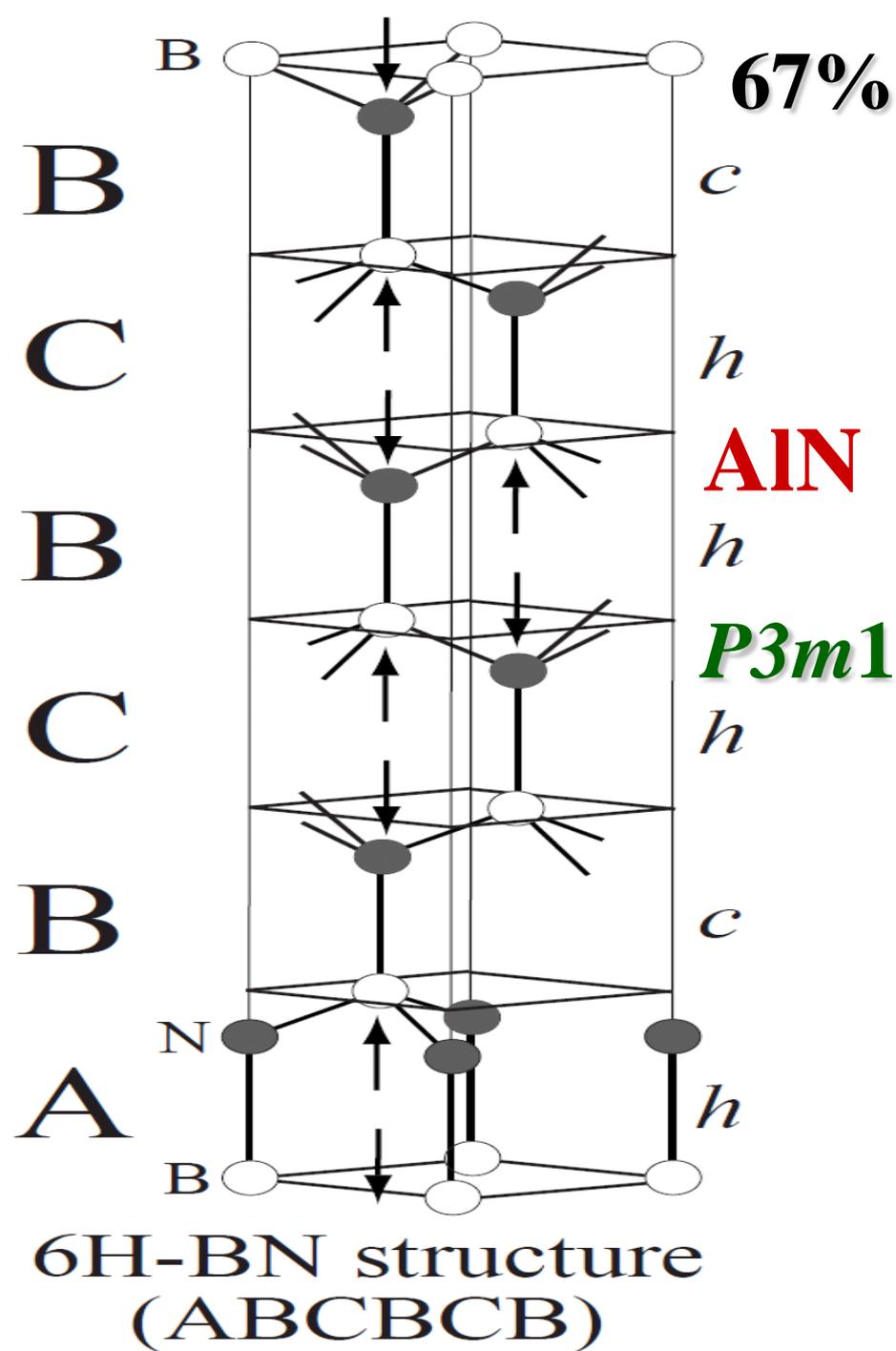
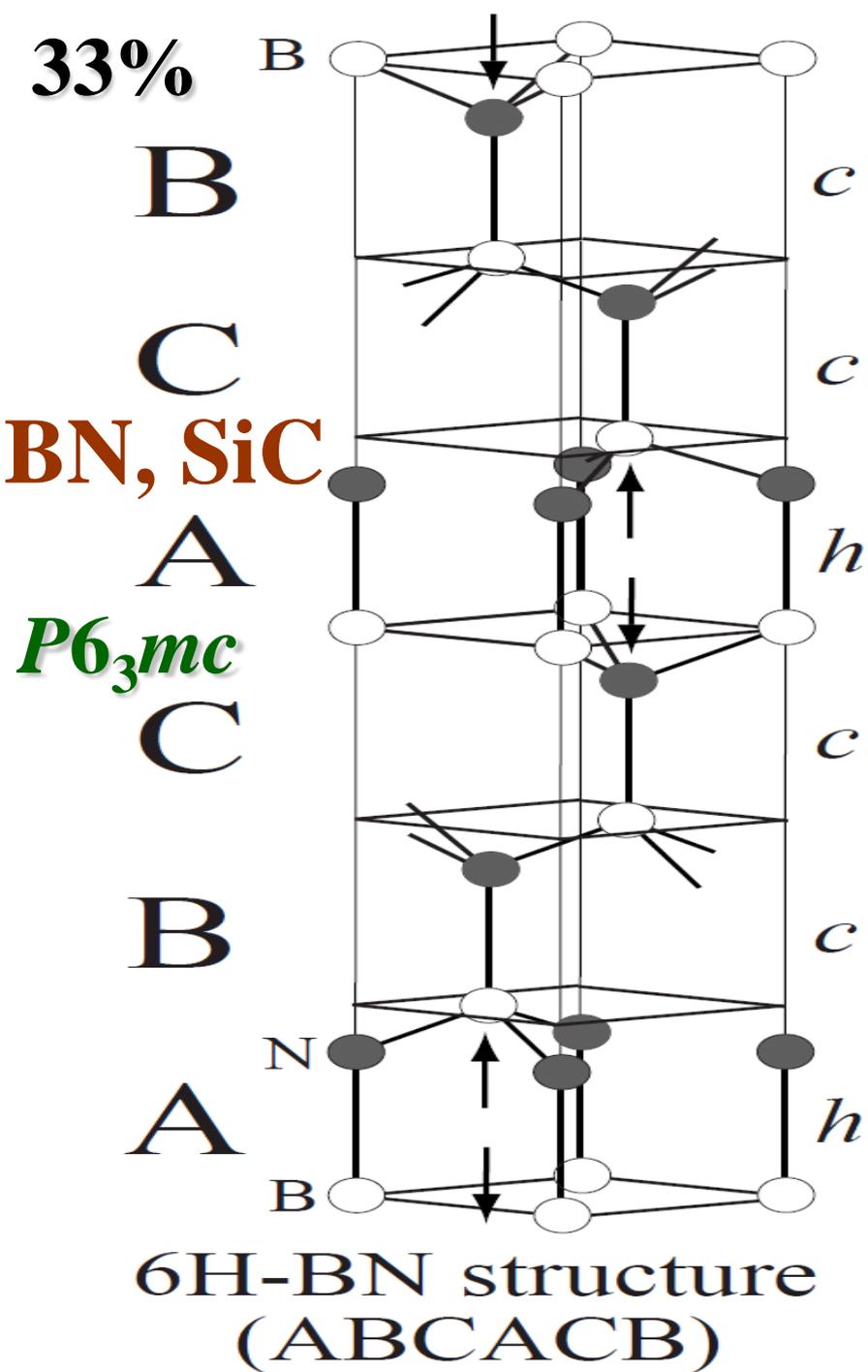
- ABCBC
- ABCAB
- ABCAC
- ACBAC
- ACBAB
- ACBCB
- ABABC
- ABACB
- ACACB
- ACABC
- BACAC
- BACBC
- BACBA
- BCABC
- BCACA
- BCABA
- BABAC
- BABCA
- BCBAC
- BCBCA
- CBABA
- CBACB
- CBACA
- CABCA
- CABCB
- CABAB
- CACAB
- CACBA
- CBCAB
- CBCBA

積層パターンの変換

- いくつかの変換方法
- $|ABCBC|ABCBC|ABCBC| \leftarrow |$: 境界(をずらす)
- $A|BCBCA|BCBCA|BCBC \leftarrow BCBCA$
- $AB|CBCAB|CBCAB|CBC \leftarrow CBCAB$
- $ABC|BCABC|BCABC|BC \leftarrow BCABC$
- $ABCB|CABCB|CABCB|C \leftarrow CABCB$
- $A \rightarrow B \rightarrow C \quad (A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow A \dots)$
- **ABCBC**
- **BCACA \rightarrow ABCAC**
- **CABAB \rightarrow ABCAB**
- $(A \rightarrow B, B \rightarrow A), (A \rightarrow C, C \rightarrow A), (B \rightarrow C, C \rightarrow B)$
- $ABCAB \rightarrow \underline{C}BAC\underline{B} \rightarrow BC\underline{A}BC \rightarrow CB\underline{A}CB \rightarrow \underline{C}AB\underline{C}A$
- $(0,0)$ 軸の周り180度回転 $(1/3, 2/3) \rightarrow (-1/3, -2/3) = (2/3, 1/3)$

いろいろな記法

- ABC記法: ABCABCABCACB ← 12H
- B|A B C A B C A B C A C B|A
- B-A+B+C+A+B+C+A+B+C+A-C-B-A
- | + + + + + + + + + - - - | Hägg記法
- - | + + + + + + + + + - - - | +
- -h+c+c+c+c+c+c+c+c+h-c-c-h+...
- **c|hcccccccchcc|h** h-c記法 (h-k記法、Jagodziniski記法、h: hexagonal, c: cubic)
- + + + + + + + + + - - - ← 93 (Zhdanov記法)
- “|”: 境界 (単位胞の境界)



6Hの積層の仕方(AA, BB, CC: ×)

- ABCACB ABCBAC ACBABC ACBCAB ABACBC ACABCB
- BACABC BACBCA BCABAC BCACBA BABCAC BCBACA
- CABBCA CABACB CBACAB CBABCA CACBAB CBCABA
- -----
- **ABCBCB** ACBCAC ABACAB ABABAC ACABAB ACACBC
- BACABA BCACAC BABACA BABCBC BCBABC BCBCBA
- CABABA CBABCB CACACB CACBCA CBCACA CBCBAB
- -----
- **ABCBAB** ACBCBC ABABCB ABACAC ACACAB ACABAC
- BACACA BCACBC BABABC BABBCA BCBABA BCBCAC
- CABACA CBABAB CACABA CACBCB CBCACB CBCBCA
- ↑6H-polytype ← 可能な積層パターン:54通り → 2つの構造が存在する(**ABCACB**と**ABCBCB=ABCBAB**)。

CBABCB

扱ったポリタイプの数

- 8Hには**6個**、10Hには**18個**、12Hには**58個**、18Hには**2435個**、**30Hポリタイプ**に至っては**600**万以上の構造が存在する。
 - J. E. Iglesias: *Acta. Cryst.* A**62**(2006) 178.
- **全てを計算することは不可能。**
- **10H,12Hでは6つ、18Hでは1つ、30Hでは2つのポリタイプ構造を選んで計算。**
- **[15][15]構造 (1515ではない) H = 6.7 %**
- **21 11111111111111111111111111111111 12構造
H = 93.3 % (↑Zhdanov notation↑)**

(計算説明編) 第一原理計算とは

- **第一原理**: 「何ら実験結果に依らない。」こと。
- 実験結果に依らないとは? → 実験結果が先験的に存在し、それに計算結果を合わせるような調整、或いは調整パラメータが存在しないこと。
- ただ“**第一原理**”の解釈は、分野や研究者個々でも少しずつ異なる(**十人十色**)。
- **第一原理計算**: ここで考えているのは、固体の電子状態(電子構造)を、**第一原理**に基づいた近似手法で**求める**計算である。これは、“**バンド計算**”(第一原理バンド計算)とも言われる。

固体でのバンド計算

- 固体とは？ → **周期的境界条件**を持った構造 = 完全結晶 (結晶構造) → **バンド理論** (固体 ← 原子)
- ↑ バンド計算ではこれが **大前提** となる。
 - 勿論、これは **現実** と相容れない。 → 不純物、欠陥等の存在。表面や界面もそのままでは扱えない。
- どうやって固体内の電子状態を **求める** (数値的に解く) か？ **[詳細な説明は省略]**
 - ブロウホの定理 + 周期的境界条件: 結晶全体 → **単位胞**
 - 逆格子空間 \Leftrightarrow 実空間 ← **FFT** (高速フーリエ変換)
 - ブリュアン・ゾーン: **k** 点
 - 断熱近似 (原子核の動きに電子が 素早く追隨)

具体的に電子(電子状態)を解く

- 密度汎関数法(密度汎関数理論)
 - 電子の密度に関する**変分問題** → KS方程式
 - $H\Psi_i = \varepsilon_i\Psi_i$ Ψ : 電子の波動関数 [固有値問題]
 - $H = -1/2\Delta + \underline{V_{\text{ext}} + V_H + V_{\text{ex}}}$, V_{ext} : 外部ポテンシャル
 - $\underline{V_{\text{ext}} + V_H + V_{\text{ex}}}$ ← 電子有効ポテンシャル部分
 - $\rho(\mathbf{r}) = \sum_i |\Psi_i(\mathbf{r})|^2$ ← $\rho(\mathbf{r})$: 電子密度、 V_H : クーロン項
 - ↑ 自己無撞着(**つじつまの合うよう**)に解くこと[繰り返し計算]
- 電子間の相互作用 ($V_H + V_{\text{ex}}$) → **交換項** (V_e) ← ハートリー・フォック近似(HF) $V_{\text{ex}} = V_e + V_c$
- **相関項**(相関部分: V_c): **真の全エネルギー**からHFによる**全エネルギー**を差し引いた**残りの部分**
- 如何に**交換・相関項**を記述するか?【難問】→ その一便法が**局所密度近似**(他にも方法あり): 説明は省略

計算方法と問題点

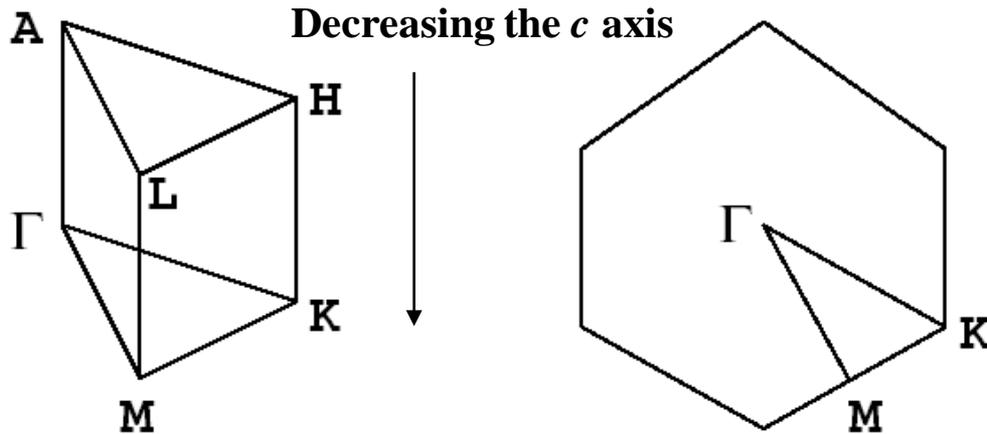
- **FPMD: First-Principles Molecular Dynamics**
- **第一原理分子動力学法**
- 密度汎関数法 + 局所密度近似計算は バンドギャップ を過小評価する。
- **$T = 0 \text{ K}$** ← 基底状態
- Bulk (完全結晶) ← 周期的境界条件 (制限)
 - 不純物、積層欠陥等は考えない。

解いて得られるもの

- **バンド構造**: ブリュアン・ゾーン内の k 点と対応する電子のエネルギー固有値($E(k)$)によって描かれる分散曲線(E - k 分散)。
- **状態密度**: エネルギー当りの電子の状態数
- **電荷密度 (電子密度)**: 実空間における電荷 (電子) の密度
- **全エネルギー**: バンド計算が扱った系の総エネルギー。絶対零度、零圧力での全エネルギーは、内部エネルギー($T = P = 0$)に相当。直接比較出来る場合は、安定性の議論が可能。→凝集エネルギー、形成エネルギー

ここで扱うブリュアン・ゾーン

• 六方晶のブリュアン・ゾーン



Hexagonal BZ

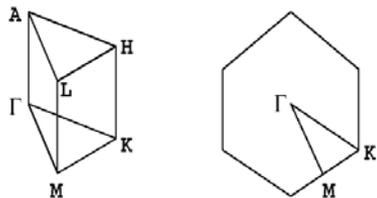
〔↓厳密ではない表現に注意↓〕

- **ブリュアン・ゾーン** (逆格子空間での周期的単位)
内をメッシュで区切った点を“**k点**”と言う。
- **k点**上の電子の固有状態(固有値)を結んだ
曲線→バンド構造(分散曲線、E-k曲線)

計算条件

- カットオフエネルギー: 144 Ry (平面波基底数)
- k点: **12x12x2/IBZ** ~ 12x12x8(18x18x12)/IBZ
- 交換相関項: von-Barth and Hedin(**BH**) [一部、Wigner]
- ノルム保存擬ポテンシャル(価電子のみ) + 平面波基底(→波動関数)
- 擬ポテンシャルデータベース(**NCPS2K**)
- 構造最適化(安定構造を求めること)
- 第一原理分子動力学計算(広い意味でのカー・パリネロ法)

ここから具体的計算結果



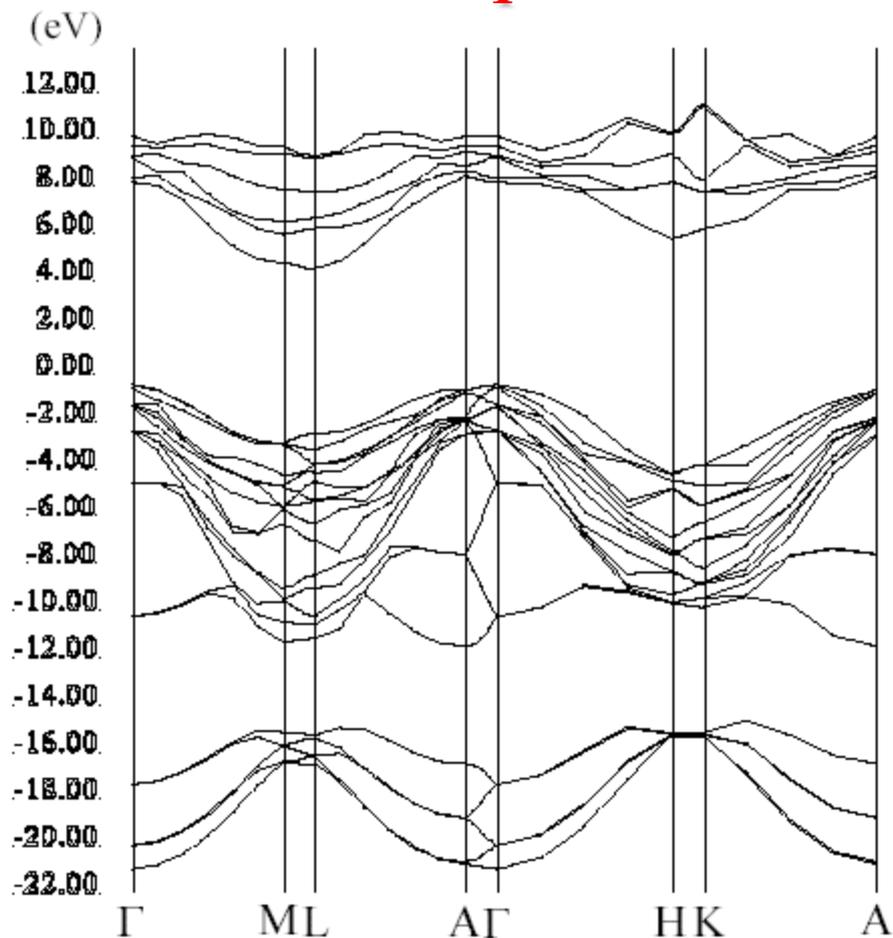
$$\Delta_1 - \Delta_2 = 2.09 \text{ eV}$$

$$\Delta_1 = 4.93 \text{ eV}$$

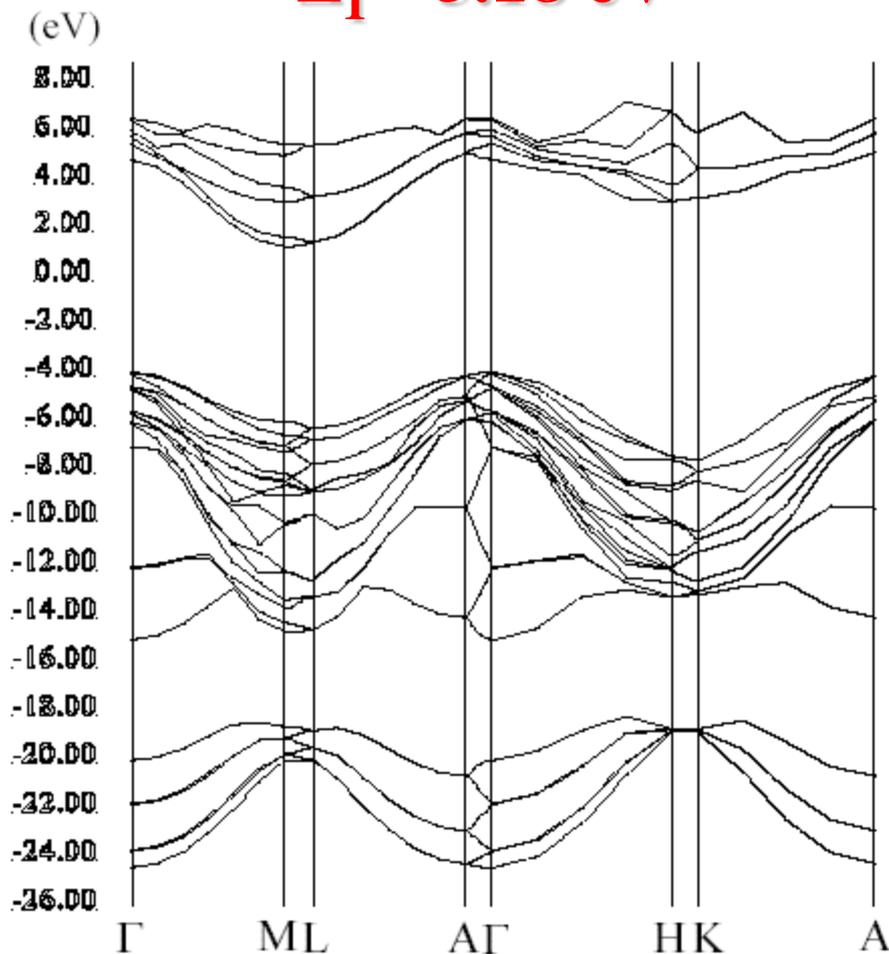
$$\Delta_1 - \Delta_2 = 2.08 \text{ eV}$$

$$\Delta_1 = 5.18 \text{ eV}$$

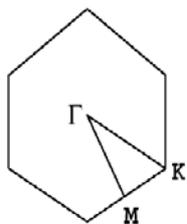
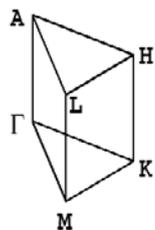
Hexagonal BZ



5H-BN(ABCBC) $\Gamma - L$



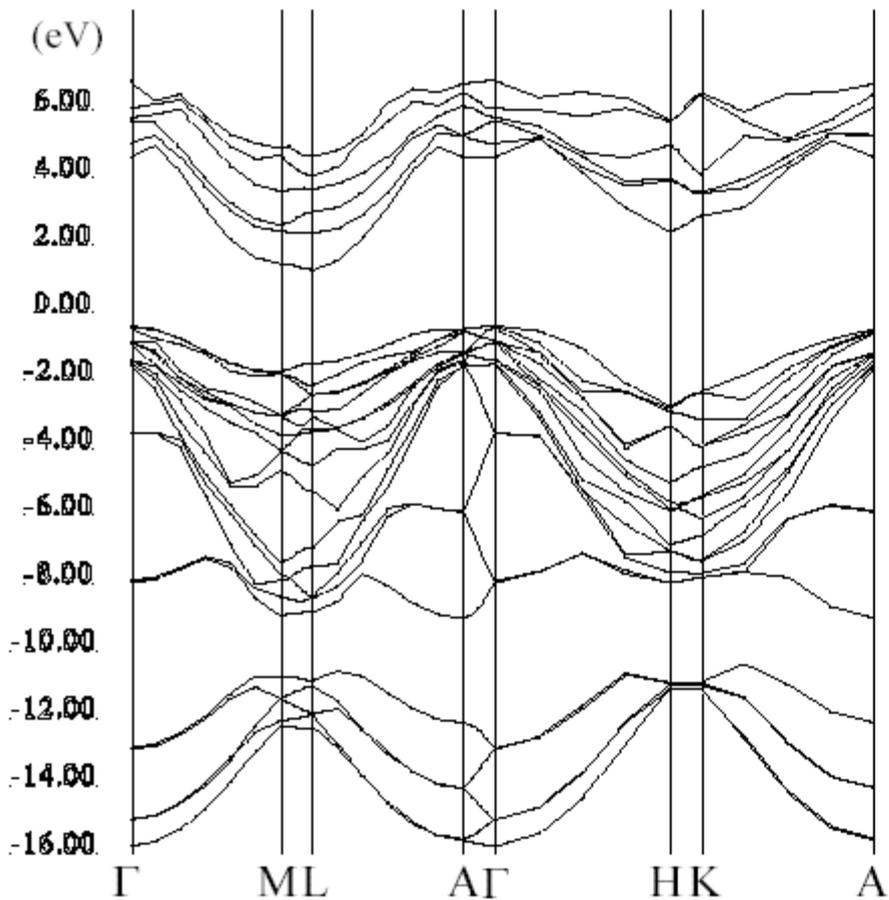
6H-BN(ABCACB) $\Gamma - M$



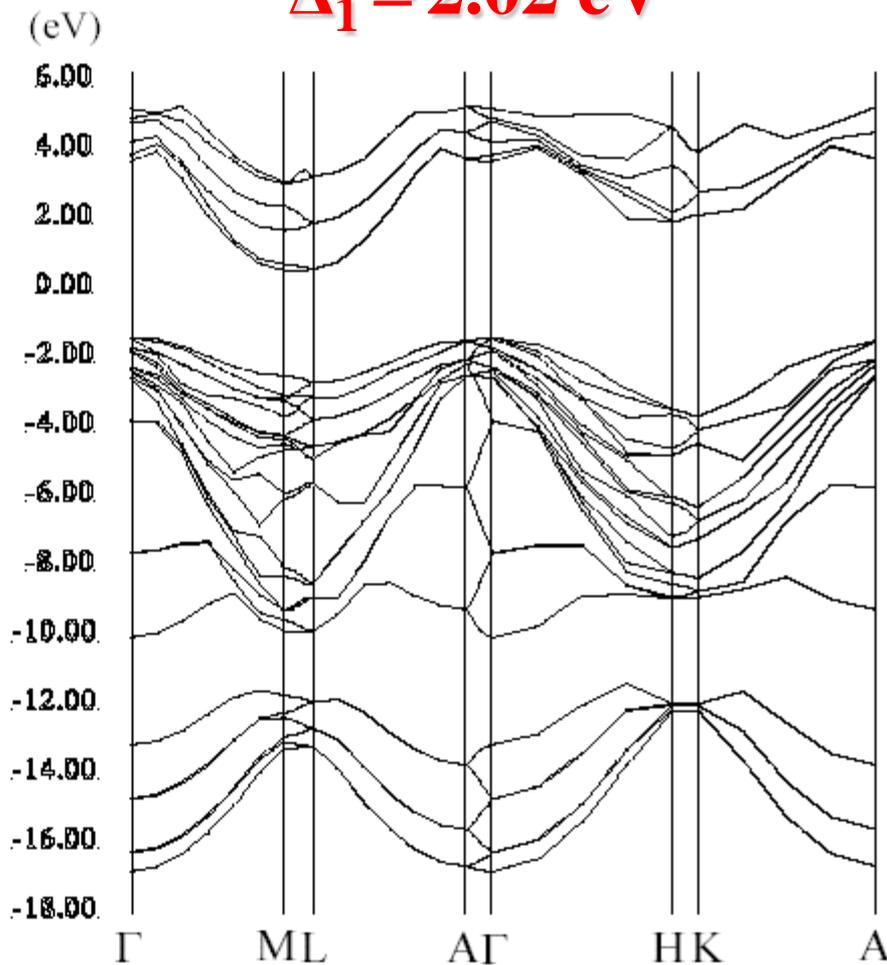
$\Delta_1 - \Delta_2 = 1.12 \text{ eV}$
 $\Delta_1 = 1.74 \text{ eV}$

$\Delta_1 - \Delta_2 = 1.1 \text{ eV}$
 $\Delta_1 = 2.02 \text{ eV}$

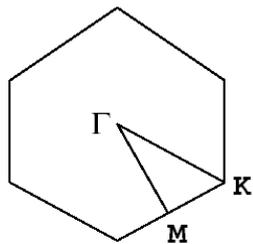
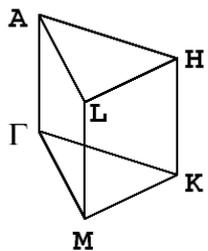
Hexagonal BZ



5H-SiC(ABCBC) $\Gamma - L$



6H-SiC(ABCACB) $\Gamma - U$



$H = 33\%$

Hexagonal BZ

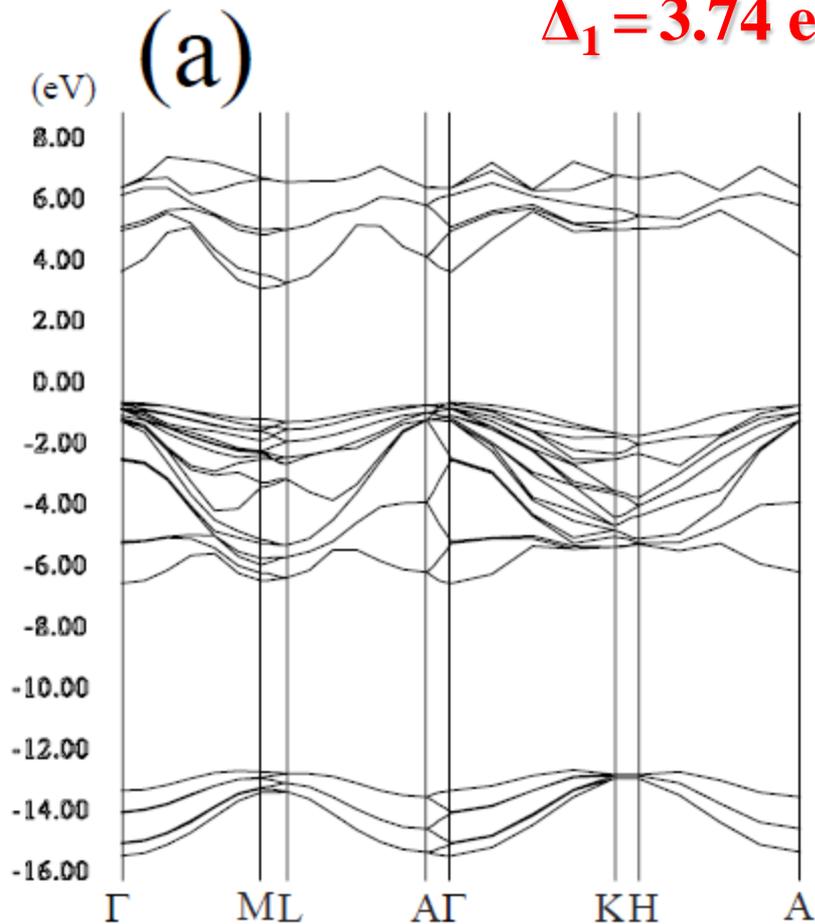
$$\Delta_1 - \Delta_2 = 0.53 \text{ eV}$$

$$\Delta_1 = 3.74 \text{ eV}$$

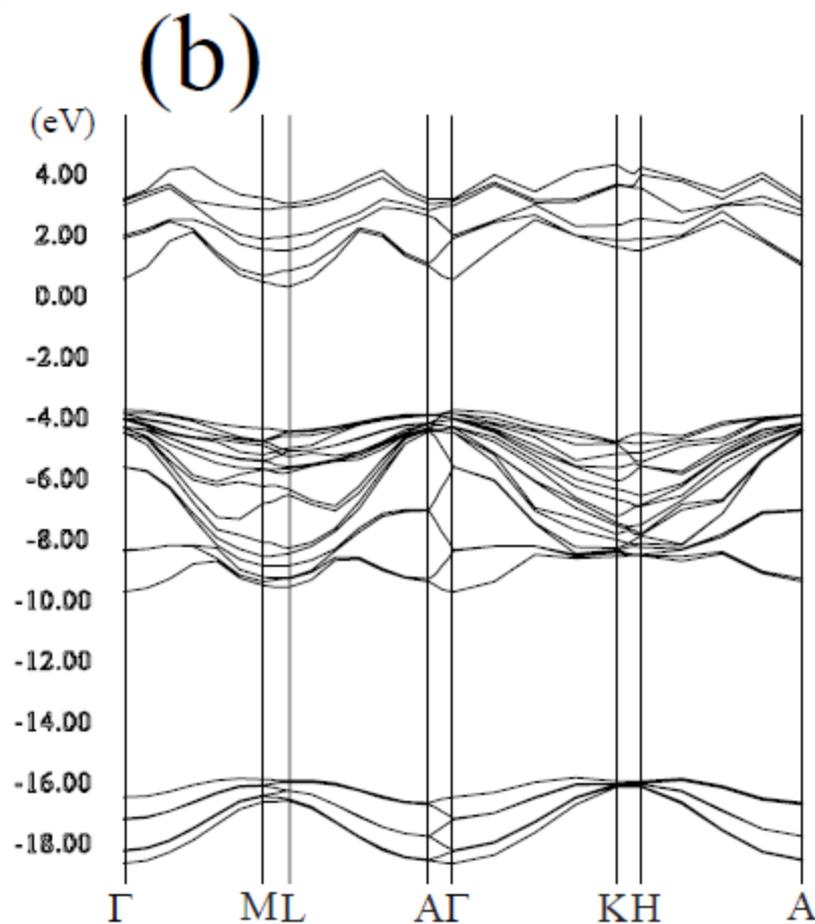
$H = 67\%$

$$\Delta_1 - \Delta_2 = 0.23 \text{ eV}$$

$$\Delta_1 = 4.06 \text{ eV}$$



6H-AlN(ABCACB) $\Gamma - M$

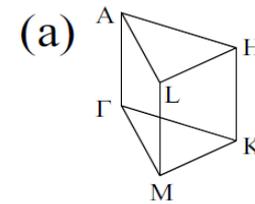


6H-AlN(ABCBCB) $\Gamma - L$

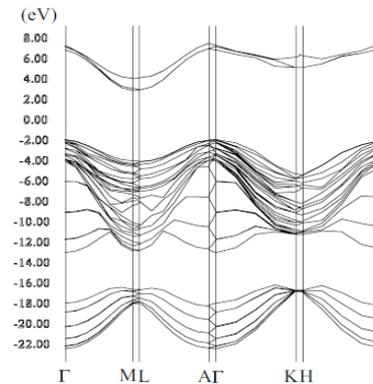
10Hには18個のポリタイプ構造がある。今回の計算では6つ($H = 20, 40, 60, 80\%$)を選んだ。

左側： $H = 20\%$, $P6_3mc$

右側： $H = 40\%$, $P3m1$



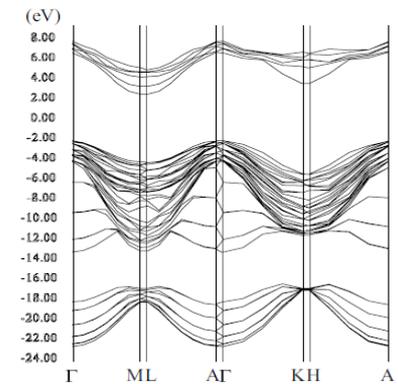
(b) **4.80 eV**



10H-BN(ABCABCBCB)

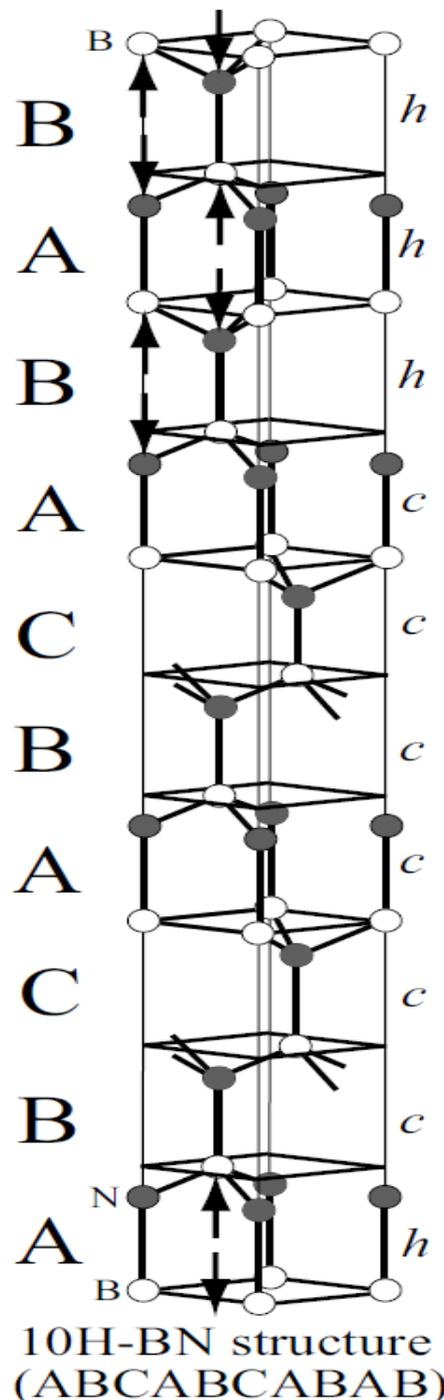
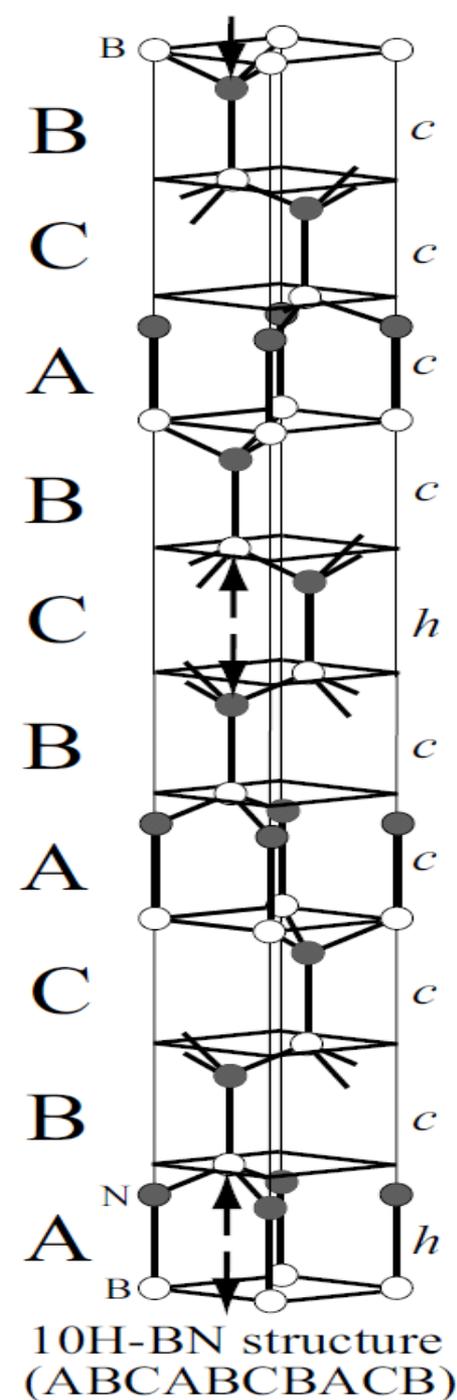
$\Gamma - M$

(c) **4.64 eV**



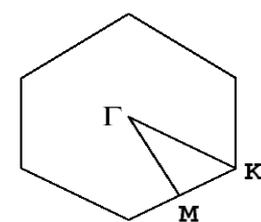
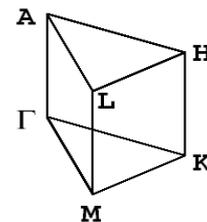
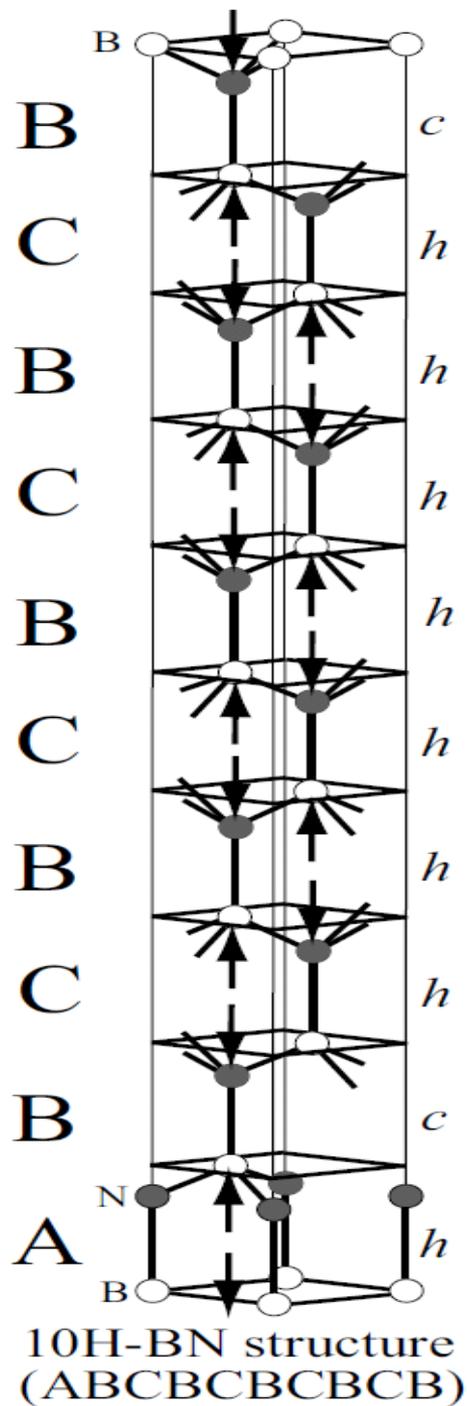
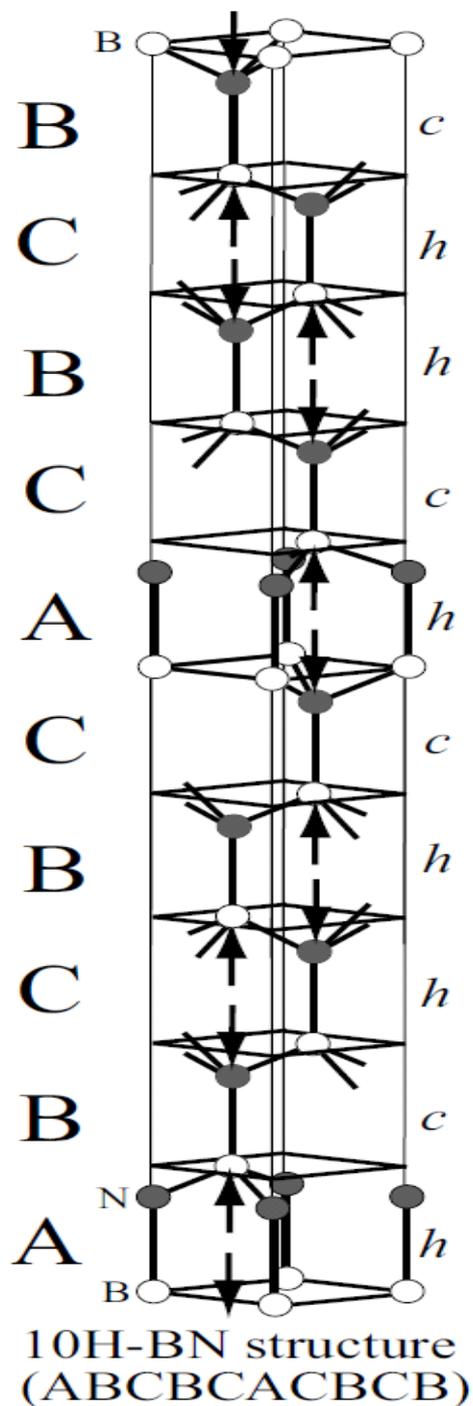
10H-BN(ABCABCABAB)

$\Gamma - M$



左側： $H = 60\%$, $P6_3mc$

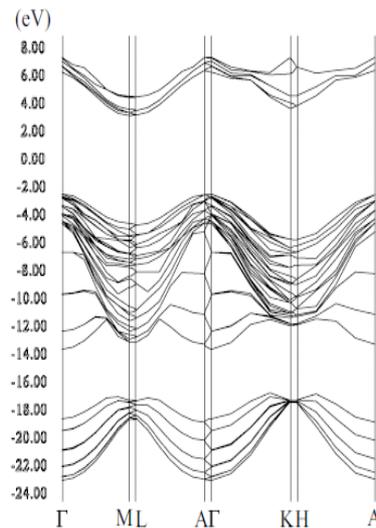
右側： $H = 80\%$, $P3m1$



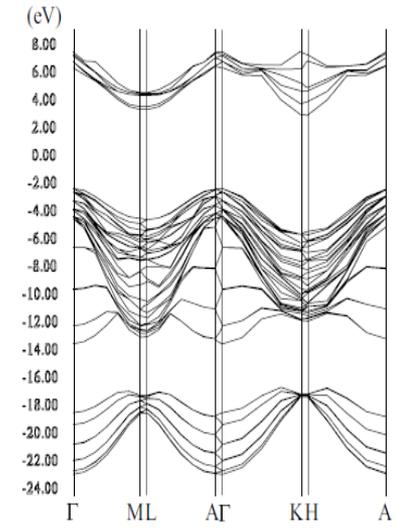
Hexagonal BZ

(a) **5.63 eV**

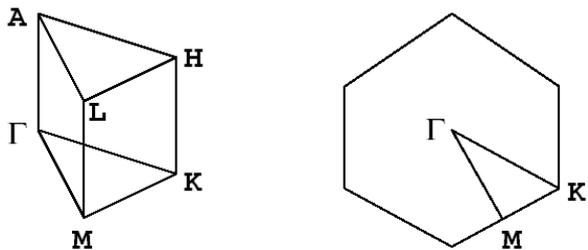
(b) **5.27 eV**



Γ -M

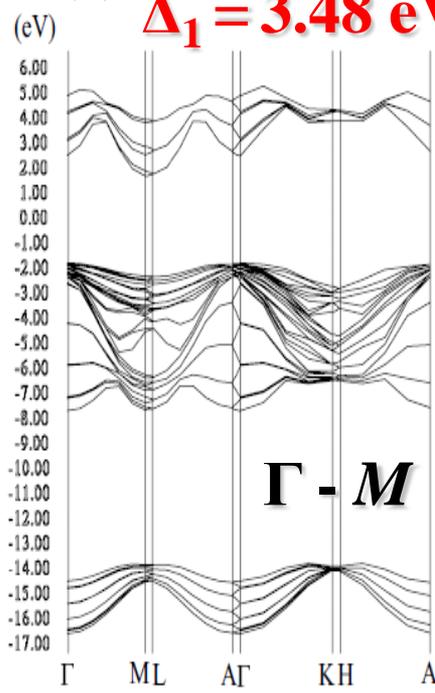


Γ -H



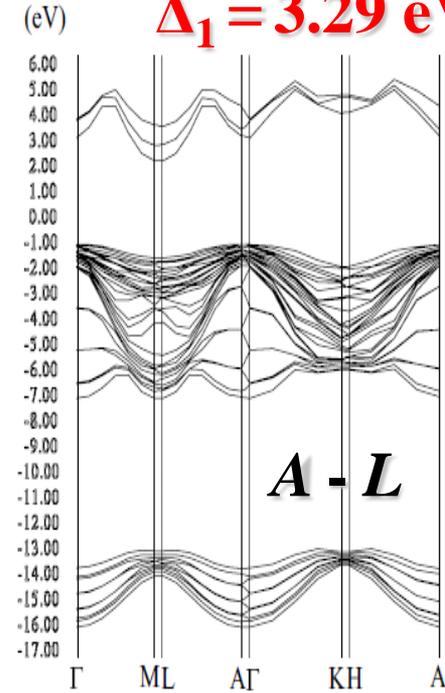
Hexagonal BZ

(a) $\Delta_1 - \Delta_2 = 0.51 \text{ eV}$ $\Delta_1 = 3.48 \text{ eV}$ (b) $\Delta_1 - \Delta_2 = 0.52 \text{ eV}$ $\Delta_1 = 3.29 \text{ eV}$



10H-AIN(ABCABCACBCB)

$H = 20\%$

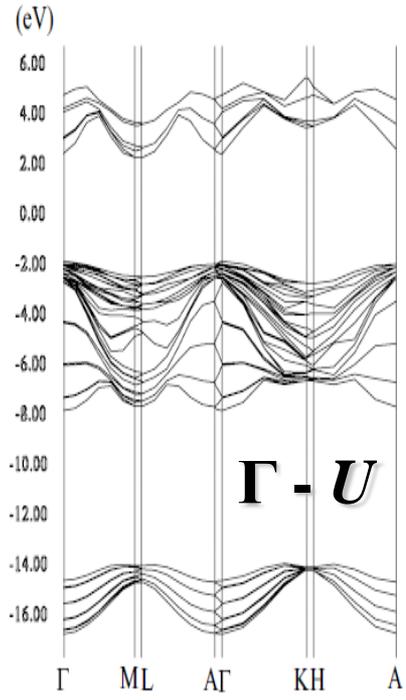


10H-AIN(ABCABCABAB)

$H = 40\%$

$\Delta_1 - \Delta_2 = 0.15 \text{ eV}$ $\Delta_1 = 4.15 \text{ eV}$

(a)

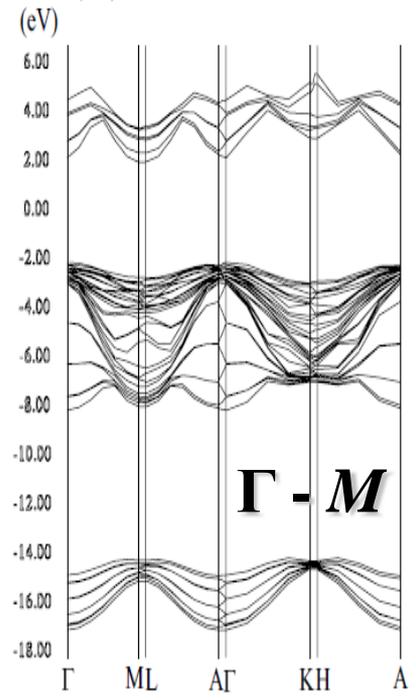


10H-AIN(ABCBCACBCB)

$H = 60\%$

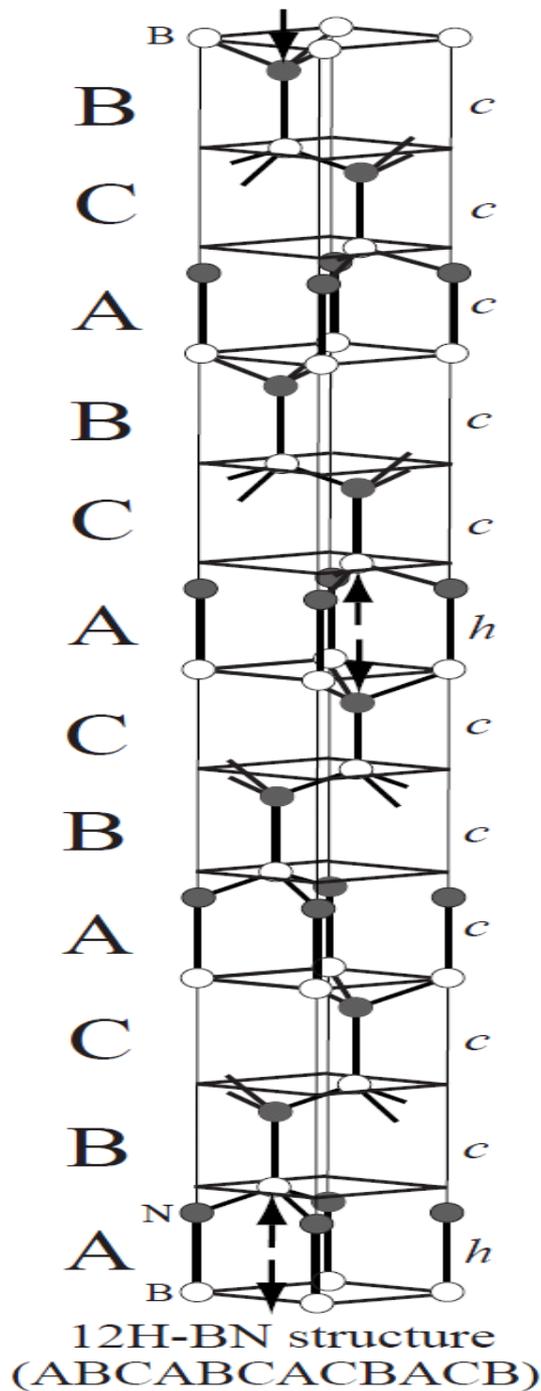
$\Delta_1 - \Delta_2 = 0.19 \text{ eV}$ $\Delta_1 = 4.09 \text{ eV}$

(b)



10H-AIN(ABCBCBCBCB)

$H = 80\%$



- ← 12H-BN: ABCABCACBACB, $H = 17\%$
 12H-BN: ABACABCBCACB, $H = 50\%$
 12H-AlN: ABCACACACACB, $H = 67\%$
 12H-AlN: ABCBCACACBCB, $H = 67\%$
 12H-AlN: ABCBCBCBABAB, $H = 83\%$
 12H-AlN: ABCBCBCBABAB, $H = 83\%$
 12H: $P6_3mc$

$\Delta_1 - \Delta_2 = 2.05 \text{ eV}$

$\Delta_1 = 4.71 \text{ eV}$

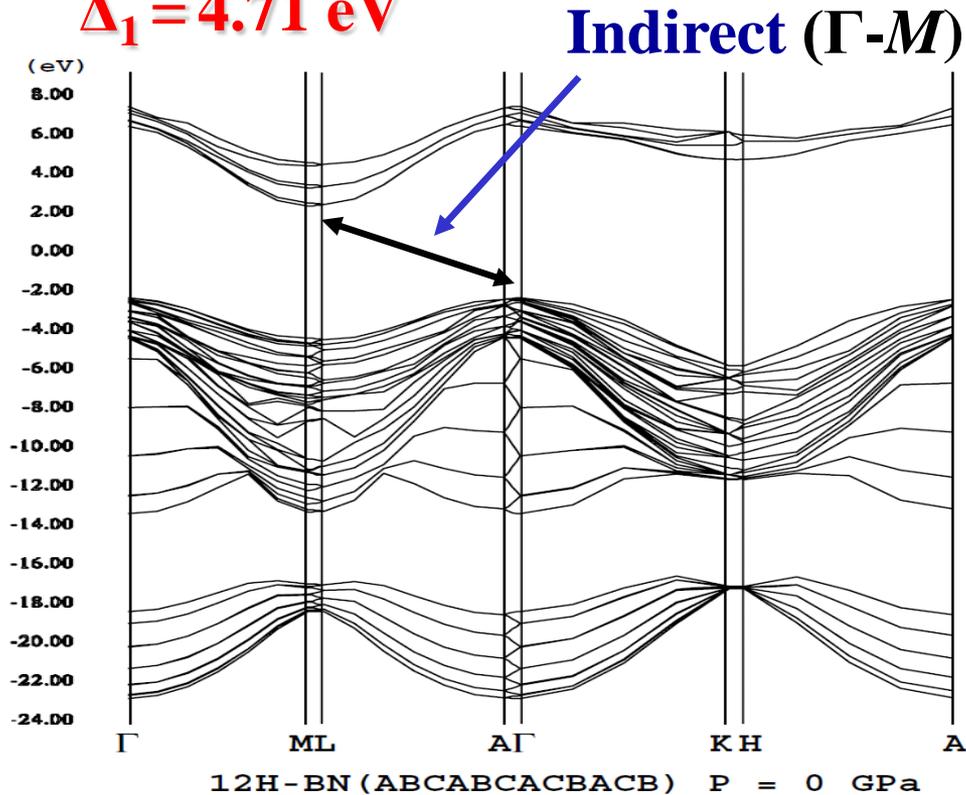
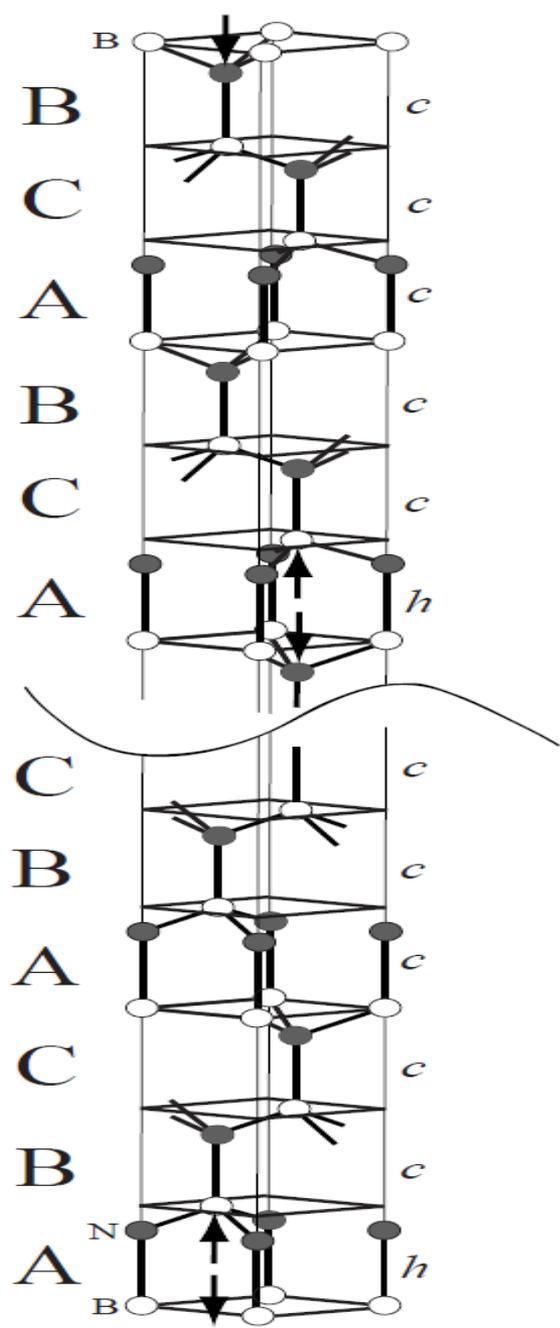


Table 2.

| | c | c/p | a | c/a | E_{tot} (eV) | ΔE (meV) | H (%) |
|----------------------|--------|--------|--------|--------|-----------------------|------------------|---------|
| 2H-BN(AB) | 0.4164 | 0.2082 | 0.2516 | 1.655 | -710.54046 | 75 | 100 |
| 30H-BN(ABC—BCB) | 6.2416 | 0.2081 | 0.2517 | 24.802 | -710.54620 | 69 | 93.3 |
| 12H-BN(ABCBCBCBABAB) | 2.4944 | 0.2079 | 0.2517 | 9.908 | -710.55524 | 60 | 83.3 |
| 10H-BN(ABCBCBCBCB) | 2.0780 | 0.2078 | 0.2518 | 8.253 | -710.55851 | 57 | 80 |
| 12H-BN(ABCACACACACB) | 2.4904 | 0.2075 | 0.2519 | 9.886 | -710.56786 | 48 | 66.7 |
| 6H-BN(ABCBCB) | 1.2451 | 0.2075 | 0.2519 | 4.943 | -710.57003 | 46 | 66.7 |
| 10H-BN(ABACBCBCAB) | 2.0742 | 0.2074 | 0.2520 | 8.232 | -710.57400 | 42 | 60 |
| 10H-BN(ABCBCACBCB) | 2.0739 | 0.2074 | 0.2520 | 8.231 | -710.57656 | 39 | 60 |
| 12H-BN(ABACABCBCACB) | 2.4862 | 0.2072 | 0.2521 | 9.863 | -710.58289 | 33 | 50 |
| 4H-BN(ACB) | 0.8287 | 0.2072 | 0.2521 | 3.288 | -710.58435 | 31 | 50 |
| 10H-BN(ABCABCABAB) | 2.0702 | 0.2070 | 0.2522 | 8.210 | -710.58694 | 29 | 40 |
| 5H-BN(ABCBC) | 1.0349 | 0.2070 | 0.2522 | 4.104 | -710.58917 | 26 | 40 |
| 10H-BN(ABCACBCACB) | 2.0699 | 0.2070 | 0.2522 | 8.209 | -710.59127 | 24 | 40 |
| 12H-BN(ABCABACABACB) | 2.4821 | 0.2068 | 0.2522 | 9.841 | -710.59512 | 20.5 | 33.3 |
| 6H-BN(ABCACB) | 1.2411 | 0.2069 | 0.2522 | 4.921 | -710.59556 | 20 | 33.3 |
| 10H-BN(ABCABCACB) | 2.0659 | 0.2066 | 0.2524 | 8.187 | -710.60316 | 12.5 | 20 |
| 10H-BN(ABCABCBACB) | 2.0659 | 0.2066 | 0.2523 | 8.187 | -710.60365 | 12 | 20 |
| 12H-BN(ABCABCACBACB) | 2.4782 | 0.2065 | 0.2524 | 9.819 | -710.60556 | 10 | 16.7 |
| 30H-BN(ABC—ACB) | 6.1903 | 0.2063 | 0.2525 | 24.516 | -710.61139 | 4.2 | 6.7 |
| 3H-BN(ABC) | 0.6187 | 0.2062 | 0.2526 | 2.449 | -710.61563 | 0 | 0 |
| 3C-BN | 0.3572 | - | 0.3572 | 1.000 | -710.61563 | 0 | 0 |

Table 3.

| | c | c/p | a | c/a | E_{tot} (eV) | ΔE (meV) | H (%) |
|-----------------------|--------|-------|-------|--------|-----------------------|------------------|---------|
| 3C-AIN | 4.380 | - | 4.380 | 1.000 | -671.63794 | 79 | 0 |
| 3H-AIN(ABC) | 7.586 | 2.529 | 3.097 | 2.449 | -671.63793 | 79 | 0 |
| 30H-AIN(ABC-ACB)(*) | 75.810 | 2.527 | 3.098 | 24.472 | -671.64226 | 74 | 6.7 |
| 12H-AIN(ABCABCACBACB) | 30.297 | 2.525 | 3.099 | 9.776 | -671.65010 | 66 | 16.7 |
| 10H-AIN(ABCABCACB) | 25.251 | 2.525 | 3.100 | 8.147 | -671.65523 | 61 | 20 |
| 6H-AIN(ABCACB) | 15.120 | 2.520 | 3.102 | 4.875 | -671.66201 | 55 | 33.3 |
| 12H-AIN(ABCABACABACB) | 30.244 | 2.520 | 3.102 | 9.750 | -671.66244 | 54 | 33.3 |
| 5H-AIN(ABCBC) | 12.590 | 2.518 | 3.103 | 4.058 | -671.66655 | 50 | 40 |
| 10H-AIN(ABCABCABAB) | 25.198 | 2.520 | 3.103 | 8.122 | -671.66927 | 47 | 40 |
| 12H-AIN(ABACABCBCACB) | 30.185 | 2.515 | 3.105 | 9.723 | -671.67498 | 42 | 50 |
| 4H-AIN(ABCBC) | 10.061 | 2.515 | 3.105 | 3.241 | -671.67513 | 41 | 50 |
| 10H-AIN(ABCBCACBCB) | 25.136 | 2.514 | 3.106 | 8.092 | -671.68569 | 31 | 60 |
| 12H-AIN(ABCACACACACB) | 30.123 | 2.510 | 3.108 | 9.693 | -671.68771 | 29 | 66.7 |
| 6H-AIN(ABCBCB) | 15.059 | 2.510 | 3.108 | 4.846 | -671.68783 | 29 | 66.7 |
| 12H-AIN(ABCBCACACBCB) | 30.121 | 2.510 | 3.108 | 9.693 | -671.68819 | 28 | 66.7 |
| 10H-AIN(ABCBCBCBCB) | 25.068 | 2.507 | 3.110 | 8.060 | -671.70176 | 15 | 80 |
| 10H-AIN(ABACACACAB) | 25.067 | 2.507 | 3.110 | 8.060 | -671.70177 | 15 | 80 |
| 12H-AIN(ABCBCBCBABAB) | 30.050 | 2.504 | 3.111 | 9.659 | -671.70202 | 15 | 83.3 |
| 12H-AIN(ABCBCBCBCBCB) | 30.050 | 2.504 | 3.111 | 9.659 | -671.70203 | 15 | 83.3 |
| 30H-AIN(ABC-BCB)(*) | 75.003 | 2.500 | 3.113 | 24.092 | -671.71010 | 6 | 93.3 |
| 2H-AIN(AB) | 4.994 | 2.497 | 3.115 | 1.603 | -671.71654 | 0 | 100 |



30H-BN structure

(ABCABCABCABCABCACBACBACBACB)

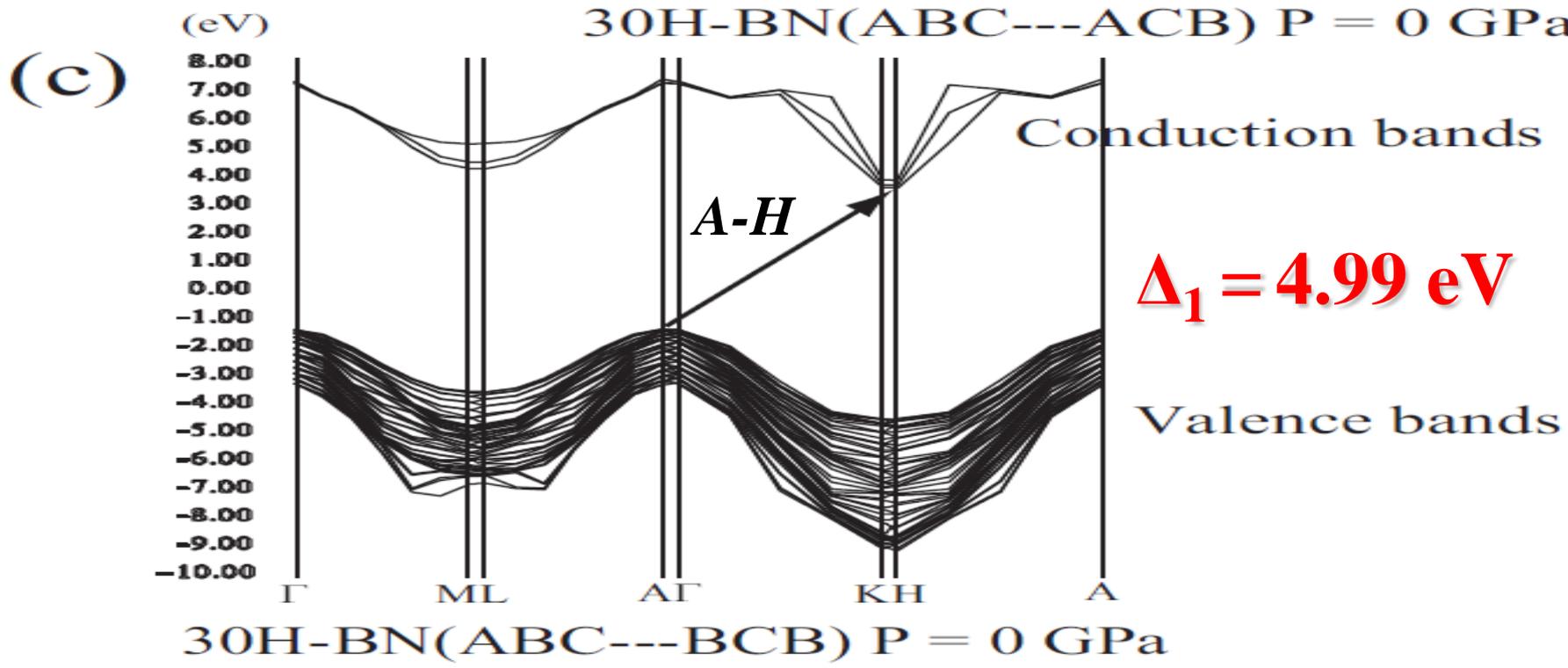
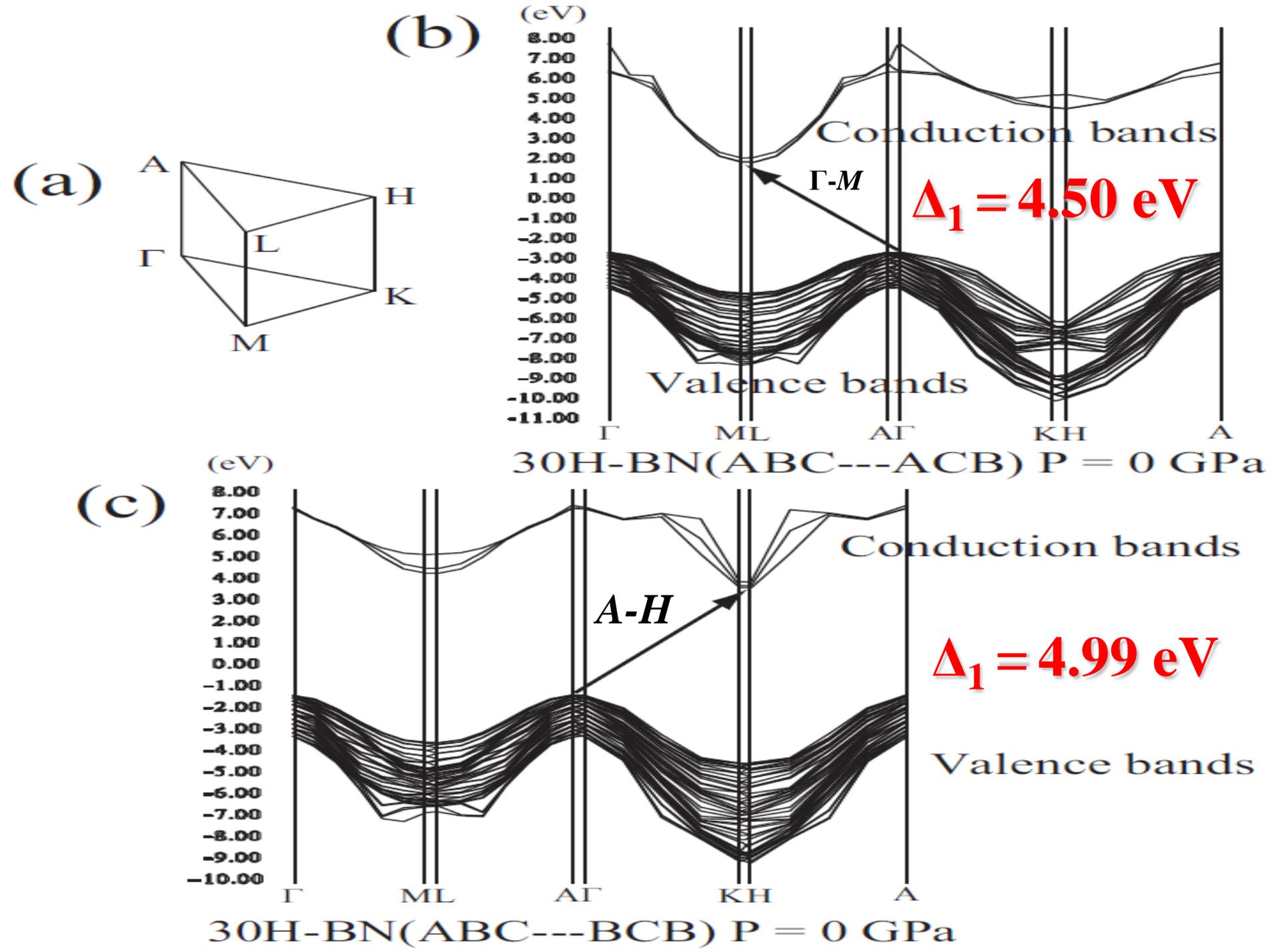


Table 6.

| | | Δ_1 | Δ_2 | VBM - CBM | H (%) |
|----------------------|----------|------------|-------------------|---------------------|---------|
| 30H-BN(ABC—ACB) | indirect | 4.50 | 6.54 (M) | Γ - M | 6.7 |
| 30H-BN(ABC—BCB) | indirect | 4.99 | 7.85 (M) | A - H | 93.3 |
| 12H-BN(ABCABCACBACB) | indirect | 4.71 | 6.76 (M) | Γ - M | 16.7 |
| 12H-BN(ABCABACABACB) | indirect | 4.96 | 7.04 (M) | Γ - M | 33.3 |
| 12H-BN(ABACABCBCACB) | indirect | 5.26 | 7.37 (M) | Γ - M | 50 |
| 12H-BN(ABCACACACACB) | indirect | 5.17 | 7.32 (M) | Γ - L | 66.7 |
| 12H-BN(ABCBCBCBABAB) | indirect | 5.48 | 7.87 (M) | Γ - H | 83.3 |
| 10H-BN(ABCABCBACB) | indirect | 4.80 | 6.85 (M) | Γ - M | 20 |
| 10H-BN(ABCABCABCB) | indirect | 4.62 | 6.68 (M) | Γ - M | 20 |
| 10H-BN(ABCABCABAB) | indirect | 4.64 | 6.75 (M) | Γ - M | 40 |
| 10H-BN(ABCACBCACB) | indirect | 5.22 | 7.30 (M) | Near Γ - M | 40 |
| 10H-BN(ABCBCACBCB) | indirect | 5.63 | 7.76 (M) | Γ - M | 60 |
| 10H-BN(ABCBCBCBCB) | indirect | 5.27 | 7.84 (M) | Γ - H | 80 |
| 6H-BN(ABCACB) | indirect | 5.18 | 7.26 (M) | Γ - M | 33.3 |
| 6H-BN(ABCBCB) | indirect | 5.60 | 7.89 (U) | Γ - L | 66.7 |
| 5H-BN(ABCBC) | indirect | 4.93 | 7.02 (L) | Γ - L | 40 |
| 4H-BN(ABCB) | indirect | 5.52 | 7.63 (M) | Γ - M | 50 |
| 3H-BN(ABC) | indirect | 4.43 | 6.94 ($*$) | Γ - M | 0 |
| 2H-BN(AB) | indirect | 4.94 | 8.30 ($*$) | Γ - K | 100 |
| 3C-BN | indirect | 4.43 | 8.83 (Γ) | Γ - X | 0 |

Table 7.

| | | Δ_1 | Δ_2 | VBM - CBM | H (%) |
|-----------------------|----------|------------|-------------------|---------------------|---------|
| 12H-AIN(ABCABCACBACB) | indirect | 3.42 | 3.92 (M) | Γ - M | 16.7 |
| 12H-AIN(ABCABACABACB) | indirect | 3.58 | 4.12 (U) | Γ - M | 33.3 |
| 12H-AIN(ABACABCBCACB) | indirect | 3.84 | 4.29 (Γ) | Γ - M | 50 |
| 12H-AIN(ABCBCACACBCB) | indirect | 4.13 | 4.29 (Γ) | Γ - U | 66.7 |
| 12H-AIN(ABCACACACACB) | indirect | 3.66 | 4.19 (M) | Γ - M | 66.7 |
| 12H-AIN(ABCBCBCBCBCB) | indirect | 4.07 | 4.26 (Γ) | Γ - L | 83.3 |
| 12H-AIN(ABCBCBCBABAB) | indirect | 4.23 | 4.30 (Γ) | Γ - M | 83.3 |
| 10H-AIN(ABCABCBACB) | indirect | 3.48 | 3.99 (M) | Γ - M | 20 |
| 10H-AIN(ABCABCABAB) | indirect | 3.29 | 3.81 (L) | Λ - L | 40 |
| 10H-AIN(ABCBCACBCB) | indirect | 4.15 | 4.30 (Γ) | Γ - U | 60 |
| 10H-AIN(ABACACACAB) | indirect | 4.17 | 4.30 (Γ) | Γ - L | 80 |
| 10H-AIN(ABCBCBCBCB) | indirect | 4.09 | 4.28 (Γ) | Γ - M | 80 |
| 6H-AIN(ABCACB) | indirect | 3.74 | 4.27 (M) | Γ - M | 33.3 |
| 6H-AIN(ABCBCB) | indirect | 4.06 | 4.30 (Γ) | Γ - L | 66.7 |
| 5H-AIN(ABCBC) | indirect | 3.62 | 4.17 (L) | Γ - L | 40 |
| 4H-AIN(ABCB) | indirect | 3.95 | 4.30 (Γ) | Γ - M | 50 |
| 3H-AIN(ABC) | indirect | 3.24 | 4.06 (*) | Γ - M | 0 |
| 2H-AIN(AB) | direct | 4.31 | 4.31 (Γ) | Γ - Γ | 100 |
| 3C-AIN | indirect | 3.24 | 4.29 (Γ) | Γ - X | 0 |

Table 8.

| BH | | Δ_1 | Δ_2 | VBM - CBM | H (%) |
|-----------------------|----------|------------|--------------|----------------|---------|
| 12H-SiC(ABCABCACBACB) | indirect | 1.59 | 2.67 (M) | Γ - M | 16.7 |
| 12H-SiC(ABCABCABCACB) | indirect | 1.49 | 2.58 (M) | A - L | 16.7 |
| 12H-SiC(ABCABACBCACB) | indirect | 1.84 | 2.94 (M) | Γ - M | 33.3 |
| 12H-SiC(ABCABCABCACB) | indirect | 1.79 | 2.89 (M) | Γ - M | 33.3 |
| 12H-SiC(ABACABCBCACB) | indirect | 2.04 | 3.16 (M) | Γ - M | 50 |
| 12H-SiC(ABCABCABCACB) | indirect | 1.94 | 3.11 (M) | Γ - L | 66.7 |
| 10H-SiC(ABCABCBCACB) | indirect | 1.67 | 2.75 (M) | Γ - M | 20 |
| 10H-SiC(ABCABCABCBCB) | indirect | 1.49 | 2.58 (M) | Γ - M | 20 |
| 10H-SiC(ABCABCABAB) | indirect | 1.49 | 2.63 (M) | Γ - L | 40 |
| 10H-SiC(ABCACBCACB) | indirect | 2.00 | 3.12 (M) | Γ - M | 40 |
| 10H-SiC(ABCBCACBCB) | indirect | 2.36 | 3.53 (M) | Γ - L | 60 |
| 10H-SiC(ABCBCBCBCB) | indirect | 2.36 | 3.54 (M) | Γ - M | 80 |
| 8H-SiC(ABCABACB) | indirect | 1.77 | 2.86 (M) | Γ - M | 25 |
| 8H-SiC(ABCABCAB) | indirect | 1.51 | 2.68 (U) | Γ - L | 25 |
| 8H-SiC(ABCACBCB) | indirect | 2.03 | 3.16 (M) | Γ - M | 50 |
| 8H-SiC(ABCACBAB) | indirect | 1.94 | 3.13 (U) | Γ - L | 50 |
| 8H-SiC(ABCBCBAB) | indirect | 2.25 | 3.42 (M) | Γ - M | 75 |
| 8H-SiC(ABCBABAB) | indirect | 2.36 | 3.52 (M) | Γ - M | 75 |
| 6H-SiC(ABCACB) | indirect | 2.02 | 3.12 (M) | Γ - U | 33.3 |
| 6H-SiC(ABCBCB) | indirect | 2.30 | 3.55 (M) | Γ - L | 66.7 |
| 5H-SiC(ABCBC) | indirect | 1.74 | 2.86 (L) | Γ - L | 40 |
| 4H-SiC(ABCBC) | indirect | 2.23 | 3.36 (M) | Γ - M | 50 |
| 3H-SiC(ABC) | indirect | 1.34 | 2.96 ($*$) | Γ - M | 0 |
| 2H-SiC(AB) | indirect | 2.16 | 3.97 (M) | Γ - K | 100 |
| 3C-SiC | indirect | 1.34 | 4.58 (X) | Γ - X | 0 |

まとめ

- 第一原理分子動力学手法を行って多様なBN, SiC, AlNポリタイプの計算を行った。
- BNに関しては30Hまで計算。30H-AlN, 18H-SiCは計算途上。AlN, SiCは12Hまで。
- BNとAlNは[共有結合＋イオン結合]で安定性の議論(全エネルギー - Hexagonality)が可能。

- <http://www.nims.go.jp/cmssc/staff/kobayak/BN/bne.html>
- SANZEN Project
 - <http://www.nims.go.jp/cmssc/fps2/INFO/sanzenE.html>