

汎用電子状態計算プログラム OpenMX の開発と応用

013

Development of large-scale DFT code: OpenMX and its applications

尾崎泰助 t-ozaki@issp.u-tokyo.ac.jp

東京大学物性研究所

「初めに」物質科学におけるシミュレーションの出発点は量子力学に基づく第一原理計算である。密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算は交換相関項に大胆な近似を導入するものの、計算精度と計算コストの面でバランスの取れた手法であり、電子材料、磁石材料、構造材料、触媒等、多岐に渡る応用研究が進められている。近年、DFT 計算を実行するためのソフトウェアが整備され、理論家のみならず実験グループも第一原理計算を行い、自ら実験結果の解釈を行うことも珍しくない。汎用的に用いられる DFT ソフトウェアの多くは欧米の研究機関で開発されており、計算手法・ソフトウェアの開発において日本を含めたアジアのコミュニティの存在感は残念ながら大きくない。その様な研究は欧米に任せておけば良いという声もあることは承知であるが、物質科学シミュレーションの根幹をなす第一原理計算の手法開発・ソフトウェア開発を止めることは物質の普遍性・個別性を深く理解する機会をも失ってしまうように思われる。我々は第一原理計算の手法開発のプラットフォームを維持管理するために、汎用第一原理電子計算ソフトウェア OpenMX の開発しており、講演ではその開発と応用事例を紹介したい。

「OpenMX の開発と展開」 OpenMX(Open source package for Material eXplorer)は擬ポテンシャル法と最適化数値局在基底関数[1]に基づく第一原理電子状態計算のソフトウェアパッケージであり、GNU-GPL の規約に則り、公式 web サイトからフリーで利用可能である[2]。2000 年より尾崎(当時は産総研所属)が中心となり開発を開始し、その後、日本、韓国、中国、台湾、スペイン等の大学、国立研究所、企業研究所の研究者が参加して現在も活発に開発が続けられている。アジア発の第一原理計算ソフトウェアとしては最も広く活用されている。計算精度と計算速度の両立に配慮しながら、多岐に渡る計算機能(オーダー N 法、ノンコリニア磁性、スピン軌道相互作用、非平衡グリーン関数法による電子伝導計算、バンドアンフォールディング法、XPS スペクトル計算、分子動力学法、有効遮蔽媒質法、NEB 法、最局在ワニエ関数等)が実装されている。これまでの適用事例はグラフェン、カーボンナノチューブ等のカーボン材料、シリセン等の二次元材料、トポロジカル絶縁体、遷移金属酸化物、リチウムイオン電池材料、鉄鋼材料、磁石材料など多岐に渡っており、700 報を超える学術論文が出版されている。これまでに 17 回の講習会・開発者会議・スクール等を開催し、開発者・ユーザーコミュニティにおける交流促進を図っている。「京」、

ポスト「京」プロジェクト、また元素戦略プロジェクトにおいても中核的なソフトウェアとして広く活用されている。近年では他のソフトウェアの計算エンジンとして使用されたり、データベース(基底関数、擬ポテンシャル)が他のソフトウェアに組み込まれて使用される事例もあり、多様な展開が見られる。また北陸先端科学技術大学院大学、金沢大学、東京工業大学、オレゴン州立大学等の大学の授業でも活用されている。

「最近の発展」2019 年 12 月に OpenMX の最新版である Ver. 3.9 の一般公開を開始した。Ver. 3.9 では多岐に渡る新機能が実装されているが、特に内殻電子の絶対束縛エネルギー計算[2]と局在自然軌道を用いたオーダー N 法[3]に関してその計算手法と応用事例(図参照)を講演では紹介する。また将来の開発目標とコミュニティ形成に関してもふれる予定である。

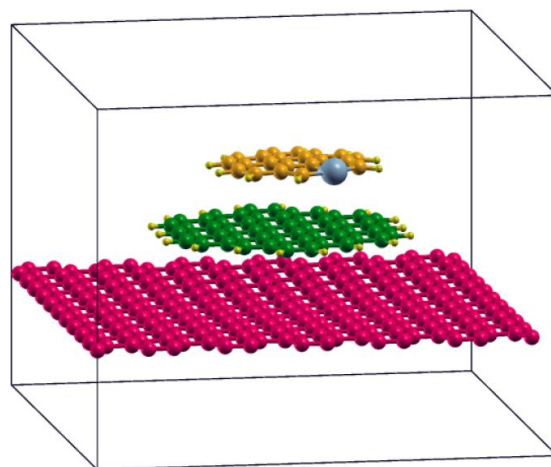


図 実験及び理論計算から決定された単原子分散 Pt の担持構造

【代表的開発寄与者】

木野日織(NIMS)、Jaejun Yu(SNU)、Myung Joon Han(KAIST)、石井史之(金沢大学)、T.V.T Duy(AISIN SEIKI)、H. Weng(GAS)

【関連プロジェクト】

ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」

【参考文献】(最大3本)

- [1] T. Ozaki, Phys. Rev. B. 67, 155108, (2003).
- [2] T. Ozaki and C.-C. Lee, Phys. Rev. Lett. 118, 026401 (2017).
- [3] T. Ozaki, M. Fukuda, G. Jiang, Phys. Rev. B 98, 245137 (2018).

【関連WEB】(最大2本)

- [1] <http://www.openmx-square.org/>