

オーダーN 遮蔽グリーン関数法の輸送現象計算への応用

Applications of order-N screened Green's function method to transport properties

永田徹哉、小倉昌子、赤井久純

T. Nagata, M. Ogura and H. Akai

大阪大学大学院理学研究科物理学専攻

Department of Physics, Osaka University, Toyonaka, Osaka 560-0043

現実的な系の丸ごとシミュレーションを目指して、一次元方向に 1000 個程度の原子が配列した 3 次元構造が直接的に計算できることが目標であるが、その第一段階として、10000 層程度の薄膜の直接量子シミュレーションを問題なく実行するために O(N)遮蔽グリーン関数法を開発してきた。O(N)化は遮蔽変換を用いてなされるが、これは構造グリーン関数を定義する参照系として一様な斥力ポテンシャル系利用することに相当する。このような斥力参照系を用いると構造グリーン関数は 3 線ブロック対角行列になり、この場合、グリーン関数の対角成分は O(N)の計算量で求めることができる。遮蔽変換と呼ばれるこのような変換が全く近似を含まず、純粋にアルゴリズムの問題として O(N)を実現している点が重要である。したがって、金属、絶縁体、半導体を問わず必要な精度を保ったまま適用が可能である。また、O(N) 遮蔽グリーン関数法を用いた相関関数の計算も可能である。この場合、セルフコンシステント計算に必要なグリーン関数のサイト対角項のみではなく、サイトをまたがるグリーン関数が必要であり、遮蔽変換を用いても O(N)にはならず O(N²) となる。しかし、アルゴリズムの工夫によって、この計算を O(N)で実行することに成功した。

この方法を久保グリーンウッド公式にもとづく電気伝導率計算に適用し PN 接合の DC 電気伝導を計算した。計算を行ったのは P 型および N 型にドーパされた GaAs からなる PN 接合であり、両端に Al 電極がつけられている。図 1 にその構造を示す。P 型領域は(Ga_{1-x}Be_x)As、N 型領域は(Ga_{1-x}Si_x)As である。図 2 に有限バイアス下における層ごとに分離した状態密度を示す。両端にアルミの電極、中央が接合部である。明確なバンド変形と、そのバイアス依存性を見ることができる。

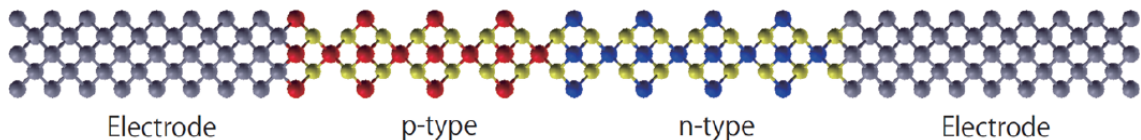


図 1. PN 接合 Al/(BeGa)As/(SiGa)As/Al。

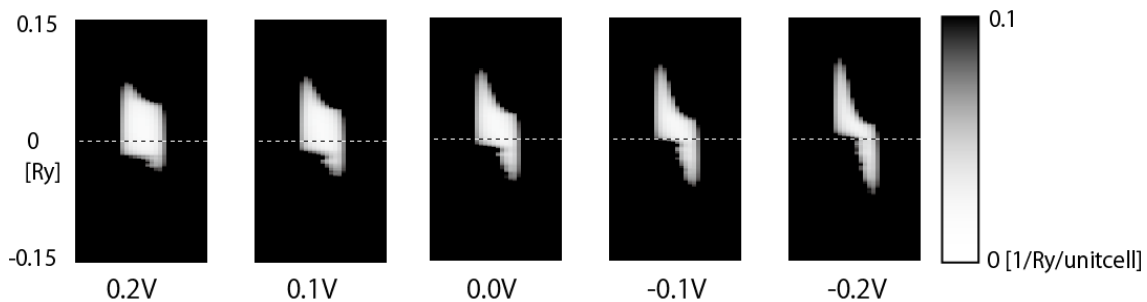


図 2. 有限バイアス下の PN 接合の局所状態密度。横軸は層、縦軸はエネルギー。