



|              |                                                                                                                                                 |
|--------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Title        | 実空間差分法を用いた半無限固体の表面電子状態計算手法                                                                                                                      |
| Author(s)    | 藤本, 義隆                                                                                                                                          |
| Citation     | 大阪大学, 2001, 博士論文                                                                                                                                |
| Version Type |                                                                                                                                                 |
| URL          | <a href="https://hdl.handle.net/11094/42376">https://hdl.handle.net/11094/42376</a>                                                             |
| rights       |                                                                                                                                                 |
| Note         | 著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。 |

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

|               |                                     |
|---------------|-------------------------------------|
| 氏 名           | 藤 本 義 隆                             |
| 博士の専攻分野の名称    | 博 士 (工 学)                           |
| 学 位 記 番 号     | 第 1 6 1 9 8 号                       |
| 学 位 授 与 年 月 日 | 平 成 13 年 3 月 23 日                   |
| 学 位 授 与 の 要 件 | 学位規則第 4 条第 1 項該当<br>工学研究科精密科学専攻     |
| 学 位 論 文 名     | 実空間差分法を用いた半無限固体の表面電子状態計算手法          |
| 論 文 審 査 委 員   | (主査)<br>教 授 広瀬喜久治                   |
|               | (副査)                                |
|               | 教 授 青野 正和    教 授 梅野 正隆    教 授 片岡 俊彦 |
|               | 教 授 森 勇藏    教 授 森田 瑞穂    教 授 芳井 熊安  |
|               | 助教授 遠藤 勝義    助教授 後藤 英和              |

### 論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、半無限に続く固体表面の電子状態を第一原理に基づいて数値的に取り扱うための計算手法の開発についてまとめたものであり、全 6 章から構成されている。

第 1 章では、本研究の背景と目的および論文の構成について述べている。

第 2 章では、本研究を行うための準備として、密度汎関数理論、Kohn-Sham 方程式、ノルム保存型擬ポテンシャル法、Bloch の定理などの基礎理論と近似手法について述べている。

第 3 章では、Kohn-Sham 方程式の解を数値的に求めるために空間差分法を用いた近似手法について述べている。まず、運動エネルギー項の差分近似について述べ、次に周期系に対する Kohn-Sham 方程式の取扱いと行列形式表示について述べている。

第 4 章では、半無限固体の表面を実空間差分法により取り扱う計算手法について述べている。まず、初期値問題法による計算手法について述べているが、この方法では数値的に不安定であることについて述べている。次に、数値的に安定な境界値問題による方法について定式化を行っている。また、表面での物性に大きく関わる表面準位の導出に関して接続条件を考慮することにより波動関数を決定する方法を示している。さらに、ノルム保存型擬ポテンシャル法を半無限固体の表面モデルに対して適用する手法を示している。

第 5 章では、本計算手法を用いて、具体的に Si (001) 表面に対して計算を行っている。その中で特に表面準位に注目し、一般的に用いられている周期的薄膜モデルと本計算手法との比較を行い、その結果として本計算手法が優れていることについて示している。

第 6 章では、本研究の内容についてまとめ、総括としている。

### 論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

表面の物性を解明するために、電子論的な立場から記述する第一原理に基づく手法は、計算機の飛躍的な発展により注目を集めている。現在のところ表面の計算モデルは周期的薄膜モデルを用いることが一般的である。このモデルでは原子層や真空層の厚さに依存して計算結果が異なるといった問題点がある。そのため、強い電流が流れる系や電

界がかかった系といったより広範囲な表面モデルを取り扱う場合に、周期的薄膜モデルではそのモデル化が困難となる。

本論文では、現在の計算手法では取り扱いが困難な計算モデルに対して適用するために、半無限固体の表面モデルの計算手法に関する研究をおこなった内容についてまとめたものであり、その主な成果は次のように要約される。

- (1)半無限固体の表面を第一原理に基づいて計算するために、基底関数に一切用いない実空間差分法を用いることを提案し、半無限固体の表面モデルに関する Kohn-Sham 方程式に関して定式化を行っている。
- (2)半無限固体の表面を計算する際に起こる計算メッシュの増加とともに数値的な誤差が増大する問題に対して、これを回避するために境界値問題法を実空間差分手法に対して適用する方法を示し、定式化を行っている。
- (3)ノルム保存型擬ポテンシャル法を半無限固体の表面に用いることを提案し、定式化を行っている。このノルム保存型擬ポテンシャル法は固体バンド計算を実行するために実用上重要である。
- (4)具体的な表面モデルに対してバンド計算を実施し、本計算手法が数値的に安定した計算手法であることを示している。また、他の計算手法との比較を行い、本計算手法が優れた手法であることを明らかにしている。

以上のように、本論文はより広範囲な表面モデルに対して第一原理に基づいて計算するために、半無限固体の表面を取り扱う新手法の開発に関して研究したものである。数値的な安定性、実空間差分法による高精度化、ノルム保存型擬ポテンシャル法の導入を含めた新しい手法の定式化を行っており、固体物性物理学、特に表面物性における基礎科学や応用物理学に寄与するところが多い。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。