

超球面探索法を用いた結晶構造予測 -窒化ホウ素について-

(和歌山大院システム工¹, 和歌山大システム工², 京大・福井研究センター³, 豊田理研⁴)

○時子山 宏明¹, 山門 英雄², 前田 理³, 大野 公一⁴

(序)

結晶構造予測は今日まで完全には解決されていない。我々は *ab initio* 計算 (周期的境界条件) と、2004 年に大野、前田によって開発された超球面探索(SHS: scaled hypersphere search) 法¹⁾を用いて、炭素についての結晶構造探索 (ダイヤモンド、グラファイト等) を昨年報告した。²⁾ SHS 法を用いて、結晶構造探索を原子座標に対してだけでなく、格子ベクトルに対しても適用し行った。各々の構造の単位格子あたりの全エネルギーは Gaussian03 (周期的境界条件(PBC)) を用いて計算し、計算レベルと基底関数は SVWN5/STO-3G を用いた。1 個の単位格子中には 2 個の窒素原子と 2 個のホウ素原子を置いた。

(結果・考察)

ランダムな初期構造から探索を開始し、これまでに自動的に 4 個の EQ と 4 個の TS を見つけることができた。(図 1) 今回、EQ0 から TS2 を経由して、EQ1 が見付き、EQ0 として hBN、EQ1 として 5hBN という実在する構造が見つかった。

窒化ホウ素(BN)には複数の結晶形が知られている。例えば、グラファイトと同様の結晶構造である六方晶(hexagonal, hBN)や 5 層周期の 5hBN や閃亜鉛鉱型(wurtzitic, wBN)等が知られている。EQ1(5hBN に相当)よりも不安定な構造である EQ2 及び EQ3 は 5hBN と似た構造を有している。他の結晶形に関して、現在計算を継続中である。また、計算速度を上げるため、エネルギーの計算を Gaussian03 の代わりに DFTB+(density functional-based tight binding)³⁾を用いることも、現在検討している。

図 1 BN の作る結晶構造の予測

(2B2N / unit;
EQ0~EQ3, TS0~TS3)
EQ0 から EQ2 まで (TS0 又は TS2 を経由) の反応座標を青点線で示している。また、EQ0 から TS3 を通り EQ3 への反応座標を赤点線で示しており、その軸を回転させて描いている。同様に、EQ0 から TS1 への反応座標も回転させて描いている。

謝辞：本計算では 自然科学研究機構 岡崎共通研究施設 計算科学研究センターの電子計算機を利用してあり、感謝する。

参考文献：

- 1) K. Ohno, S. Maeda, *Chem. Phys. Lett.*, **2004**, 384, 277; S. Maeda, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, **2005**, 109, 5742; K. Ohno and S. Maeda, *J. Phys. Chem. A*, **2006**, 110, 8933
- 2) 山門、時子山、前田、大野、日本化学会第 90 春季年会、**2010**、3E1-42
- 3) B. Aradi, B. Hourahine, and Th. Frauenheim, *J. Phys. Chem. A*, **2007**, 111(26), 5678

