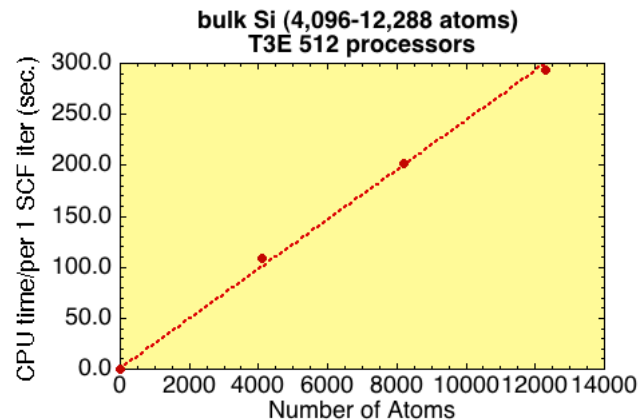


オーダーN法DFT計算プログラムCONQUESTの開発

物質・材料研究機構: 宮崎 剛

University College London: D. R. Bowler and M. J. Gillan



CONQUEST: オーダーN法DFT

超大規模系に対する第一原理計算

- 通常の方法: 計算量が N^3 に比例
- $O(N)$ 法: 計算量、メモリーが N に比例
- 数万原子以上を含む系に対する第一原理計算が可能。

(通常の方法では、数百~千原子程度まで。)

