

「密度汎関数法による半無限結晶表面の電子状態計算」

講演者氏名	石田 浩
所属	日本大学文理学部物理学科
講演タイトル	「密度汎関数法による半無限結晶表面の電子状態計算」
講演概略	<p>最近、密度汎関数法の範囲でカー・パリネロ的手法を用いた固体表面の計算が盛んに行われるようになったが、3次元の周期性を持たせるために本来半無限の固体表面が、10原子層程度の薄膜モデルで近似される。薄膜近似は全エネルギー計算には有用だが、電子の散乱問題やフェルミ面効果など詳細な電子状態を記述できない。そこで我々は、グリーン関数法の一つであるEmbedding法を用いた半無限固体表面の電子状態計算法を開発している。これまでの成果と、プログラム開発の現状を報告する。</p>