

ガウス基底およびフーリエ変換 (GFT) 法 に基づくバンド計算

(産総研・計算科学) ○島崎 智実、 浅井美博

分子の電気伝導や表面化学反応の詳細を理論的に調べるためには、分子・電極界面の電子状態を知ることが必要となる。この目的のために、周期境界条件のもとでの第一原理に基づく電子状態計算がプログラムを C++ を用いて開発した (開発したプログラムは、非平衡グリーン関数(NEGF)法にもとづく分子の電気伝導計算および第一原理計算による固体・表面のバンド計算が可能)。開発したプログラムはガウス基底を用いているが、長距離のクーロン相互作用を高速に計算するために、平面波補助基底およびフーリエ変換法を用いる計算手法 (GFT 法) を開発した。

開発したプログラムを用いて、ダイヤモンドのバンド構造を密度汎関数理論 (DFT) および Hartree-Fock (HF) 法によって計算した。密度汎関数理論として Local Density Approximation (LDA)、Generalized Gradient Approximation (GGA)、そして、hybrid 法を検討した。LDA としては Slater-Vosko-Wilk-Nusair (SVWN) を、GGA としては、Becke-Lee-Yang-Parr (BLYP) を、hybrid 法としては B3LYP を検討した。B3LYP 法によって計算したバンドを図 1 に、各手法によって計算したバンドギャップを表 1 にまとめる。表 1 には実験値もあわせて記載する。また、遮蔽交換ポテンシャルについて基本的な性質を調べ、新たに提案する遮蔽交換ポテンシャルを用いてバンド計算を行った。HF 法はバンドギャップを過大に評価する。一方、LDA および GGA はバンドギャップを過少評価する。B3LYP 法および遮蔽交換ポテンシャル法は実験値と非常に近いバンドギャップを与えることが分かった。当日は、B3LYP 法および遮蔽交換ポテンシャル法が実験値に近い値を与える理由を考察すると共に、計算手法および計算結果の詳細について発表する。

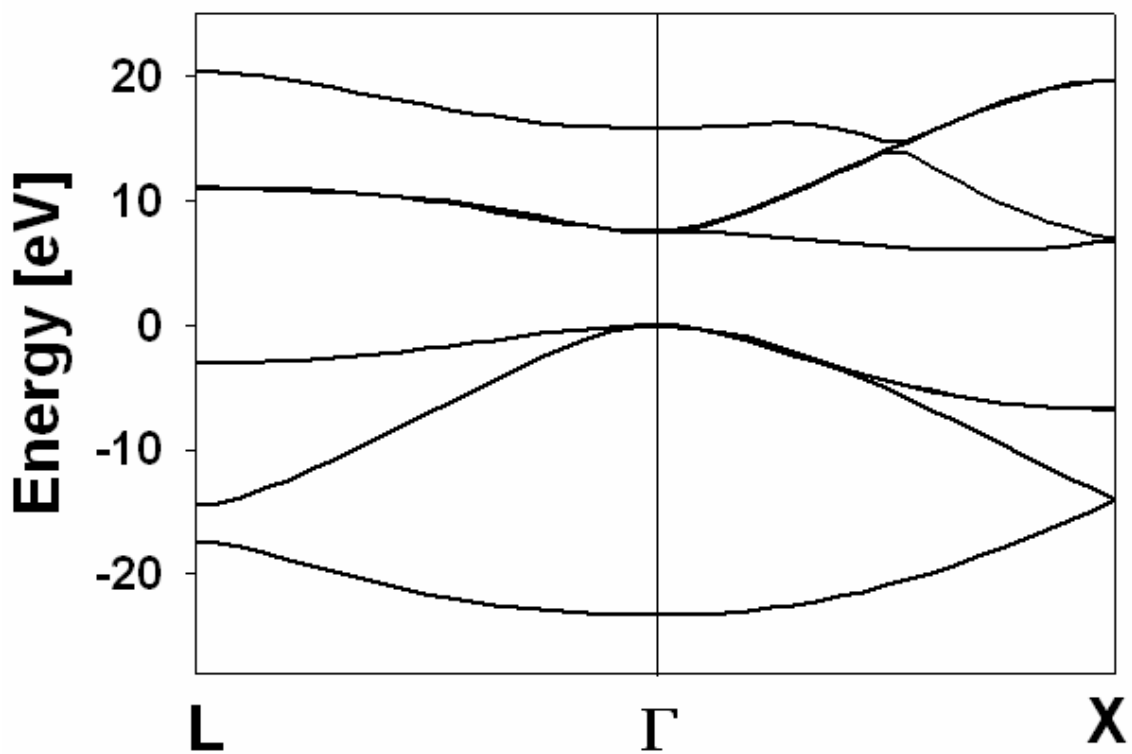


図1 独自に開発したプログラムを用いて計算した B3LYP 法によるダイヤモンドのバンド図

表1 GFT 法によって計算したバンドギャップの比較

bandgap	HF	SVWN	BLYP	B3LYP	遮蔽法	実験値
direct [eV]	14.6	5.9	5.7	7.4	7.2	7.3
indirect [eV]	12.6	4.2	4.4	6.0	5.0	5.48