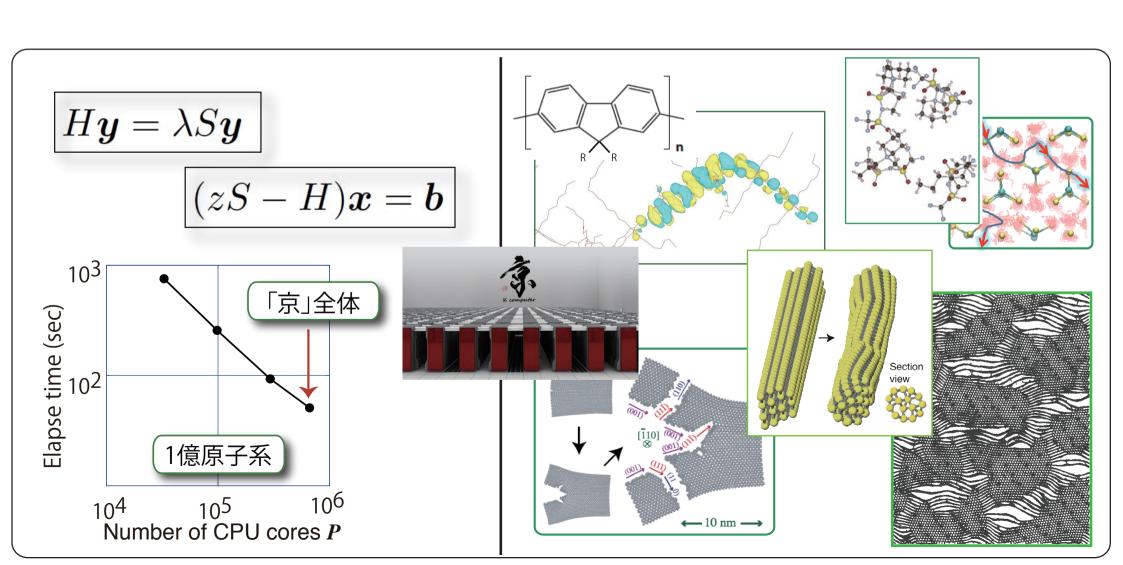
「京」での100ナノ電子状態計算にみる、数理と物質科学の融合

星健夫(鳥取大学工学研究科応用数理工学講座)

出身:東京大学工学部物理工学科

主な所属学会:物理学会、応用数理学会、応用物理学会



内容一覧(4/22, 5/13)

- 1. 全体の概要
- 2. 計算:並列計算への入門
- 3. 応用: ヘリカル金ナノワイヤ
- 4. 応用:シリコン脆性
- 5. 数理:密度行列
- (波動関数を使わない量子力学)

- 6. 数理:大行列数理への入門
- 7. 数理:シフト型クリロフ部分空間理論 (新しい超並列型アルゴリズム)
- 8. 応用:最近・現在進行中の話(ナノダイヤ・有機伝導)
- 参考:基盤となる電子状態計算についての網羅的教科書
 - ・R.M.マーチン「物質の電子状態」丸善 (2012)
 - ・藤原 毅夫, 勝藤 拓郎, 藤森 淳 「固体電子構造論─密度汎関数理論から電子相関まで」内田老 (2015)

4/22

09:00-10:30

10:45-12:15

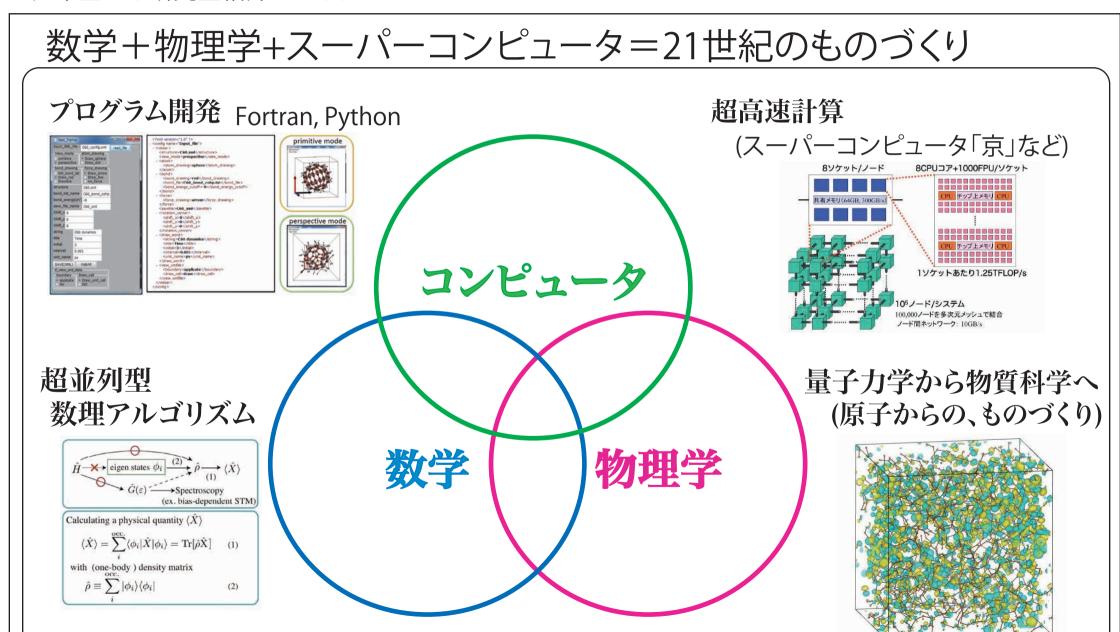
13:30-15:00

5/13

10:45-12:15

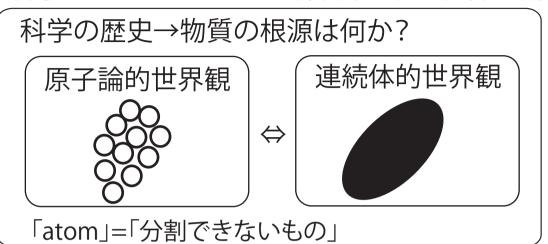
13:30-15:00

1、2年生むけ研究室紹介スライド



計算物質科学の基盤的「世界観」

科学シミュレーション→計算機の中に世界を構築→「世界観」が必要

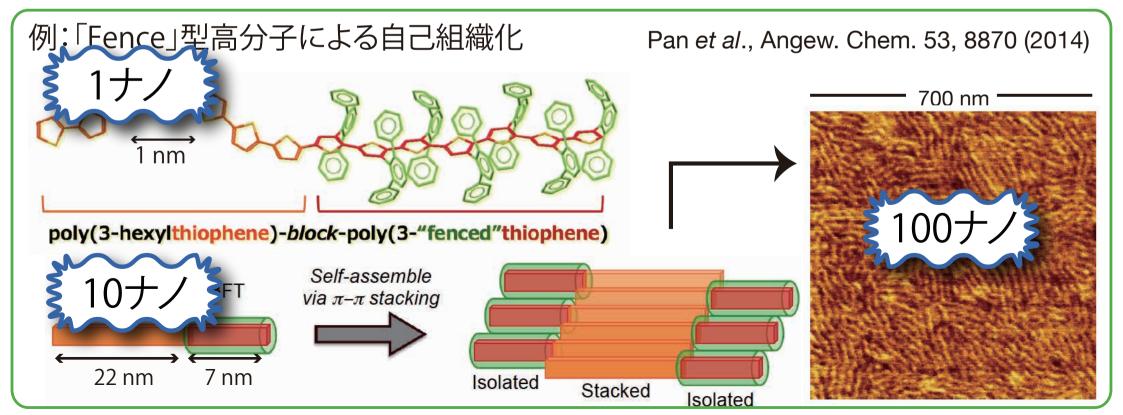


現代物質科学の成立

- •錬金術(Alchemy)
 - →化学(chemistry)
- •周期律表(1869)
- •量子力学(1925ハイゼンベルグ)
- →工学の基礎へ

注:相対論(1905)

原子スケールからのアップスケーリング→「100ナノ系」2つの世界観のクロスオーバー

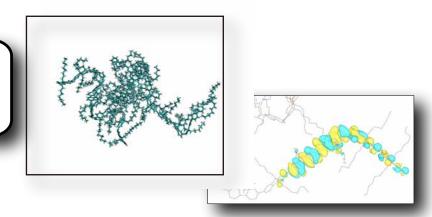


全体のOverview

Overview: Application-Algorithm-Architecture co-design

a common concept in the current computational physics

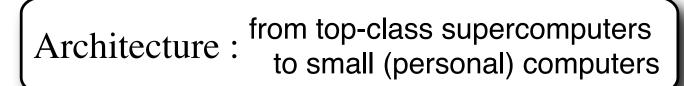
Application : Materials research with electronic structure





$$H\mathbf{y} = \lambda S\mathbf{y}$$

$$(zS - H)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$







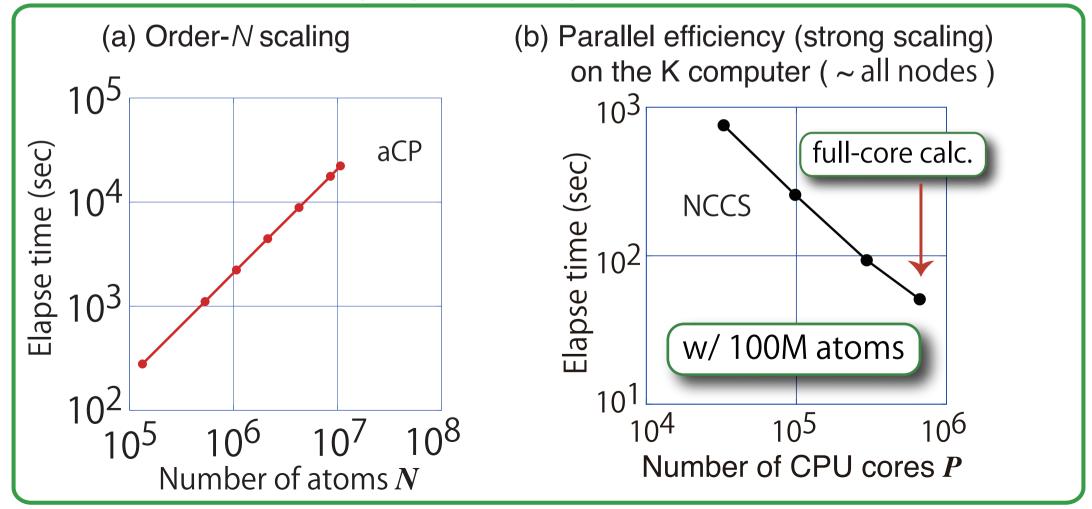
ELSES, our electronic-structure calculation code

Benchmark with upto 100M atoms(\rightleftharpoons Si:(126nm)³region)

(Hoshi et al., JPCM24, 165502(2012) JPSJ 82, 023710 (2013); JPSCP. 1, 016004 (2014))

aCP :amourphous-like conjugated polymer, poly-(9,9 dioctil-fluorene),

NCCS: sp2-sp3 nano composite carbon solid



ELSES, our electronic-structure calculation code

Benchmark with upto 100M atoms(\rightleftarrows Si:(126nm)³region)

(Hoshi et al., JPCM24, 165502(2012) JPSJ 82, 023710 (2013); JPSCP. 1, 016004 (2014))

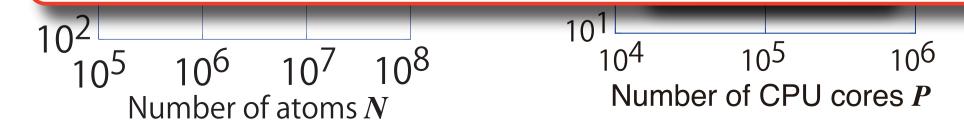
aPF: amourphous-like conjugated polymer. poly-(9.9 dioctil-fluorene),

Methodology

 ullet Oringinal linear-algebraic order-N algorithms with generalized shifted linear equations

$$(zS - H)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

- Applicable both to metals and insulators
- Modelled (TB-type real-space) systems based on ab initio calc.,
- •Options: DFT-derived charge-self-consistent formulation
 - van-der-Waals correction



Elapse time (sec)

Basic equations

Generalized eigen-value (GEV) equation

$$H\mathbf{y}_k = \varepsilon_k S\mathbf{y}_k$$

H, S: Hermitian, S: positive definite (S = I)

wavefunction formulation

$$G = \sum_k rac{oldsymbol{y}_k oldsymbol{y}_k^{\mathrm{T}}}{z - arepsilon_k}$$

Generalized shifted linear (GSL) equations

$$(zS - H)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$
 (z : complex energy)

non-Hermitian

the propagation (Green's) function formulation

$$\longrightarrow x = Gb$$

with
$$G \equiv (zS - H)^{-1}$$
: the Green's function

共線残差定理を用いたシフト型クリロフ部分空間理論の物理への応用例

- [1] A. Frommer, Computing 70, 87 (2003) (原論文) → QCD
- [2] R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, Phys. Rev. B 73, 165108 (2006). →**大規模電子状態計算**(本研究)
- [3] S. Yamamoto, T. Fujiwara, and Y. Hatsugai, Phys. Rev. B 76, 165114 (2007);
 - S. Yamamoto, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang and T. Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn., 77,114713 (2008).
 - → **多体問題** [full-CI型計算, 多軌道拡張ハバードモデル, La_{3/2}Sr_{1/2}NiO₄]
 - → Lanczos (基底状態) + シフト型クリロフ (excitation spectrum)
- [4] 実空間グリッド型第一原理量子電気伝導計算(RSPACE)

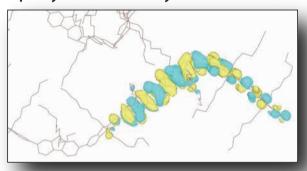
小野倫也(筑波大)・岩瀬滋(阪大)との共同研究(submitted)

- [5] F. Giustino, M. L. Cohen, S. G. Louie, Phys. Rev. B. 81, 115105 (2010)
 - → 第一原理電子励起(GW)計算
- [6] T. Mizusaki, K Kaneko, M. Honma, T. Sakurai, Phys. Rev.C 82, 024310 (2010)
 - → Shell model 計算
- [7] Y. Futamura, H. Tadano and T. Sakurai, JSIAM Letters 2, 127 (2010).
 - → 実空間グリッド型第一原理計算(RSDFT)

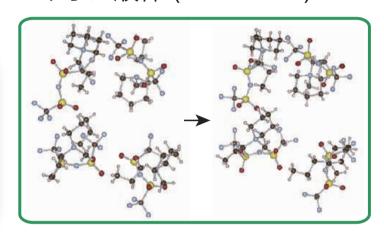
ELSESによる応用研究

謝辞(共同研究・データ提供) 西野信也(東大/ヒューリンクス)・藤原毅夫(東大), 山元進(工科大), 山崎久嗣(トヨタ自動車), 善甫康成(法政大), 石田雅也(住友化学)

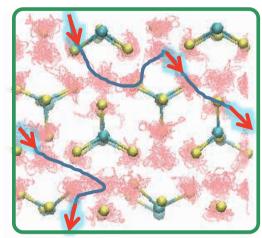
有機物質 (アモルファス状共役高分子) poly-(9,9 dioctyl fluorene)



イオン液体 (PP13-TFSI)

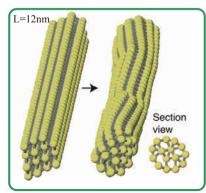


Liイオン拡散

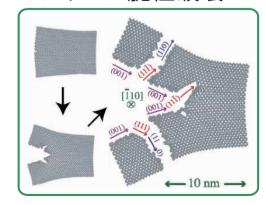


Nishino et al. PRB90, 024303, (2014)

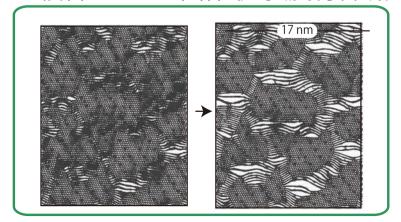
らせん金ナノワイヤ



シリコン脆性破壊



ナノ複合カーボン固体(超強度材料研究)



展望

現状:

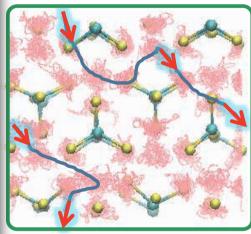
電子状態計算・MDのみ

発展:電子物性 (例:電気伝導(波束ダイナミクス))

デバイスへ (有機系など)

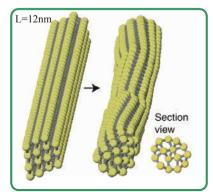
藤原毅夫(東大), 石田雅也(住友化学)

Liイオン拡散

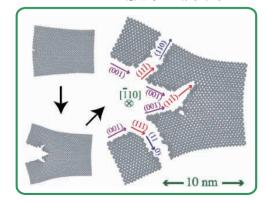


Nishino et al. PRB90, 024303, (2014)

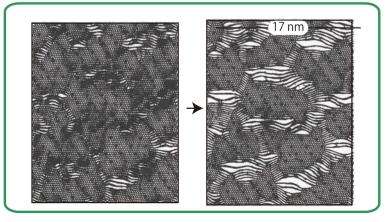
らせん金ナノワイヤ



シリコン脆性破壊



ナノ複合カーボン固体(超強度材料研究)



有機デバイス材料の100ナノ量子シミュレーション

有機 材料

- ・エレクトロニクス・医療応用など、産業への大きな期待
- ・分子の性質+凝集体(100ナノ)の性質



対応する計算が必要

参考:昨年10月9日に東工大(すずかけ台)での研究会内容(→発展:H27「京」利用プロジェクトで共同研究)

インフォーマル計算科学セミナー ~100ナノ有機物質量子シミュレーションにむけて~

世話人:多田朋史(東工大)&星健夫(鳥取大)

『京』での100ナノ電子状態計算と有機物質系 星健夫(鳥取大)

- π電子近似によるポリマー鎖の量子波束散乱シミュレーション 多田朋史(東工大)
- ナノカーボン材料の熱電変換シミュレーション 山本貴博(東京理科大)
- 電子状態計算を指向した行列計算アルゴリズム 山本有作(電通大)







