

第一原理と強束縛近似を連結した大規模シミュレーションプラットフォームの開発とその応用

Development of large scale multiscale simulation platform combining first-principles and tight-binding methods and its applications

小野 倫也

神戸大学大学院工学研究科

1. 研究目的

近年の実験技術の向上により、数ナノメートルスケールの構造体を作成し、その構造、電子状態、電気伝導特性などを計測することが可能になっている。このように実験的研究のみでは明らかにすることが困難な問題に対し、実験的手法に加えて理論計算により各現象がなぜ起こるのかという内部のメカニズムを明らかにすることができれば、その応用、発展の可能性がさらに広がるはずである。本研究では、富岳等の超並列スパコンと第一原理計算を駆使したデバイス機能予測・設計シミュレーションを実現すべく、第一原電子状態・伝導特性計算のための実空間差分法に基づいた計算コード RSPACE の開発と、開発した RSPACE と OFP を駆使した世界最大級の大規模伝導特性シミュレーションの実施を目的としている。

2. 研究成果の内容

2019年度は、2017年度より進めていたシフト共役勾配法と再帰的グリーン関数法を組み合わせた高速グリーン関数法を RSPACE に組み込んだ。伝導特性を計算するには、散乱領域のグリーン関数行列の一部の要素しか必要としない。一方で伝導計算の精度を向上させるには、多くのエネルギー点でグリーン関数を計算する必要がある。共役勾配法は、グリーン関数行列の必要な要素のみを計算するため、計算コストとメモリ使用量の点で優れている。また、エネルギー項は、実空間差分法に基づく伝導計算法ではハミルトニアン行列の対角成分にしか寄与しないため、シフト共役勾配法を用いれば、計算時間の大幅な増加を伴うことなく多くのエネルギー点を計算できる。しかしながら、シフト共役勾配法を用いたグ

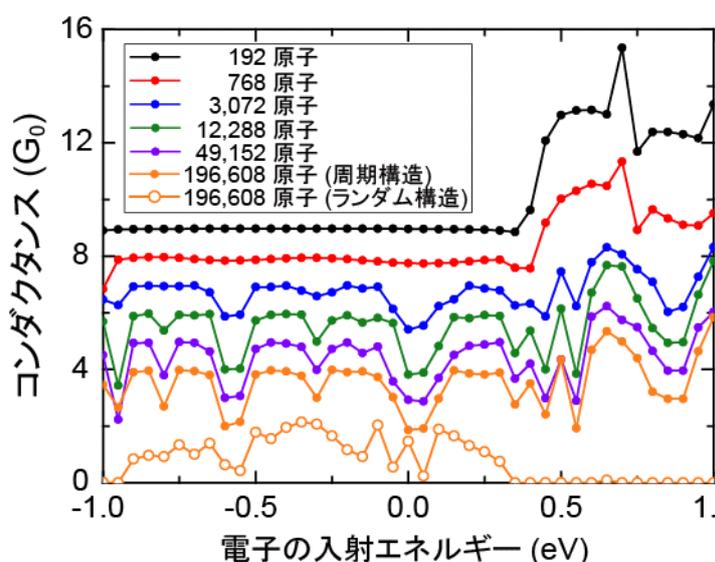


図1: 二層カーボンナノチューブのコンダクタンススペクトル。

グリーン関数計算アルゴリズムの計算コストが散乱領域長さの 2 乗に比例することが、これまで大規模計算への障害となっていた。本課題では、グリーン関数の計算に

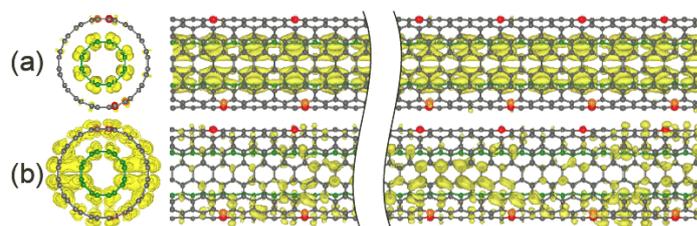


図 2: 散乱波動関数の電子密度分布

再帰的グリーン関数法を援用することにより、計算コストを散乱領域長さに比例させることに成功した。開発したコードを用いて、最大で 196,608 原子からなる不純物をドーピングした二層カーボンナノチューブの伝導特性シミュレーションを実現した。原子波動関数を基底関数に用いた第一原理伝導特性計算法で、30,000 原子強のモデルを用いた例(W. Y. Rojas et. al., Phys. Chem. Chem. Phys. 21, 26027 (2019))が報告されているが、本シミュレーションはこれを大きく超えるものである。

図 1 に散乱領域の長さを変化させた場合のコンダクタンススペクトルを、図 2 に散乱波動関数の電子密度分布を示す。図 1 より、散乱領域の原子構造が周期的な場合、散乱領域が長くなるにつれコンダクタンススペクトルのピークが鋭くなる様子が分かる。これは、周期的な原子構造が作る電子のバンド構造に起因するものと考えられる。一方で、散乱領域の原子構造がランダムな場合、コンダクタンススペクトルに鋭いピークが見られず、全体的に低いコンダクタンスとなった。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

散乱領域のグリーン関数計算は、第一原理電気伝導特性の計算のボトルネックのひとつである。シフト共役勾配法と再帰的グリーン関数法は、この部分の計算コストを削減するものである。シフト共役勾配法は超並列計算に適したアルゴリズムであり、本課題で実施した 196,608 原子の伝導特性シミュレーションは、OFP の 2,048 ノードを用いて実施した。他の計算機では実施できない規模の計算であり、本学際共同利用によってなし得た大規模シミュレーションである。

4. 今後の展望

2019 年度の研究では、RSPACE と OFP により、世界最大級のモデルを用いた二層カーボンナノチューブの第一原理伝導特性シミュレーションを実現した。本プロジェクトの本来の目的であるデバイス機能予測・設計を実現するには、カーボンナノチューブのような単純な原子構造のみならず、アモルファス等複雑な原子構造も取り扱わねばならない。今後は、複雑な原子構造に対しても大規模シミュレーションを実施できるようコード開発を進める。また、富岳を用いた大規模シミュレーションを実現すべく、OFP での性能測定結果を参考にして富岳で効率的に実行できるよう計算コードのチューニングも実施する。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- ・ Hashmi, K. Nakanishi, T. Ono: Graphene-based Symmetric and Non-Symmetric Magnetoresistive Junctions, J. Phys. Soc. Jpn., 89(03), 034708 1-7 (2020).
- ・ Y. Egami, S. Tsukamoto, T. Ono: Efficient calculation of self-energy matrices for electron-transport simulations, Phys. Rev. B, 100(07), 075413 1-15 (2019).
- ・ T. Harashima, Y. Hasegawa, S. Kaneko, M. Kiguchi, T. Ono, T. Nishino: Highly Reproducible Formation of a Polymer Single-Molecule Junction for a Well-Defined Current Signal, Angewandte Chem. Int. Ed., 58, 9109-9113 (2019).
- ・ T. Ono: DFT calculation for oxidation reaction of SiC(0001), Mater. Sci. Forum, 963, 208-212 (2019).

(2) 学会発表

- ・ T. Ono: DFT study on carrier transport in electronic devices, 5th International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (IC4N), (June 30- July 3, 2019, Corfu, Greece).
- ・ T. Ono: DFT study on carrier transport property at interface, 32nd International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC 2019), (October 28- 31, 2019, Hiroshima, Japan).
- ・ 江上喜幸、塚本茂、小野倫也: 大規模第一原理電子輸送シミュレーションに向けたグリーン関数計算手法の開発, 日本物理学会第 75 回年次大会, (March 16-19, 2020, Nagoya, Japan)

(3) その他

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	1,000	
Oakforest-PACS	○	1,000,000	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			