

吸収係数計算のためのコード開発(小谷@鳥取大学)

誘電関数を計算すればよい.工夫をして安定した計算が可能になるようにした(応用計算はこれから).

- ブリルアンゾーンの積分点を十分に多く取る
- 積分点のとりかたの工夫

これらで,およそ安定した計算結果が出せるようになった.とくに吸収端の計算精度を上げた.

吸収係数はこれらのデータから簡単に計算できる.

現状でも超格子(20原子程度のセル)でも適用可能のはず.ただ課題はある.

課題:

- 1.スピン軌道相互作用を入れた計算
- 2.並列化による高速化
- 3.どう分析するのか?

