

炭素原子配置と物性に関する第一原理シミュレーション

First principles Simulation of electronic property in various atomic configurations of Carbon

1. 背景と目的

シャーペンの芯には電流が流れるが、ダイヤモンドには流れないというのは有名な話である。そしてダイヤモンドは世界一硬いと言われ、シャーペンの芯はあんなにも軟らかい。このように、同じ炭素原子であっても構造がすこし変わるだけでまったく異なる物性が現れる。なぜこのようなことが起こるのかを第一原理計算によって論理的に導き出して比較するのが今回の目的である。炭素のさまざまな構造や、半導体として知られているシリコンについても計算した。

2. 計算方法とパラメーター

今回の第一原理計算¹⁻³⁾には、電子計算パッケージ「WIEN2k」⁴⁾を使用しました。このパッケージにはFLAPW(Full-potential Linearized Augmented Plane Wave Method)法が用いられている。

① 各構造における平衡状態を求める

ある構造 (fcc や hcp など) において、格子定数を少しずつ変化させて、系のエネルギーを各点で求め、マナーハンの状態方程式でフィッティングして平衡状態を求める。

このフィッティングにより以下の物理量を求められる。 E_{tot} : 系の全エネルギー、 B : 体積弾性率、 B' : 体積弾性率の圧力の微分、 V_0 : 平衡格子定数での系の体積。

② 各構造の電子構造を計算する。

①で求めた「1原子あたりのエネルギーが一番低い点」に対応する格子定数は実験データと一致している。その点において波動関数を元に、電子密度 (DOS:電子密度) やバンド構造を計算する。

計算に用いたパラメーターは交換相関ポテンシャルに対して GGA-PBE96 を用いた。

カーボンの Muffin-tin 半径は 1.2(bohr)とした。

kPoint は 1000~3000 程とした。

3. 計算結果

2. の①により求めたグラファイトとダイヤモンド構造の全エネルギーの体積依存性の結果を図1に、②により求めたグラファイトおよびダイヤモンドのバンド構造を図2、図3に示す。

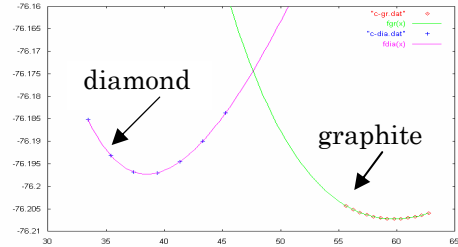


図1 全エネルギーvs体積

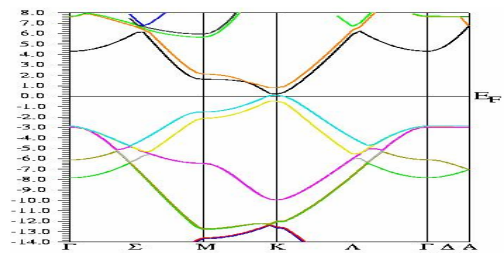


図2 グラファイトのバンド構造

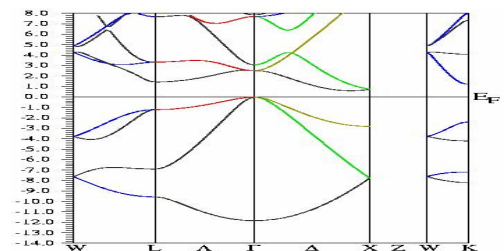


図3 ダイヤモンドのバンド構造

4. 考察

フェルミレベルを境として、ダイヤモンドではそれより上のエネルギー状態に電子が移動するのは難しいことがわかる。一方グラファイトではフェルミレベルを超えたエネルギー状態にも電子が移動可能なバンド構造になっており、エネルギーギャップの有無により電流の流れる流れないがわかる。

参考文献

- 1)キッテル物理学入門 (上) (丸善、平成 15)
- 2)NIMS 物質・材料データベース,
<http://mits.nims.go.jp/>
- 3)日本バンド (計算) 屋さんマップ,
<http://www.geocities.co.jp/Technopolis/4765/INTRO/bandmap.html>
- 4) WIEN2k, <http://www.wien2k.at/>.