18p-A2-15

超大規模電子状態理論による有機材料シミュレーション

Organic material simulations by ultra-large-scale electronic state theory

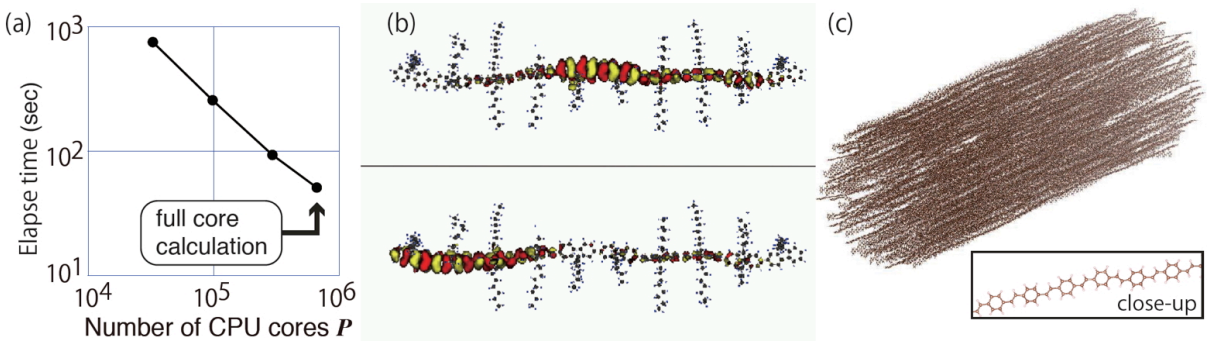
鳥取大院工 [1], JST-CREST(PostPeta) [2]　○星健夫 [1,2], 横山誠也 [1]

Tottori Univ. [1], JST-CREST(PostPeta) [2], ○Takeo Hoshi[1,2], Seiya Yokoyama[1]

E-mail: hoshi@damp.tottori-u.ac.jp

自作の超大規模電子状態計算コード ELSES[1]をもちいて有機材料シミュレーションに取り組んでおり、理論概要と予備的結果を報告する。我々は独自の数理手法(シフト型線形方程式にたいするクリロフ部分空間理論)[2]によりオーダーN 型超並列電子状態計算理論を構築した。本年、「京」コンピュータにおいて 1 億原子(100 ナノスケール)系の計算が達成された[2-4](図(a))。ここでは第一原理計算に基づくモデル化(TB 型)理論を用いている。

手法の特徴を活かした応用研究として、有機材料系に着目し、計算を行っている。目的は、大規模シミュレーションにより、有機材料系を「巨大π電子ネットワーク」として直接扱うことである。初期段階の計算例を図(b)(c)に示した。PFO10 量体(図(b))では、有限温度の熱揺らぎのため、理想的構造とは違った局在π電子波動関数が現れた。大規模計算例として、40nm 長のバンドル状 PPV 系(図(c))の有限温度計算も行った。



図：(a)「京」コンピュータによる 1 億原子(100 ナノスケール) 系計算の並列効率(強スケーリング性)ベンチマーク[4]。「京」全体(663,552CPU コア) まで、経過時間を測定した。計算系は sp2-sp3 ナノ複合カーボン固体[3]。(b) PFO10 量体有限温度計算における HOMO 軌道および 1 つ下の軌道。(c) バンドル状 PPV 系。長さは約 40nm。

[1] http://www.elses.jp/; http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/; ELSES = Extra-Large-Scale Electronic Structure calculation. [2] T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe, S.-L. Zhang, J. Phys.: Condens. Matter 24, 165502 (2012) [3] T. Hoshi, Y. Akiyama, T. Tanaka and T. Ohno, J. Phys. Soc. Jpn. 82, 023710 (2013) [4] T. Hoshi, K. Yamazaki, Y. Akiyama, JPS CP. 1, 016004 (2014)

© 2014 年　応用物理学会