

Title	グリーン関数を用いた実空間大規模電子状態計算法
Author(s)	尾崎, 泰助
Citation	
Issue Date	2000-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10119/2084">http://hdl.handle.net/10119/2084</a>
Rights	
Description	Supervisor:岩佐 義宏, 材料科学研究科, 博士

## 論文の内容の要旨

本論文は大規模系の電子状態計算の新しい効率的計算手法を述べたものである。近年の計算機の発達に伴い、第一原理的分子動力学 (MD) 計算の適用範囲が広がりがつつある。しかしながら、数千原子を含んだ系への第一原理 MD 計算の適用は実際には困難である。なぜなら系に含まれる原子数の三乗にその計算量が比例するからである。これは Car-Parrinello 法に始まる逐次対角化手法 (例えば、共役勾配法) を用いた場合でも規格直交化を経由する限り同様である。大規模なシミュレーションを行なうためには、計算量が系のサイズに比例する、より効率的な計算手法、すなわち  $O(N)$  法の開発が必要となる。

本論文で提示された新しい  $O(N)$  電子状態計算法はこれまでに提案された局所状態密度のモーメントに基づいた手法において、最も高精度かつ高効率な手法である。本手法は Pettifor-Aoki の Bond-Order Potential (BOP) 法を発展させた手法であり、基底の変更とブロックアルゴリズムの導入を行なうことで、グリーン関数の非対角項を求める全く新しい計算手法を与えた。

始めに、その定式化を詳細に与え、本手法の利点と計算精度に関する幾つかの考察をモーメント定理に基づいて行う。また、その適用限界を見極めるために絶縁体、半導体、金属、及び分子に対する、エネルギー及び力に対するテスト計算を行う。これらテスト計算は本手法がこれまでの  $O(N)$  法と比較し、多くの問題点を解決していることを明確に示している。とりわけ、絶縁体及び、半導体の欠陥生成エネルギーを初めて正確に再現したことは特筆に値する。

次に、本手法の理論的な拡張を行う。これは任意の近似レベルでエネルギーに無矛盾な力の新しい計算手法を与えたものである。この定式化は BOP 法の枠組みにおいて始めてなされたものであり、今後の発展が期待される。

最後に、本手法の具体的な応用例が並列計算と共に与えられる。本手法のその理想的な並列特性は、今後の並列計算の発達に歩調を合わせるものである。カーボンナノチューブ (CNT) の力学特性に対する本手法の応用により、これまで知られていない新しい力学特性が見いだされた。とりわけ低温領域における CNT の螺旋度と長軸方向への応力の関係は、CNT の応用面において、重要な指針を与えるであろう。