

「定圧第一原理分子動力学法でのSi結晶構造の安定性とk点サンプリング数との関係」

講演者氏名	田代 順一
所属	慶大理工
講演タイトル	「定圧第一原理分子動力学法でのSi結晶構造の安定性とk点サンプリング数との関係」
講演概略	我々のグループは定圧第一原理分子動力学法を用いて、Si結晶の圧力誘起構造相転移のシミュレーションを行ってきた。しかし、高圧相は金属状態となるため、第一原理分子動力学法での扱いが難しくなる。特に、電子状態計算の精度が悪いと結晶構造が歪んでしまう。そのため、比較的大規模な計算にならざるを得ない。講演では、電子状態計算の精度と結晶構造の関係と今後の展望を報告する。