

| | |
|--------------|---|
| Title | 高精度擬ポテンシャル法の開発と表面系への応用 |
| Author(s) | 川井, 弘之 |
| Citation | |
| Issue Date | 2011-03 |
| Type | Thesis or Dissertation |
| Text version | none |
| URL | http://hdl.handle.net/10119/9714 |
| Rights | |
| Description | Supervisor:尾崎 泰助, マテリアルサイエンス研究科, 修士 |

高精度擬ポテンシャル法の開発と表面系への応用

川井 弘之 (尾崎研究室)

【緒言】実験データや経験パラメータを用いずに、シュレーディンガー方程式（ディラック方程式）から物性・化学反応予測を行う第一原理計算は、コンピュータの進歩に伴い、ますます重要になってきている。しかし、全電子計算法の巨大な系への適用は未だに困難である。このため、内殻電子の寄与をある有効ポテンシャルで近似するという、擬ポテンシャル法がよく使用されている。我々は、重い原子系に適用可能な高精度ノルム保存型 Vanderbilt 擬ポテンシャルを開発した。従来のノルム保存型擬ポテンシャルは、各 1 チャンネルに対して、単一の参照エネルギーを用いるため、重い原子への適用は問題があったが、参照エネルギーを複数取ることができる Vanderbilt のノルム保存型擬ポテンシャル (Morrison-Bylander-Kleinman の擬ポテンシャル) を開発することで、この問題を解決した。また、新しく開発した高精度ノルム保存型擬ポテンシャルを用いて、最近 Fleurence らによって見いだされた、 ZrB_2 表面上のグラファイト様 Si 単一層 (silicene) の電子構造計算を行い、XPS による実験スペクトルとの比較検討を行った。

【計算】はじめに、Si 原子の 2p 軌道を考慮しない MBK 擬ポテンシャルを用いて Si on ZrB_2 の構造最適化計算を行った結果、Fig. 1 のような構造が得られた。次に、Si 原子の 2p 軌道を考慮した MBK 擬ポテンシャルを作成し、この擬ポテンシャルによって、Fig. 1 の構造を用いた Si on ZrB_2 の一点計算を行った。そして、この計算結果と XPS の実験結果を比較した。

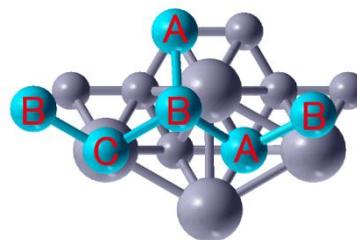


Fig. 1 Si on ZrB_2 の構造

【結果】計算結果の状態密度 (Density Of States, DOS) のプロットを描いたところ、hollow (A), bridge (B), on-top (C) の各位置に相当するピークが得られ (Fig. 2)、Fleurence らによる XPS の実験結果 (Fig. 3) と一致していることが示された。

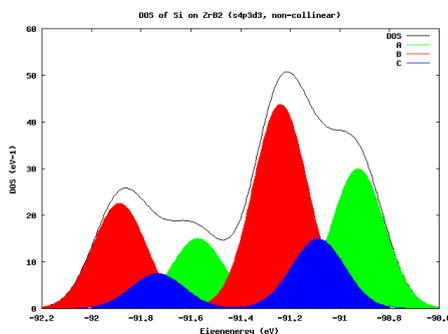


Fig. 2 計算による DOS

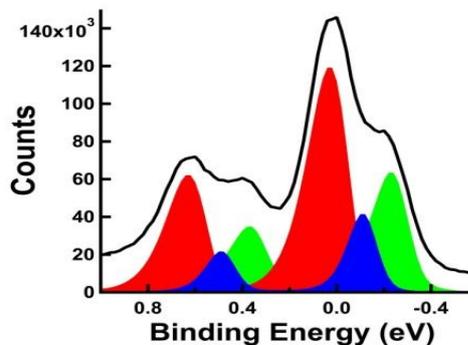


Fig. 3 XPS の実験結果

【Keywords】第一原理計算、擬ポテンシャル、グラファイト様 Si、silicene