

## 粒子法を用いた実空間における電子状態計算

杉本宗一郎, ○善甫康成

法政大学 情報科学 (〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)

### 【緒言】

実空間の電子状態計算では一般にメッシュを用いて計算が行われる．実空間メッシュは直感的に分かりやすく大規模並列計算に適しているためである．実空間メッシュを用いる場合，運動エネルギーやポアソン方程式などのラプラシアン演算子は高次の差分法を用いて離散化される[1]．

粒子法はメッシュを用いない計算手法であるため計算点の配置の自由度が高い．粒子法を電子状態に適用した場合，高精度な計算が必要な領域へ集中的に計算点を配置することで効率的な計算を行うことが期待できる．一方，差分法に比べて粒子法の計算精度は低いことが一般的に知られている．今回は計算精度を改善した粒子法の一つである **Symmetric Smoothed Particle Hydrodynamics (SSPH)** [2, 3] を用い，1次元計算で解析が可能な半導体デバイスシミュレーションに SSPH を用いた計算結果を紹介したの続き，単純な原子についてこの手法を適用し，その計算精度を有限差分の場合との比較を行った．

### 【方法】

我々が用いた SSPH は，Taylor 展開を高次の項まで考慮することで計算の収束性を向上させることができる．実際の電子状態計算への応用例として，密度汎関数法に基づく原子の電子状態計算を水素，ヘリウム，リチウムなどの原子について行った．図 1 は，粒子分布のイメージであり，図 2 はヘリウム原子の電子密度である．図 3 はこのときの Hartree ポテンシャルである．有限差分法と比較すると，同様の結果が得られ，精度上も問題ないことが分かった．今回は簡単化のため格子状に粒子を配置して計算を行ったが，本研究で示した手法は粒子（計算点）の分布が規則的でないことを前提に定式化が行われているため，同じアルゴリズムを用いて一様でない粒子分布を用いて実用的な電子状態計算が実現可能である．

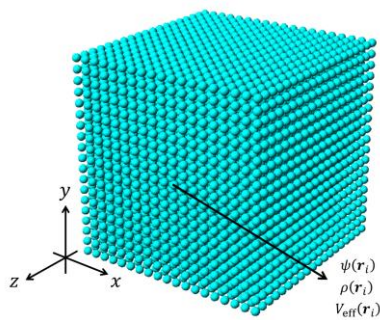


図 1 3次元空間における粒子分布のイメージ．(格子状に粒子を分布させた場合)

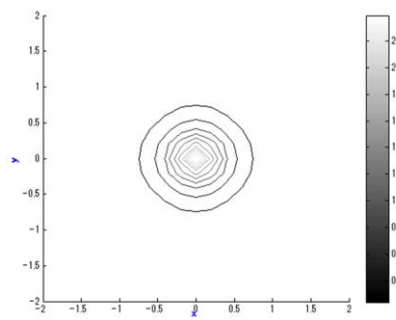


図 2 ヘリウム原子の電子密度の等高線．

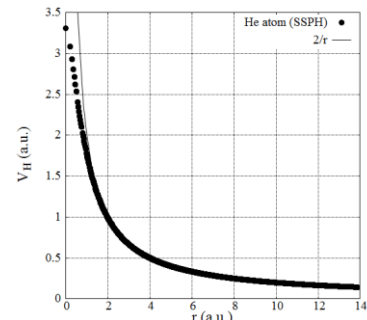


図 3 ヘリウム原子の Hartree ポテンシャル

### 【結果】

実空間における電子状態計算の空間離散化手法として粒子法を応用する方法について示した．実際の応用として，密度汎関数法に基づく原子の電子状態計算に粒子法の一つである SSPH を適用した．これにより，実用的な電子状態計算への応用可能であることを示すことができた．今回の報告は基本動作の確認であるが，後の展開として，高次の Taylor 展開を用いた高精度を有する計算，非一様な粒子分布を用いて局所的に空間分解能を向上させ，分子の電子状態計算を検討する．

### 参考文献

- [1] R. C. Batra, G. M. Zhang, *Comput. Mech.* **41**, pp. 527-545 (2008)
- [2] G. M. Zhang, R. C. Batra, *Comput. Mech.* **43**, pp. 321-340 (2009)
- [3] S. Sugimoto and Y. Zempo, *J. Phys.: Conf. Ser.*, in press.