

受付 ID	16a50
分野	物質科学

オーダー $N$ 法 DFT 計算プログラムを用いた

## 大規模系の電子状態解析

Electronic-structure analysis for large-scale systems with order- $N$ DFT code

中田 彩子

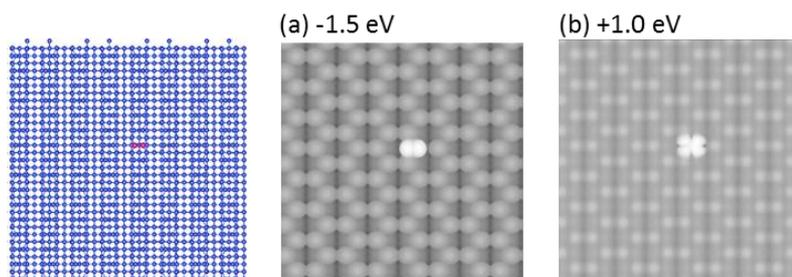
物質・材料研究機構

## 1. 研究目的

$O(N)$ 法第一原理 DFT 計算は大規模系を高精度に取り扱うための有力な手法である。我々の開発しているプログラム CONQUEST では、密度行列最小化(DMM)法に基づいて計算を行う際に密度行列の局所性を利用することで  $O(N)$ 法を実現しており、密度行列計算における切断半径により計算の精度やコストを制御できる。最近では百万原子を越える系に対する第一原理計算も十分な速度で計算可能であることを示している。DMM 法では電子密度は最適化されるが、対角化計算を行わないためハミルトニアン固有値、固有ベクトルといった一電子波動関数に対応する情報は得られない。これらの情報を得るには  $O(N)$ 計算により密度行列を最適化した後に一度だけ固有値計算をすればよいが、 $O(N)$ 法が必要となる大規模系に通常固有値計算手法( $O(N^3)$ )を用いるのは計算コスト上困難である。そこで本研究では、特定の範囲にある固有状態のみを効率的に計算することのできる櫻井-杉浦法を CONQUEST と組み合わせることによって、大規模系の一電子波動関数の解析を試みた。

## 2. 研究成果の内容

図1は Si(100)表面へ  $P_2$ 分子が吸着した際の STM 像の計算結果を実験の像と比較したものである。STM 像の計算では、実験での測定バイアスに対応するエネルギー範囲内の固有状態の情報が分かればよい。この計算では、3,074 原子系のハミルトニアンを CONQUEST で最適化し、[-1.5 : +1.4] eV の範囲内の固有状態を櫻井-杉浦法で計算している。この際、全対角化では 58,924 状態を計

図1. Si(100)表面への  $P_2$ 吸着の STM 像シミュレーション

算しなければならないが、櫻井-杉浦法では 778 状態のみで済む。今回の手法の生体分子や複雑表面への適用性も確認しており、数十万原子を含む系の電子状態計算にも成功している。

### 3. 学際共同利用として実施した意義

CONQUEST と 櫻井-杉浦法の組み合わせを共同で行うことにより、櫻井-杉浦法による計算を効率的に実行するためのノウハウを得ることができた。また、系や用いる基底関数による行列の性質の違いなどを、物質科学と情報科学の双方の視点から詳細に解析することができた。

### 4. 今後の展望

本研究で開発した手法をナノスケールでの半導体の電子状態解析など実際の材料への応用を試みる。また CONQUEST 内で 櫻井-杉浦法を実行するときの効率化に取り組む。

### 5. 成果発表

#### (1) 学術論文

Ayako Nakata, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, David R Bowler, Tsuyoshi Miyazaki, “Efficient calculation of electronic structure using  $O(N)$  density functional theory”, *Journal of Chemical Theory and Computation*, submitted.

#### (2) 学会発表

中田彩子他, “Improvement of efficiency and accuracy of large-scale DFT calculations and efficient analysis of their electronic structures”, TIA かけはしポスター交流会, 2016 年 8 月, つくば.

中田彩子他, “生体分子の電子状態解析のための大規模第一原理 DFT 計算手法の開発”, 第 54 回日本生物物理学会年会, 2016 年 11 月, つくば.

Ayako Nakata et al., “Large-scale DFT calculations using multi-site support functions in CONQUEST”, APS March Meeting 2017, 2017 年 3 月, New Orleans (USA).

#### (3) その他

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS		
HA-PACS/TCA		
COMA	○	900
※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。		