

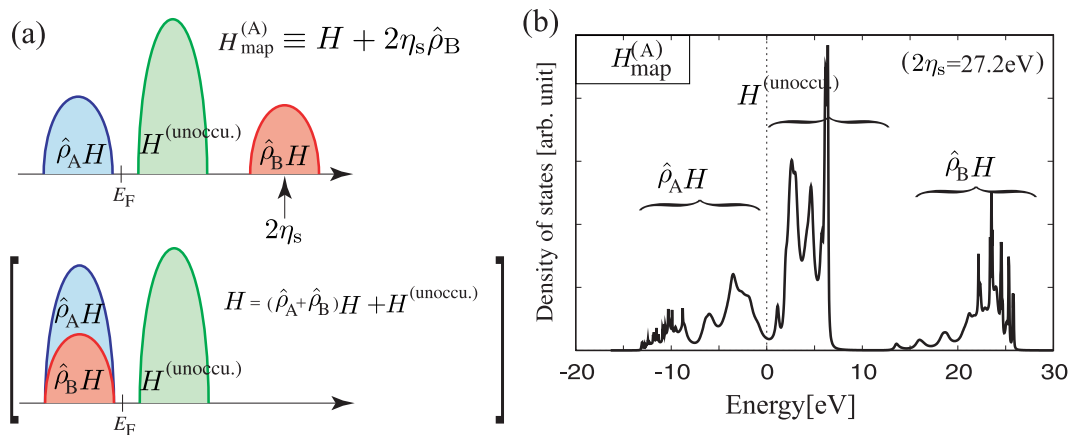
ACT-JST(JST)、東大工^A高山立、星健夫^A、藤原毅夫^AMolecular dynamics simulation by means of hybrid order-N electronic structure calculation
with recursion method and perturbation methodACT-JST(JST), Dept. of Appl. Phys., Univ. of Tokyo^A

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

ナノスケールの物質設計では量子力学に基づいた電子構造計算が必要である。対角化を用いた電子構造計算では計算時間がシステムサイズの3乗に比例するため大規模計算を困難にしている。大規模系の計算を行うためには固有状態を使わずにいかに一体密度行列を計算するかが重要である。これまで我々は系を量子力学的に正しく扱いつつ計算効率を向上させるため、複数のオーダーN電子構造計算法の開発、およびそれらのヒルベルト空間での重ねあわせであるハイブリッド法の開発とその応用を行ってきた[1-4]。

前回[4]導入した連分数法を用いて分子動力学シミュレーションを行う際は、密度行列の計算、特にその非対角項の計算が計算時間の大半を占める。今回は、計算効率の向上と並列化により連分数法を用いたハイブリッド電子構造計算に基づいた分子動力学シミュレーションが可能になってきたので報告する。

- [1] T.Hoshi and T.Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn. 69, 3773 (2000).
- [2] T.Hoshi and T.Fujiwara, cond-mat/0210366,
- [3] M.Geshi, T.Hoshi, T.Fujiwara, cond-mat/0306461
- [4] 高山立、星健夫、藤原毅夫：日本物理学会第58回年次大会 29aWJ-11.



図：大規模分子動力学シミュレーションに必要なハイブリッド法。

(a) 概念図、(b) 連分数法による計算例；理想表面近傍を部分系Aとした1024Si原子系の状態密度。