

実空間差分法による大規模第一原理電子状態計算

密度汎関数法 (Density-Functional Theory)

原子(電子+原子核)の多体系
量子力学の第一原理に基づく物性予測

基底状態の電子密度
基底状態の全エネルギー
原子間に働く力 安定構造, MD

高い定量性
格子定数 $\sim 1\%$
体積弾性率 $\sim 10\%$
凝集エネルギー $\sim 0.1\text{eV}$

原子数 N 計算量 $O(N^3)$

典型的システムサイズ ~ 100 原子

筑波大学計算科学研究センター 岩田潤一
筑波大学 押山淳、白石賢二、岡田晋、藤本義孝

信頼あるDFT計算をより
大規模な系に適用したい!

- ・ Si中の不純物濃度 $\sim 10^{18}/\text{cm}^3$
5万個に1個の不純物原子
- ・ 生体分子(DNA, たんぱく質)

実空間差分法による第一原理計算

並列性に優れている
柔軟な境界条件(分子・固体)

(従来: 平面波基底による展開
(FFTを頻繁に使用するため並列化
の際不利となる))

応用

Si中複空孔欠陥の構造 ~ 1000 原子
Siクラスター \sim 数千原子
(~ 10000 原子に向けて)