

Title	On the Screened KKR method for multilayered systems
Author(s)	渡辺, 晋
Citation	大阪大学, 2004, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/45092">https://hdl.handle.net/11094/45092</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名	わたなべ すすむ 渡 辺 晋
博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)
学位記番号	第 18383 号
学位授与年月日	平成 16 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当 理学研究科物理学専攻
学位論文名	On the screened KKR method for multilayered systems (多層膜人工格子の遮蔽 KKR 法による電子状態計算に関する研究)
論文審査委員	(主査) 教授 赤井 久純  (副査) 教授 斉藤 基彦 教授 吉田 博 助教授 キース・スレヴィン 基礎工学研究科助教授 草部 浩一

#### 論 文 内 容 の 要 旨

最近のナノスケールの製作・観測技術の進歩により、様々な機能性をもつ人工格子が製作されている。例えば、リソグラフィ、分子線エピタキシーそしてスパッタリングなどを用いることでナノスケールにおける多層膜人工格子が創られている。特に、磁性超格子は、物理的にも工学的にも興味深い人工格子である。たとえば、Co/Cu 多層膜人工格子は GMR 効果を示す。また、Fe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Fe 多層膜人工格子は TMR 効果を示す。材料特性評価やナノマテリアルデザインの観点からこのような系の電子状態計算は、非常に有用なものと考えられる。

このような系の第一原理的な計算手法のうちのひとつに KKR-Green 関数法というものがある。この手法は、他の手法に比べて様々な利点がある。たとえば、この手法は、規則合金だけでなく、CPA との組み合わせにより不規則合金や混晶系といった複雑な系の電子状態計算が出来る。しかしながら、多層膜人工格子のようなシステムサイズの大きな系に対しては、KKR-Green 関数法は電子状態計算に多大な計算時間を必要としてしまう。これは、この手法が三次元並進対称性を仮定しているために、システムサイズ (ユニットセルの中の原子の数  $N$ ) の大きさに対して計算回数が  $O(N^3)$  で増加するためである。

多層膜人工格子の電子状態計算の際にこのような困難に乗り越えるべく、Screened-KKR 法が、ユーリッヒ研究所 (ドイツ) のグループにより初めて開発された。この手法は、多層膜人工格子の電子状態計算に非常に適している。その大きな理由は、システムサイズの大きさに対して計算回数が  $O(N)$  で増加するからである。

この手法の基本的なアイデアは以下のようなことである。まず初めに、我々は、KKR-Green 関数法においては、任意のレファレンスシステムを選ぶことが出来るということに着目する。よく知られているように、標準的な KKR 法では、レファレンスシステムとしてフリースペースを採用している。それに対し、Screened-KKR 法では、井戸型の斥力ポテンシャルをこのレファレンスシステムとして利用する。このとき、このレファレンスシステムのグリーン関数は指数関数的に減衰していく。この結果として、ストラクチャーグリーン関数に対するダイソン方程式が、実空間で解くことが出来る。

この手法を用いることにより、我々は 1000 層からなる大きなシステムサイズの Ni slab (001) や Fe/Cr/Fe (001) の電子状態計算を実行することに成功した。(1000 層という大きさの計算はユーリッヒ研究所 (ドイツ) のグルー

ブも実行できていない。)

## 論文審査の結果の要旨

近年、金属・半導体超格子や人工格子は、それらを作成するエピタキシャル成長の技術、およびリソグラフィなどの微細加工技術の向上によって、半導体工学や、ナノテクノロジーにおける最も重要な舞台となっている。それとともに、量子効果が本質的に重要な役割を果たす系として、基礎科学の面からも最も注目すべき対象の一つと考えられている。実験室で作成されるこのような人工格子は普通、数十ナノメートルから数百ナノメートルの膜厚を持っており、理論的な取り扱いにおいては、適当なモデルを設定して取り扱われている。しかし、最近の急速な第一原理計算の進歩によって、これらの系もモデルにたよらない量子力学的なシミュレーションの対象と考えられるようになってきた。量子力学的なシミュレーションはバルク結晶を扱うバンド計算の手法を用いて系の電子状態を計算することによってなされるが、これらの計算は層の厚さを  $N$  としたとき、計算量が  $N$  の 3 乗で増加する、いわゆる  $O(N^3)$  の性質を示す。したがって、扱う層数の増加とともに計算量は急激に増加し、精度の高い全電子第一原理計算は数十層が限界である。この層数は現実的な多層膜のほぼ最小に位置し、多様な物性が発現している現実の多層膜を取り扱うためには全く不足であると言わざるを得ない。

渡辺君は、この状況を打破するために遮蔽 KKR 法と呼ばれる方法を導入した。電子状態を計算するための高精度な方法として KKR 法 (グリーン関数法) と呼ばれる方法が存在する。この方法では電子状態を無摂動系からの散乱波として記述するが、通常の KKR 法では無摂動状態として散乱ポテンシャルのない真空をとる。それに対して、遮蔽 KKR 法では無摂動状態として通常の原子ポテンシャルの存在するところに、人工的な大きい反発ポテンシャルをおいた系を考える。このような系における無摂動伝播関数 (グリーン関数) は考えるエネルギー領域では、距離とともに指数関数的に減衰するという特質を有する。このような伝播関数を用いて、無摂動系に新たに原子ポテンシャルを置いたことによる多重散乱を考えると、上の性質を反映して、散乱は有限範囲に抑えられ、摂動状態を計算するためのダイソン方程式は行列で書いたとき疎行列となる。特に、多層構造では、2次元面内ではフーリエ変換することによって、解くべき方程式はバンド対角的となり、その解を求めるための計算量は  $N$  の 1 乗に比例する、いわゆる  $O(N)$  のアルゴリズムとなる。渡辺君はこのような手法を計算機プログラムとしてコードし、世界で始めて強磁性 Ni の千層からなる系の電子状態を完全にセルフ・コンシステントに計算することに成功した。さらに両側を Fe はさまれた Cr 膜の SDW 状態を層数を 1~100 層程度まで変化させた計算を行い、層数と SDW 状態のノードとの関係を計算によって明らかにした。

よって、本論文は博士 (理学) の学位論文として十分価値あるものと認める。