

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	<a href="http://hdl.handle.net/10119/9714">http://hdl.handle.net/10119/9714</a>
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<sub>2</sub>** 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<sub>2</sub>** 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<sub>2</sub>** 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。

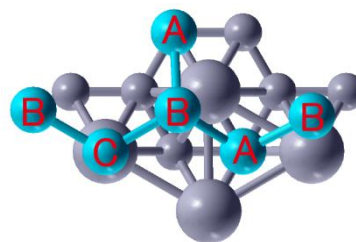


Fig. 1 Si on ZrB<sub>2</sub> の構造

【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。

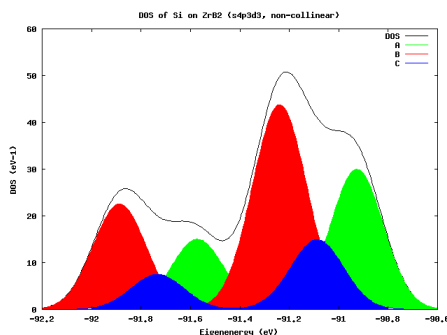


Fig. 2 計算による DOS

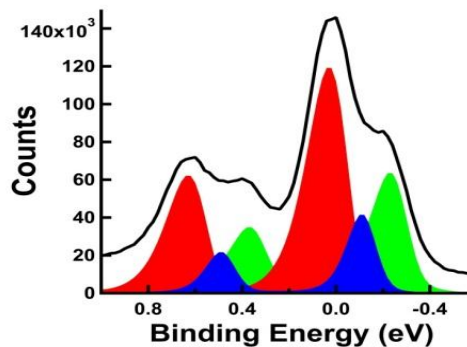


Fig. 3 XPS の実験結果

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