

OpenMX の開発と材料界面への応用 ～材料の界面問題への第一原理計算の適用に向けて～

東大物性研 尾崎泰助
t-ozaki@issp.u-tokyo.ac.jp

密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算は汎用ソフトウェアの普及に伴い、物質・材料研究の有用ツールとして幅広く応用展開が進んでいる。物質構造の相対的安定性などの予測精度は信頼に足る精度に達しており、ナノスケールデバイスの電気伝導特性の設計、永久磁石の磁気異方性予測など、より挑戦的な課題に対して実験に先立って物質設計が行われるようになってきている。さらに一步を進め、産業応用を志向した物質・材料設計を考えた場合、現実の複合構造の複雑さから超並列計算機を持ってしても第一原理電子状態計算の適用は容易ではない。我々はより現実に近い物質系の取り扱いを可能とするために、計算コストが原子数に比例したオーダーN法を開発し、第一原理電子状態計算手法の適用範囲を大幅に拡張してきた [1-7]。また汎用ソフトウェアの多くが欧米産である状況を鑑み、日本発の第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX [2] の整備と普及に努めてきた。計算物質科学におけるソフトウェアは実験・理論を含め情報集約のハブとしての役割を担うようになっており、基盤ソフトウェアの開発は物質・材料研究のイニシアティブを握る上でも重要である。講演では理論・ソフトウェアの整備状況を概観し、「京」に代表されるスーパーコンピュータを活用して、現実系に対してどのような計算が可能 [8-11] になってきたのか紹介し、今後の連携への足掛かりとしたい。

- [1] T. Ozaki, Phys. Rev. B 67, 155108, (2003).
- [2] <http://www.openmx-square.org/>
- [3] T. Ozaki, Phys. Rev. B 74, 245101 (2006).
- [4] T.V.T. Duy and T. Ozaki, Comput. Phys. Commun. 185, 777 (2014).
- [5] T.V.T. Duy and T. Ozaki, Comput. Phys. Commun. 185, 153 (2014).
- [6] T.V.T. Duy and T. Ozaki, The Journal of Supercomputer DOI 10.1007/s11227-015-1568-8
- [7] <http://www.openmx-square.org/openfft/>
- [8] H. Sawada, S. Taniguchi, K. Kawakami, and T. Ozaki, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 21, 045012 (2013).
- [9] T. Ohwaki, M. Otani, and T. Ozaki, J. Chem. Phys. 140, 244105 (2014).
- [10] T. Ohwaki, M. Otani, T. Ikeshoji, and T. Ozaki, J. Chem. Phys. 136, 134101 (2012).
- [11] H. Jippo, T. Ozaki, and M. Ohfuchi, Appl. Phys. Express 7, 025101 (2014).