

Title	実空間差分法に基づく第一原理オーダーN電子状態計算手法
Author(s)	佐々木, 孝
Citation	大阪大学, 2007, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/48552">https://hdl.handle.net/11094/48552</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	佐々木 孝 <sup>たかし</sup>
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第 21151 号
学位授与年月日	平成 19 年 3 月 23 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当 工学研究科精密科学専攻
学位論文名	実空間差分法に基づく第一原理オーダー $N$ 電子状態計算手法
論文審査委員	(主査) 教授 広瀬喜久治  (副査) 教授 森田 瑞穂    教授 渡部 平司    教授 安武 潔 教授 片岡 俊彦    教授 桑原 裕司    教授 山内 和人 教授 遠藤 勝義

### 論文内容の要旨

本研究は、従来不可能であった、計算量をモデルサイズに比例する程度に抑えるオーダー $N$ 計算と深さ方向に無限に続く結晶等の半無限系を扱う計算を第一原理的に行うことができる手法を開発することを目的とした。以下に、本論文の要旨をまとめる。

第 2 章では、第一原理分子動力学計算を行うにあたって必要な量子力学の基礎知識と、本研究の計算手法に基づいている密度汎関数理論の説明を行った。

第 3 章では、実空間差分法に基づく第一原理分子動力学法について説明を行った。この章ではまず実空間差分法の基本原理についての説明を行った。そして Poisson 方程式から導出される連立方程式の効率的な計算方法の紹介を行った。最後に、さまざまな周期系を考慮した時のロングレンジクーロンポテンシャルに関する計算方法について説明した。

第 4 章では、計算量をモデルサイズに比例する程度に抑えることができるオーダー $N$ 理論について述べた。まず、オーダー $N$ 計算を第一原理計算で実現するために開発された Direct Minimization 法(DM 法)について説明を行い、従来法による計算結果との比較を行い、正確性を実証した。さらに、空間に局在した軌道“Localized Orbital”を DM 法に導入することで、オーダー $N$ 化を行い、その計算精度・速度に関して検証を行った。

第 5 章では、オーダー $N$ 理論で用いられる“Localized Orbital”を利用することにより、半無限系の電子状態計算への応用の可能性に関して説明を行った。計算モデルとして無限に続くバルクに挟まれたナノ構造体を用いて電子状態計算を行い、解析解、実験および他の手法により知られている結果と比較することにより、その計算結果について検証を行った。

第 6 章では、本研究で得られた成果をまとめ、本論文の総括を行った。

## 論文審査の結果の要旨

近い将来、現実になるであろうナノデバイスにおける、原子スケールの素子の電気的特性には、電子の波動性や粒子性が顕著になり、従来の古典電磁気学の予想を超える電子輸送現象が現れることが予想されている。特に、界面・表面付近に局在する特異な電子状態の評価が重要性を増している。現在、このような電子状態を正確に計算するために、固体表面のように深さ方向に無限に続く結晶等の半無限系を正確に取り扱うことのできる、量子力学の第一原理に基づいた計算手法はほとんどない。その数少ない計算手法においても、スラブモデル、ジェリウム、**local charge neutrality** 等の不正確なモデル化や近似を用いる必要があり、精度の頭打ちが懸念される。また、計算量が膨大であり、現実的なサイズのモデルの計算を行うことは困難である。本論文では、表面・界面付近のナノ構造の電子状態を、深さ方向に無限に続く結晶をも含めたモデルを用いて計算する手法を開発し、計算結果と実験結果との比較によって本計算手法の有用性を実証するとともに、表面・界面付近のナノ構造の電子状態の詳細な解析を行っており、以下のような有用な成果を得ている。

(1)波動関数が満たす微分方程式を解くにあたって最も計算量が多い部分の負担を軽減するために、空間に局在した **Localized Orbital** を用い、第一原理的にオーダー  $N$  計算を実行できる計算手法を開発することによって、計算時間の大幅な減少に成功している。

(2)ナノ構造と一对の深さ方向に無限に続く電極を一体として扱うモデルにおいて、上述の **Localized Orbital** の持つ利点を応用することにより、これまで扱うことの難しかった半無限に広がった結晶表面を計算モデルに含めることを可能にしている。

(3)金の巨大なカイラルナノチューブモデルに対して本計算手法を適用し、従来法では不可能であった現実的な大きさのモデルを用いて電子状態を短時間で計算できることを実証している。

(4)開発されたプログラムを用いて、半無限電極に挟まれたナノ構造体の電子状態を計算し、解析解および実験によって得られている結果と比較することで、本計算手法の有用性を実証している。

(5)Si/SiO<sub>2</sub> 界面中の酸化膜中に点欠陥を含むモデルに本手法を適用し、従来法では扱いが難しい電子状態を計算することに成功し、欠陥の入り方による帯電量の違いを見積もることに成功している。

以上のように本論文は、表面・界面付近のナノ構造における電子状態に対する第一原理計算手法を確立し、その有用性の評価を行ったもので、将来のナノデバイスの開発に寄与するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。