

多体摂動論に基づくホウ化水素シートの電子状態

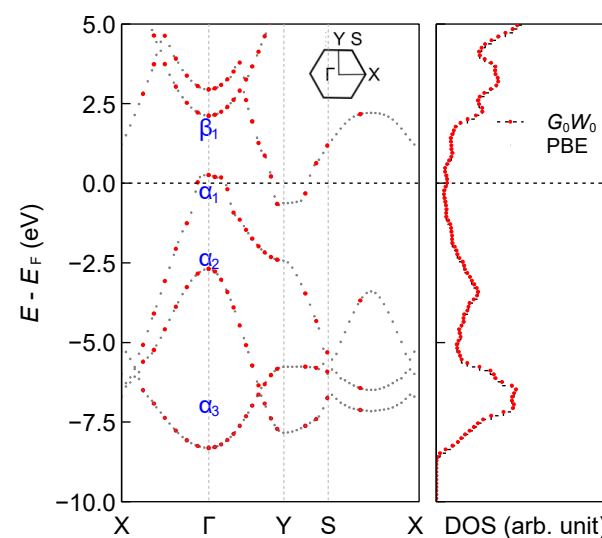
大阪大学 大学院工学研究科 濱田幾太郎

目的 ホウ化水素（HB）シートは近年合成された新しい二次元物質の一つであり、多くの水素を含むことから水素貯蔵材料として注目を集めている。さらに触媒活性も示すなど多くの機能性を有することが分かってきている。それらのメカニズムを解明するためにはHBの電子状態の知識が不可欠である。しかしながら、HBの電子状態については過去の密度汎関数理論（DFT）による結果は議論の余地がある。そこでDFTを越える高い精度の計算を行い、正しい電子状態を得る必要がある。

内容 本研究ではHBシートの電子状態をGreen関数理論に基づく多体摂動論の一つであるGW近似を用いて求めた。さらにGWに基づく電子状態を元に光学特性を計算し、実験結果との比較を行った。DFT計算にはQuantum-ESPRESSOコードを、GW計算にはYamboコードを用いた。

結果 GW近似に基づく計算の結果、HBシートのバンド構造にギャップが見られず、金属的な振る舞いを示すことが分かった。この結果は我々のDFT計算と定性的に一致した。しかしGW近似の元で得られた準粒子エネルギーを用いて得られた光学特性は、DFT計算により得られた固有エネルギーを用いたものに比べて実験とより良い一致を示すことが分かった。この結果は我々の計算精度の高さを示すものと考えられる。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群



GW (G_0W_0) およびDFT (PBE)により得られたHBのバンド構造と状態密度