

ACT-JST(JST)、東大工<sup>A</sup>高山立、星健夫<sup>A</sup>、藤原毅夫<sup>A</sup>

Order-N methods for electronic structure calculations with a hybrid method of recursion and perturbation method

ACT-JST(JST), Dept. of Appl. Phys., Univ. of Tokyo<sup>A</sup>

R. Takayama, T. Hoshi, and T. Fujiwara

ナノスケールの物質設計は、量子力学に基づいた電子構造計算を用いる必要がある。一般に電子構造計算には膨大な計算時間を要するが、扱う系を量子力学的に正しく扱いつつ、系を大規模化し、かつ計算効率を向上させるという相反する要請を満たすため、これまで我々は計算時間が原子数に比例するオーダー N 電子構造計算のプログラムの開発とその応用を行ってきた。例えばこれまで、半導体系に対する一般化ワニア状態の方程式を近似的に解く変分法や [1]、平均場方程式から摂動公式を得ることにより従来の手法より数十倍早い計算を行うことができる摂動法 [2] の開発を行ってきた。それぞれの方法には長所・短所があるが、一体密度行列における重ねあわせを用いることで異なった方法を混合することにより、単独の方法を用いるよりも大規模かつ汎用な計算アルゴリズムが可能となることに我々は着目した。このハイブリッド法は、ヒルベルト空間における系の分割に相当し、他の大規模計算手法との併用も可能な一般論である。これまでに应用例として、10万原子以上を含むナノスケールのシリコン単結晶に対し変分法・摂動法のハイブリッド法による破壊現象の分子動力学シミュレーションを行い、亀裂表面において原子レベルの表面構造が生成されることや、ナノスケールの単結晶における亀裂面はマクロな単結晶の場合と異なることを観測し、原子スケールの量子力学的自由度が不可欠であることを示してきた [3,4]。

最近我々はハイブリッド法の例として、Si(001) 表面で形成される非対称ダイマーの電子構造を解析するため、分子動力学法を用いてダイマー形成の様子をシミュレートしている。その際、表面近傍の計算には表面電子構造の微細な部分にはよらずに全エネルギーを計算することができる連分数法を適用し、バルク部分には摂動法を適用してダイマー形成前後の電子状態を調べているので報告する。

[1] T.Hoshi and T.Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn. 69,3773 (2000).

[2] 下司雅章、星健夫、藤原毅夫：日本物理学会 2002 年秋季大会 7aTC-2.

[3] 星健夫、下司雅章、藤原毅夫：日本物理学会 2002 年秋季大会 9aSP-4.

[4] T.Hoshi and T.Fujiwara, cond-mat/0210366.