Heyd–Scuseria–Ernzerhof 交換相関汎関数を用いた FeSe の第一原理バンド計算

新潟大院自然，新潟大理 [A]
川井 弘之，大野 義章 [A]

First-principles band calculations of FeSe using Heyd–Scuseria–Ernzerhof Exchange-Correlation functional

Niigata Univ.　H. Kawai, Y. Ōno

鉄系超伝導体のフェルミ面は、Γ 点を中心とするホール面と M 点を中心とする電子面からなる。1111 系や 122 系、111 系では、実験で観測されるフェルミ面は第一原理計算によって良く再現されるが、11 系 FeSe で観測される非常に小さなフェルミ面は[1]、第一原理計算では再現されていない。電子相関効果を考慮した DFT+DMFT では、DFT のフェルミ面に比べて半分程度に小さくなるものの[2]、実験で観測される 10 分の 1 程度の極小のフェルミ面は説明されない。

一般に、密度汎関数理論において LDA/GGA 交換相関汎関数による第一原理計算は、半導体のギャップを実験と比べて過小評価する（例えば、単体ゲルマニウムは半導体であるにもかかわらず、しばしば金属と評価される）。これを改良する有効な手法として、GGA-PBE 交換相関汎関数に Hartree-Fock 交換を一定割合で混合した、混成（ハイブリッド）汎関数である Heyd–Scuseria–Ernzerhof (HSE)交換相関汎関数[3, 4]が知られている。そこで本研究では、第一原理計算コード Quantum ESPRESSO において、HSE 交換相関汎関数を用いて FeSe の電子状態を調べた（結晶のパラメータは実験値[5]を用いた）。当日は、他の交換相関汎関数（meta-GGA や B3LYP など）を用いた計算結果についても報告する予定である。

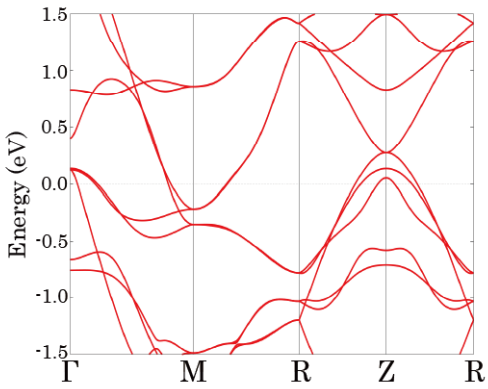

図 1　FeSe の GGA-PBE 交換相関汎関数によるバンド分散

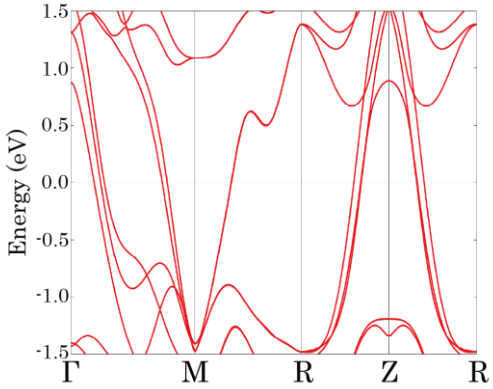

図 2　FeSe の HSE 交換相関汎関数によるバンド分散

[1] J. Maletz, V. B. Zabolotnyy, D. V. Evtushinsky, *et al.*, Phys. Rev. B **89**, 220506 (2014).
[2] M. D. Watson, S. Backes, A. A. Haghighirad, *et al.*, Phys. Rev. B **95**, 081106 (2017).
[3] J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. **118**, 8207 (2003).
[4] A. V. Krukau, O. A. Vydrov, A. F. Izmaylov, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. **125**, 224106 (2006).
[5] U. Pachmayr, N. Fehn and D. Johrendt, Chem. Commun., **52**, 194 (2016).

© 2023年 応用物理学会