

多結晶ナノダイヤモンドの大規模量子シミュレーション

○星健夫(鳥取大学, 理研)・飯高敏晃(理研)・フィタ マリア(ハーバード大)

Large-scale quantum-mechanical simulation of nano polycrystalline diamond

HOSHI Takeo (Tottori University, RIKEN), IITAKA Toshiaki(RIKEN), FYTA Maria(Harvard University)

1. はじめに

ナノ多結晶ダイヤモンド(NPD) [1]はグラファイトからの直接変換で生成され、その性質の理解と制御には、sp²/sp³ 電子状態の競合など、ナノスケールの量子(電子状態)シミュレーションが重要となろう。

一方、著者(星)らは近年、10³-10⁷ 原子系の大規模量子シミュレーションの基礎理論構築とプログラムコード開発を行ってきた[2][3]。そこでは、オーダーN法を実現する数値アルゴリズムとスレーターコスター型ハミルトニアンを用いることにより、量子力学の枠内で大規模系が達成されてきた。

本年4月ごろより、手法の応用計算としてNPDに着目し、本講演では予備的な計算結果を示す。

2. 実験方法

計算は主に、2機のQuad-core Intel Xeon CPUおよびメモリ8GBを搭載した、ワークステーションを用いて行った。大規模計算手法としてクリロフ空間解法[3]を用い、10万原子系までの大規模動的計算を達成した。

3. 結果と考察

これまでの、より小さい系での計算[4]の発展として、欠陥を含むダイヤモンド構造を[111]方向に伸張させた(Fig. 1)。ダイヤモンド的領域とグラファイト的領域(Fig. 1(c))の混合が現れる。状態密度(Fig. 1(d))からも、グラファイト的領域の出現が確認できる。大規模計算ならではの結果として、ダイヤモンド的領域とグラファイト的領域の2種の境界面、結合でつながっている面とつながっていない面、をみてとることができる。実験的な直接の裏付けはないものの、こうしたドメイン構造の安定性は、普遍的であると考えられる。講演では、関連する計算結果も示す。

本講演の結果は予備的なもので、実験との直接対応には、空間スケール・時間スケールなど、大きな隔りがある。今後、実験家との議論を交えながら、ミクロスコピックな視点からの理解を進めていきたいと考えている。

参考文献

- [1] T. Irifune, A. Kurio, S. Sakamoto, T. Inoue, H. Sumiya: Nature, 421, 599 (2003).
- [2] <http://www.elses.jp>; 解説記事として「超大規模電子構造計算と10nmスケール系の物理」星健夫・藤原毅夫, 日本物理学会誌, 2006年4月号, pp.256-259.
- [3] R. Takayama, T. Hoshi, T. Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn, vol. 73, No.6, pp.1519-1524 (2004); R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, Phys. Rev. B 73, 165108 (2006); T. Hoshi, T. Fujiwara, J. Phys.: Condens. Matter 18, 10787 (2006)
- [4] M. Fyta, I. N. Remediakis, and P. C. Kelires, Phys. Rev. Lett. 96, 185503 (2006).

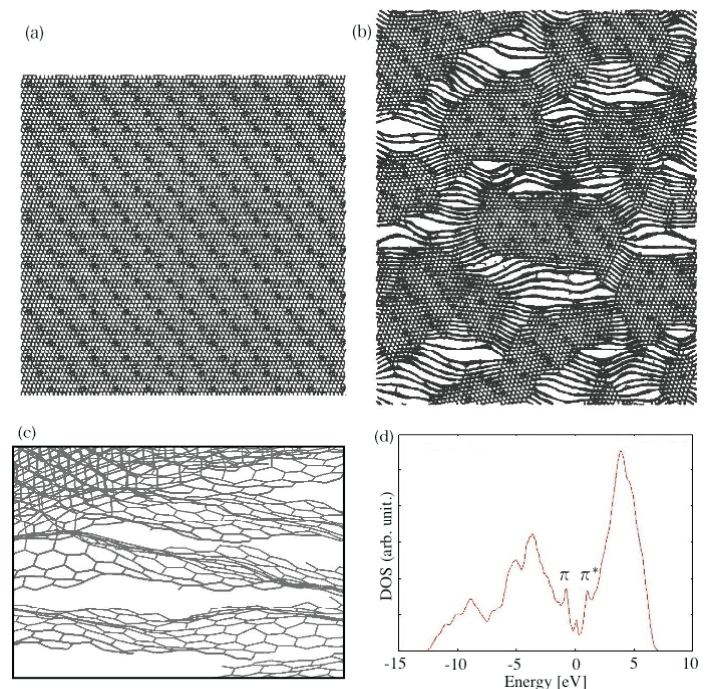


Fig.1. (a) (b) Example of results; Appearance of mixture of graphite-like and diamond-like regions. Initial and final structures with 107520 atoms. The [111] direction is placed in the vertical direction in Fig. The simulated system is periodic with a simulation cell size of 17 x 17 x 2 nm and the figures present only the structure within one periodic simulation cell. (c) Close up of a typical graphite-like region. (d) Typical profile of electronic density of states. Graphite-like regions give the peaks of π and π^* bands. Several initial defects remain in final structure, which give the small peak near the Fermi level ($E = 0$).