

## 主論文要旨

報告番号	甲乙第	号	氏名	甲賀淳一郎
主論文題名				
強結合法による凝縮系のモデリング: ナノ構造から複雑液体まで				
内容の要旨				
<p>本論文においては、強結合法および強結合分子動力学法の開発と応用を行う。特に、現実的な系への適用に重点を置く。まず (1) 強結合法の移植性を改良し、(2) オーダー<math>N</math>化のための方法を開発する。さらに、ここで得られた方法を使って、ナノ構造、複雑液体、対応するアモルファス固体などの性質の解析を行う。</p> <p>第一章は、本論文全体の導入である。計算機中にて凝縮系を扱う際の様々な手法、適用される近似などを紹介し、その中での強結合法の役割について言及する。さらに、本論文全体の構成について記述する。</p> <p>第二章および第三章では、強結合法および強結合分子動力学法について解説する。第二章においては強結合法の基礎について議論し、また通常の分子動力学法についても簡単な紹介を行う。さらに、強結合法の枠組みの中でいかに分子動力学シミュレーションを行うか、ということについて解説する。第三章は、オーダー<math>N</math>強結合法について議論する。通常、強結合法の計算コストは原子の数 <math>N</math> に対し三乗でスケールするが、適切な近似を導入することによりこのスケールリングを線形にする、つまりオーダー<math>N</math>化できることを示す。特に、非直交強結合近似ならびに分子動力学シミュレーションへの拡張に重きを置いて、オーダー<math>N</math>化の方法を構築する。この章ではさらに、得られたオーダー<math>N</math>化の方法を用いて、ゲルマニウム (Ge) について試験的な分子動力学シミュレーションを実行する。この結果、オーダー<math>N</math>非直交強結合近似においても現実的な分子動力学計算が実行可能であることをはじめて実際に示す。</p> <p>第四章、第五章においてはシリコン (Si) ナノ構造の発光特性について、我々が行った計算・解析の結果を報告する。バルク Si と異なりナノ構造 Si は室温にて高効率の発光を示すことが知られている。本研究ではナノ構造について新しい構造モデルを導入し、その電子状態や光学的性質について調べる。第四章では、「点群対称性の欠如した構造モデル」という新しい構造モデルを扱う。このモデルについて強結合法による解析を行い、これまで輻射再結合時間について指摘されていた理論計算と実験結果の不一致が解消されることを示す。第五章においては、「末端が完全でない場合の Si ナノ構造の構造緩和を評価する」というモデルを扱う。</p>				

## 主論文要旨

### 内容の要旨

これまで末端が完全な場合の構造緩和は調べられてきたが、そうでない場合について本研究においてはじめて扱われる。このモデルについてやはり強結合法による解析を行い、いわゆる F'-バンド発光と呼ばれるタイプの発光現象が良く説明されるモデルであることを明らかにする。

さらに第六章、第七章において液体およびアモルファス Ge の静的・動的構造について解析する。特に、高密度における性質についての我々の計算結果を示す。第六章においては、まず移植性の高い強結合法を Ge について新たに構築し、その方法によって液体 Ge の計算を行う。低密度から高密度にかけて強結合分子動力学計算を行い、各々の密度における静的・動的構造を計算する。実験では得られない結合角の分布などについても解析を行うことにより、液体 Ge の局所構造の詳細を解明する。我々の解析により、液体 Ge の局所構造は加圧に伴いランダムな配位をとる構造が共有結合より生じる構造と比較して増加すること、また残った共有結合は、圧縮に伴い歪んだ  $\beta$ -Sn 構造から歪みのない  $\beta$ -Sn 構造に近くなることなどが明確に示される。第七章では、アモルファス Ge に対する強結合分子動力学計算を行った結果について報告する。用いた計算法は、本論文にて構築された、オーダー  $N$  非直交強結合分子動力学法である。まず、Ge についてガラス転移シミュレーションを行う。融点よりも高い温度より計算をはじめ、急冷することによりアモルファス Ge を作成する。系が液体、過冷却液体、そしてアモルファス固体へと変化していく様子を詳細に渡って解析する。その結果、ガラス転移の際に生じる大きな構造変化は、共有結合の増加によってもたらされることを指摘する。さらに、得られたアモルファス構造を圧縮し、その構造変化について明らかになった点を報告する。計算を行った各々の密度について静的・動的構造をつぶさに調べ、アモルファス Ge の局所構造は低密度では四配位構造を取り、高密度では  $\beta$ -Sn 構造に近くなることを示す。また、中間的な密度においては低密度の構造と高密度の構造の双方が存在することを明らかにする。加圧下における液体およびアモルファス Ge についてのこれらの包括的な知見は、本研究によってはじめてもたらされたものである。

最後に、第八章において本論文において得られた成果をまとめ、その帰結について議論する。さらに、将来の研究に向けた課題についてもコメントする。