

- 35) H. L. Swinney et al., Phys. Rev. Lett. **51**(1983), 1442.
- 36) A. Libchaber et al., J. de Phys. Lett. **43**(1982), L211.
- 37) M. Nishioka et al., J. Fluid Mech. **72**(1975), 731.

固体電子状態の研究への計算機の利用

東北大・理 森 田 章

1. はじめに

これまでに、私の研究室では半導体、半金属、アモルファス系の研究に関係してかなりの計算機利用を行ってきた。半導体、半金属の研究ではこれらの物質のバンド構造とそれから導かれる物理的性質、不純物準位、結晶構造の安定性に関する問題（例えば、安定構造は何か、その格子定数や弾性定数の値、圧力による相転移 etc.）などを問題にしてきた。アモルファス系の研究では不規則合金や液体金属中の電子状態と電子輸送係数の計算や2次元モデル液体金属によるこれらのシミュレーションなどを行って来た。ここではこれらの研究のうちで黒リンに関する研究を例にして我々の計算機利用の実態を次章で述べる。つぎに第3章で固体電子理論への大形計算機利用の現状と展望について私見を述べることにする。

2. バンド計算

我々はこれまで Si, Ge などのⅤ族半導体や, As, Sb や SnTe, PbTe などのⅤ族半金属やⅣ-Ⅵ族化合物半導体の電子構造の研究を主として擬ポテンシャル法を用いて行ってきた。この種の研究は一般にかなりの計算機利用を必要とするので、使用可能な時間と研究費の範囲に収めるためにはしばしば計算精度を落したり、半定量的な計算で我慢する必要が生じた。このようなことを行うには勿論色々な物理的考察を必要とし、そのような努力は研究者にとって必ずしもマイナス面のみでは無い。しかし、現実にはこの様な努力によって得られた結果も、米国などにおいて大型計算機のブルトナー的使用によって得られた成果の前では影が薄くなるを得なかった。我々はこの様な過去の経験にかんがみ、現状で我々が取りうる方策の一つとして、興味ある物質でしかも他所ではまだ手掛けていないものを取り上げることを考えた。具体的には黒リンを取り上げた。

黒リンはリンの常温常圧での最も安定な同素体で、層状構造の狭いギャップ ($\sim 0.3 \text{ eV}$) を持つ半導体である。これは圧力を加えると半導体からヒ素型構造の半金属、さらに単純立方構造の金属へと興味ある相転移を示す。ところが単結晶としては $0.1 \times 0.1 \times 1 \text{ mm}^3$ 程度の微小針状結晶しか得られなかった為、色々と面白い物性が期待されるにも拘らず、黒リンの半導体物性の研究は 1950～1960 年代に多結晶について行われているにすぎなかった。我々の黒リンのバンド構造や相転移の計算結果が出た後で黒リン単結晶の育成が外国に先掛けて我国で成功した。その結果、単結晶を用いた黒リンの実験 (サイクロトロン質量, 電気伝導度, 光吸収, XPS, 中性子散乱 etc.) が我国で盛んに行われるようになった。

我々が黒リンのバンド計算を本格的に開始するに当って、最初に問題になった点は計算結果をチェックするための実験データがギャップが約 0.3 eV であることの他には皆無だった事である。そこで、まず定性的ないしは半定量的なバンド構造の知識を得るために extended Huckel 理論を用いた tight binding 近似の計算を行った上でセルフコンシステント擬ポテンシャル法による計算を開始した。自由な P^{4+} イオンのスペクトル項をよく再現するような P^{5+} イオンの原子擬ポテンシャルを作り、それを基にして黒リンのバンドをセルフコンシステントに計算したわけであるが、そのときの交換-相関ポテンシャルには $X\alpha$ 法を用い、 α の値としてはギャップが 0.3 eV になるように $\alpha = 0.8$ とした。波動関数の展開に用いた平面波の数は約 230 個、セルフコンシステントの条件としてはポテンシャルのフーリエ成分の input と output の差 $|4\Gamma(G)| \leq 10^{-5} \text{ ryd}$ を採用した。状態密度 (DOS) と誘電関数を求める時は波数帯域の $1/8$ の領域の中の 2528 点でバンドを計算した。

黒リンは単位胞に 4 原子を含む層状結晶で、層内は共有結合、層間はファンデル・ワールス結合している。従って、この結晶は異方性が著しいので、セルフコンシステンシーを達成するまでの収れんが比較的遅い。計算上のロス・タイムもふくめて計算時間としては ACOS 1000 に換算して約 5 時間を要した。

以上の計算から導かれた主な結果を列挙すると

- (1) 結晶構造と結晶エネルギー
- (2) バンド構造とキャリアの有効質量テンソル
- (3) 状態密度 (DOS)
- (4) ギャップ・エネルギーの圧力依存性と変形ポテンシャル
- (5) エネルギー依存複素誘電関数
- (6) 光反射率スペクトル
- (7) X線吸収及び発輝スペクトル

これらの結果は最近えられた実験結果と良い一致を示す。例えば結晶の結合エネルギーの計算値 0.0474 ryd/atom に対して実測値は 0.0505 ryd/atom であり、キャリアの有効質量テンソルの計算値はサイクロトロン共鳴の実験値と 10 % 程度で一致し、DOS は XPS の測定結果と良い一致を示した。

以上要するに、適当な原子擬ポテンシャルを用いたセルフコンシステントな計算は黒リンの性質を満足できる程度に説明してくれることがわかった。実は、このことは他の結晶についても言えることで、セルフコンシステント擬ポテンシャル法は物性研究の大変強力な手段としての地位が確立されていると言うことができる。

3. 固体電子理論への大型計算機利用の現状と展望

前章でふれたように、固体電子論の現状はあまり複雑な結晶でないかぎりセルフコンシステントなバンド計算を用いて構造の安定性や色々の物性を定量的に予言できるところまで来ている。表面構造や複雑な結晶に対してもこのことが可能になりつつある。更に進んで希望する性質を持つ新しい物質を理論的に探す物質設計も夢でなくなりつつある。このような現実を可能としたのは勿論大型計算機の急速な進歩である。このことを東北大計算センターで見えてみると

昭和 52 年 1.1 mips (ACOS 700)

昭和 54 年 3.4 mips (ACOS 900)

昭和 57 年 15.0 mips (ACOS 1000)

であり、5 年間で演算速度は約 14 倍になっている。現在は更に一桁ないし二桁速い super computer の利用が現実のものとなりつつある。このような時点で我々は大型計算機を利用した固体電子論の研究の今後の進むべき方向について思いを致す必要がある。

現在我々は着目する結晶の構成原子に関するデータを input し、あとは計算機にまかせれば必要な output が得られる状態に近ずきつつある。このことに満足してしまうならば我々の存在価値は単なる計算機のソフト・ウェアの一部に過ぎなくなる。これを防ぐ道は明確な目的意識と物理的洞察に支えられた未知なるものへの好奇心であろう。そして、今後の研究の進む方向は大きく二つに分けられるであろう。

その第一は複雑な結晶（例えばグラファイト層間化合物）、表面構造、結晶内の欠陥などの複雑な系の電子構造の計算で、これは今後ますます盛んになってゆくであろうことについては余り多言を要しないと思う。

その第二は計算機実験である。これは更に computer simulation と物質設計とに分けられるであろう。後者については既に簡単に触れた。前者について言うならば、物性物理の対象は

常に問題を解析的方法によって追求することが可能とは限らない。このような場合 computer simulation が有力になる。また現実的なモデルでは simulate できない場合でも, simulate 可能な単純化したモデルで理論の検証には充分なことがある。統計力学のエルゴードの問題に computer simulation を適用し, その結果が予測と異なったものであり, このことが後のソリトンの発見につながっていった Fermi 達の例は印象的である。computer simulation ではパラメーターが大幅に制御可能であり, 極端条件での計算機実験ができる。このように考えると計算機実験は物性物理一般を対象とした新たな意味での実験物理とみなすべきであろう。

計算機シミュレーションによる格子欠陥研究 の現状と将来

東大・物性研 竹 内 伸

§ 1. はじめに

はじめに本小文で取り扱う問題を明確にしておきたい。対象とする実体は, 種々の結晶中の格子欠陥, すなわち点欠陥, 転移, 結晶粒界など, およびアモルファス物質, 特にアモルファス金属とし, 対象とする問題は, これらの原子構造およびその変化, 格子欠陥の運動が関与する諸現象とする。すなわち, 原子構造の乱れた状態およびそれが関わる諸物性が対象である。周辺の問題として, 結晶表面の問題, 結晶成長の問題があるが, ここでは議論の対象としない。

物性研究における「計算機シミュレーション」の定義は必ずしも明瞭ではない。特定の結晶のエネルギー・バンド計算なども本来「シミュレーション」の範疇に属するものであろう。しかし, ここでいうシミュレーションとは, この種の第一原理から出発したいわゆる理論計算ではなく, 第一原理からの取り扱いが不可能な, 多体効果の著しい系についての「近似的」な計算である。すなわち, 現実の物質について「原子モデル」を設定し, それについてのシミュレーションから何らかの有用な知見を得ようとする立場である。もう一つ別のタイプのシミュレーションとして, 特定の物質を対象とするのではなく, 一般性のある抽象的なモデルを作成して, それについて計算機による実験を遂行し, そこから何らかの法則性を見出そうとする研究がある。この種の研究はシミュレーションと呼ぶよりは「モデル実験」と呼ぶべきであろう。格子欠陥に関連した問題にも上記二種類のタイプのシミュレーションが行われている。以下, 実験