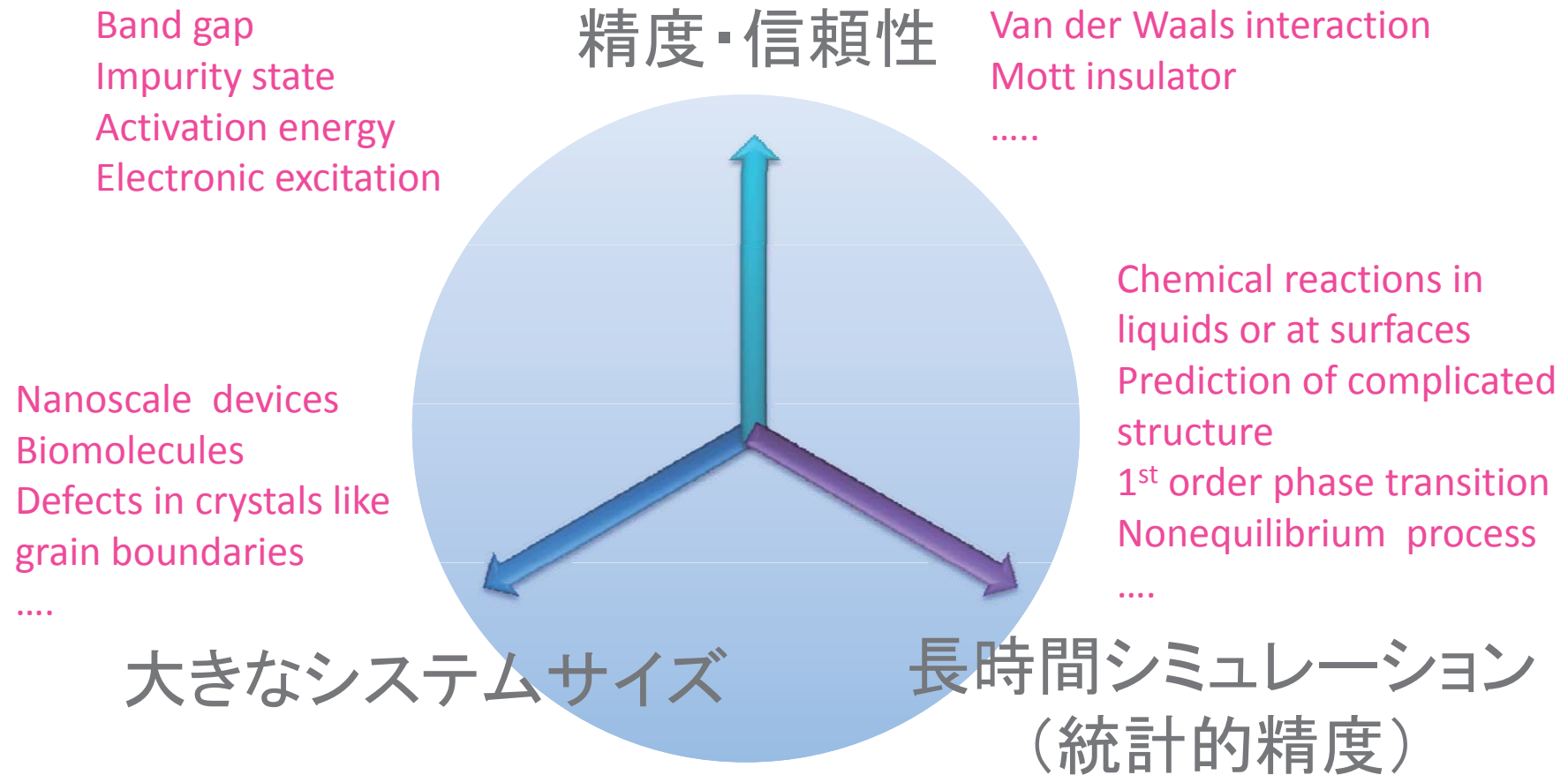


新学術領域研究(研究領域提案型)
『コンピューティクスによる物質デザイン:複合相関と非平衡ダイナミクス』
－ A02 密度汎関数法の新展開 －

第一原理分子動力学法による 構造サンプリングと非平衡ダイナミクス

計画班代表者 常行真司(東大・院理)

第一原理計算のグランドチャレンジ



「熱物理と非平衡ダイナミクス」

メンバー

- 研究代表者

常行真司(東大)

基本プログラムの高度化
熱伝導

- 研究分担者

吉本芳英(鳥取大)

基本プログラムの高度化・高速化
構造サンプリングと熱力学的相図

山内 淳(慶応大)

基本プログラムの高度化・高速化
半導体中の欠陥

大谷 実(産総研)

基本プログラムの高度化
電極反応

- 連携研究者

中山隆史(千葉大)

杉野 修(東大)

森川良忠(阪大)

赤木和人(東北大)

館山佳尚(物材機構)

諏訪雄二(日立基礎研)

合田義弘(東大)

森下徹也(産総研)

基本プログラム

平面波基底DFT

TAPP, xTAPP

分担者 吉本芳英(鳥取大・工)

構造サンプリングに必要な物

- 計算の経済性：性能／¥、性能／W
- 計算の精度：高コストな近似の実用化

アクセラレータの活用 稲葉班と連携



GRAPE-DR



NVIDIA Tesla

アクセラレータ活用の計画

計算科学と計算機科学の連携を实践

- Phase I

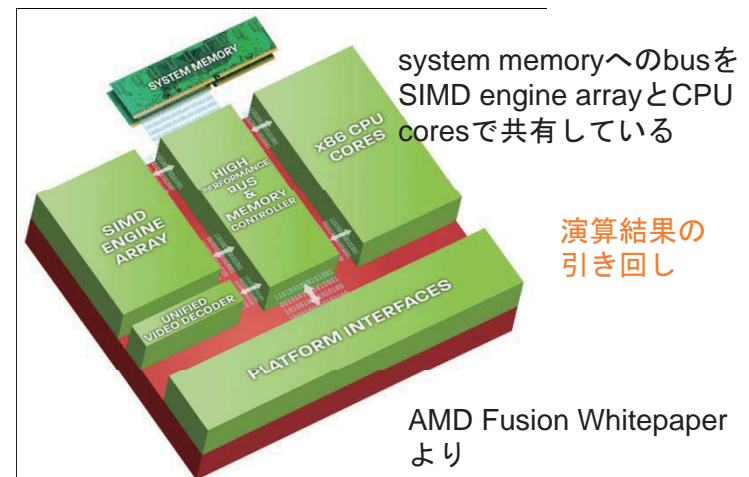
- 平面波基底の第一原理計算を対象
- 計算機科学側で開発された技術をとにかく活用
- 対話にはよくわかっているたたき台が必要

- Phase II

- 高度な計算(cRPA, Hybrid functional etc.)を対象
- 構造の評価には高度な計算が必要

非平衡ダイナミクス

- 可能な物理時間(step数)の拡大が必要
 - 単体第一原理計算のスケーリングの向上
(問題の大きさは固定、計算資源を変化)
- コンピューティングスへの期待
 - 部分空間対角化(iterative ?)
 - 通信の隠蔽
 - 高度なアクセラレータの活用



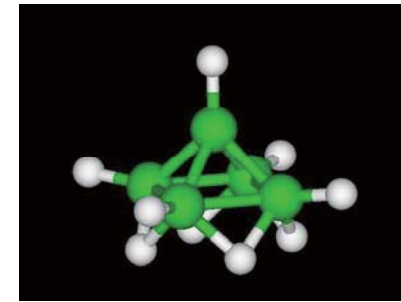
その他

- マルチカノニカル法の発展
 - 原子間ポテンシャルライブラリの整備
例：金属／炭素＋水素、ヘリウム(核融合炉の炉壁)
- 第一原理計算の自動化
 - 状態空間探索を幅広く行いたい
系の性質（金属、絶縁体...）が大幅に変化
 - 逐一、条件を手動で出すのは問題

「平面波プログラムの高速化」

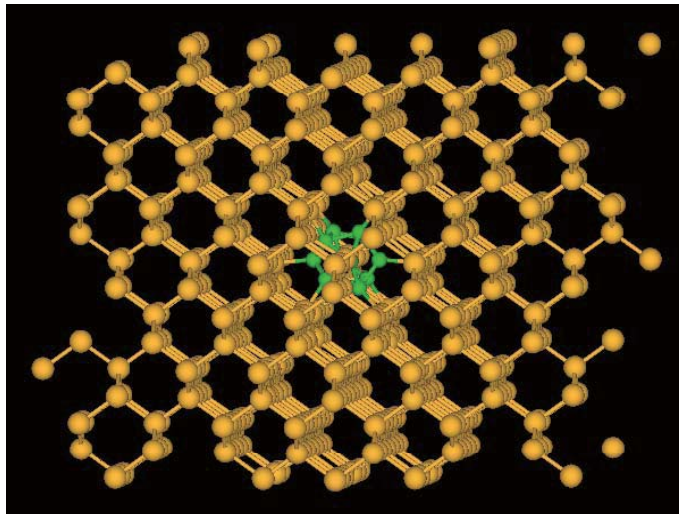
Codeの整備
Hybrid XC汎関数のImplement
PAW法のImplement
etc.

小・中規模系、
多数配置



Hardwareの効率的利用

- Multi-core/Multi-node
- GPGPU
- 次世代CPU (with GPU)



中・大規模系

分担者 大谷 実(産総研・ナノシステム)

より現実的な電気化学系の記述へ向けて... 有効遮蔽媒質(ESM)法の拡張

産業技術総合研究所ナノシステム研究部門
エネルギー材料シミュレーショングループ
大谷 実

- 平板電極モデルの拡張
- 微粒子電極上での反応の取り扱い

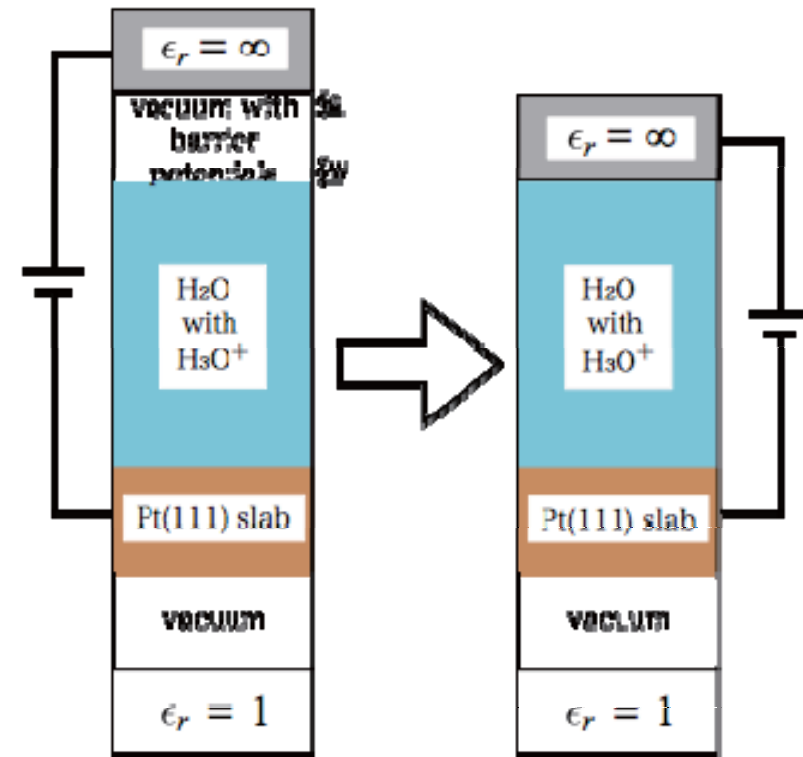
平板電極モデルの拡張

現在の問題点:

- ESMと水領域の間に真空とポテンシャルバリアが必要
- 真空領域での電圧効果によりポテンシャルの原点が定義できない

拡張:

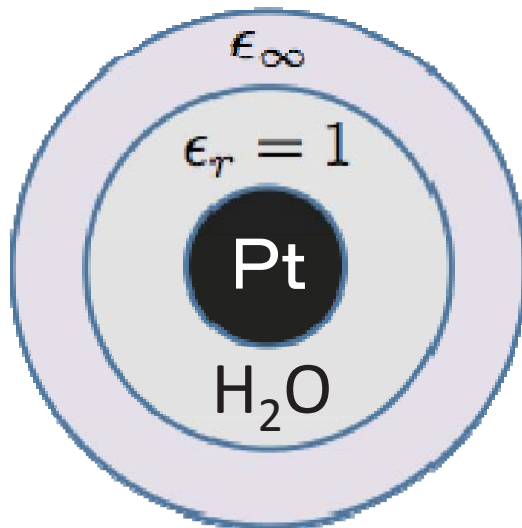
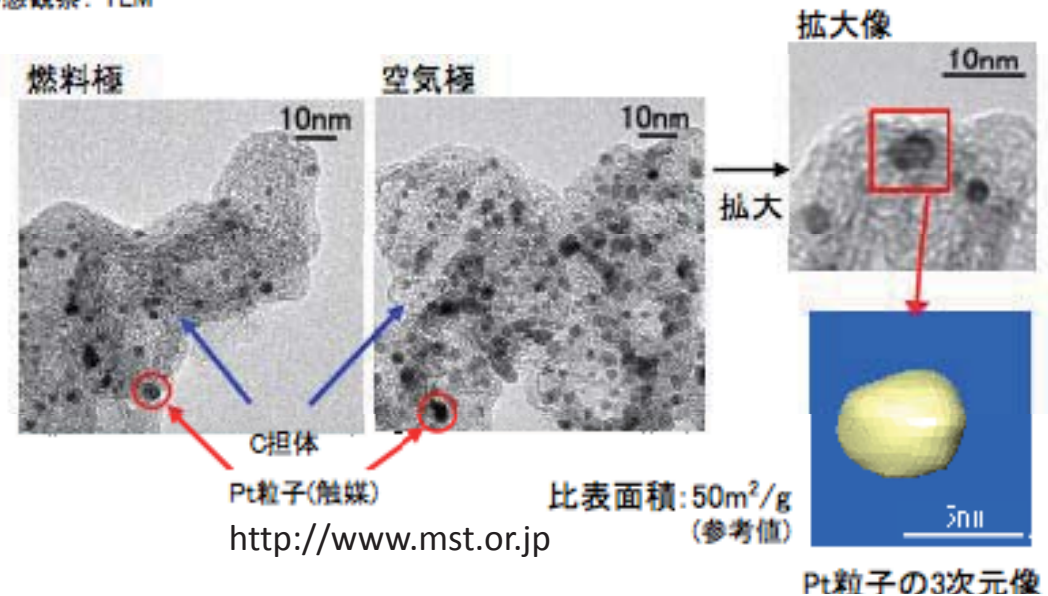
- 滑らかに誘電率が変化するESMを導入することにより真空領域の除去を行う



微粒子電極上での反応の取り扱い

- 実際の燃料電池では微粒子触媒が用いられる
- 様々なステップや面で反応が起こる
- より実験に近い環境でのシミュレーションが必要

■形態観察: TEM

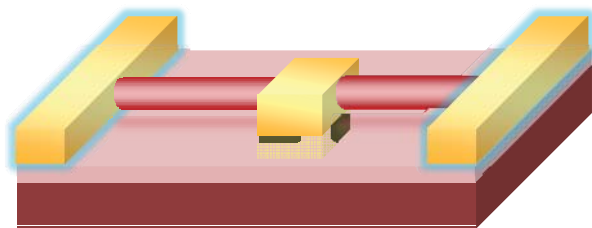


- Spherical ESMの導入
- クラスタに直接電圧を印可して反応をシミュレートする

第一原理に基づく熱伝導計算

- ナノデバイスの熱伝導

- 素子の微細化に伴い、熱安定性が問題に
- 表面や界面の効果(物性基礎としての興味も)

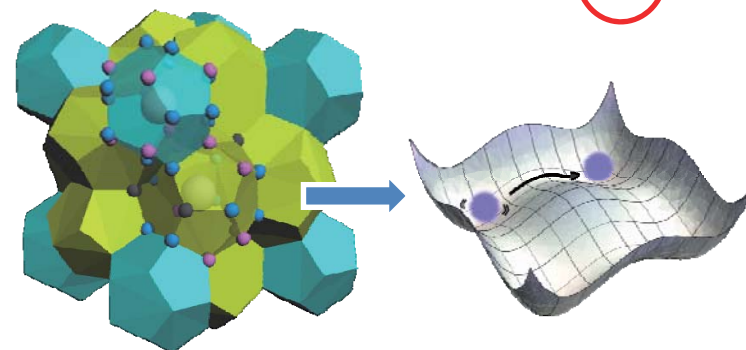


- 熱電材料

- 低熱伝導度の物質設計

無次元化
性能指数

$$ZT = \frac{\sigma S^2 T}{\kappa_c + \kappa_l}$$



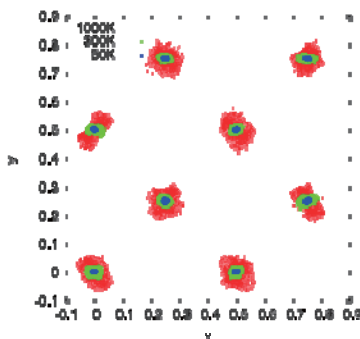
Type-I Clathrate

大規模系の長時間シミュレーションが必要
第一原理的な計算手法が確立されていない

第一原理に基づく非調和格子模型と 非平衡MDを用いた熱伝導計算

只野将央、合田義弘、常行真司

「短時間・小規模系」の第一原理MD計算



第一原理MDの高速化

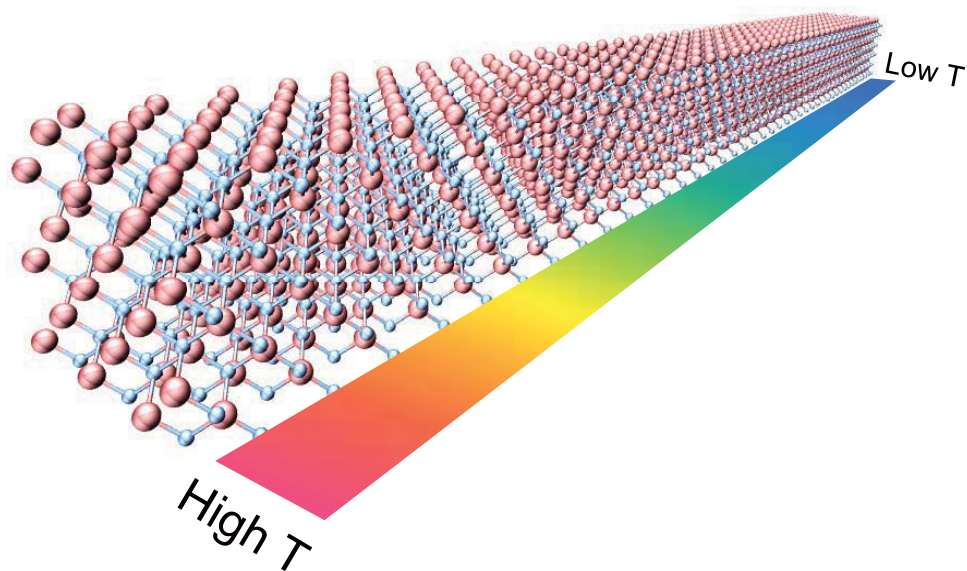
モデル化の一般的手法開発

非調和原子間相互作用有効模型 (格子系の例)

$$V_m(\{x_i\}) = \sum_{ij} \frac{1}{2} \Phi_{ij} x_i x_j + \sum_{ijk} \frac{1}{3!} \Phi_{ijk} x_i x_j x_k + \dots$$

非平衡MDの高度実装

大規模系の非平衡古典MDによる
長時間シミュレーションと統計サンプリング



目標:

- ・ナノ構造体や新材料の熱科学の解明
- ・原子間相互作用の非調和性が本質的に重要となる大きな原子変位を伴う非平衡物理現象の予測

たとえば表面や界面を持つナノ構造体の熱伝導度計算が可能に!

第一原理に基づく非調和格子模型

Esfarjani and Stokes, Phys. Rev. B, 2008

$$V_m(\{x_i\}) = \sum_{ij} \frac{1}{2} \Phi_{ij} x_i x_j + \sum_{ijk} \frac{1}{3!} \Phi_{ijk} x_i x_j x_k + \dots$$

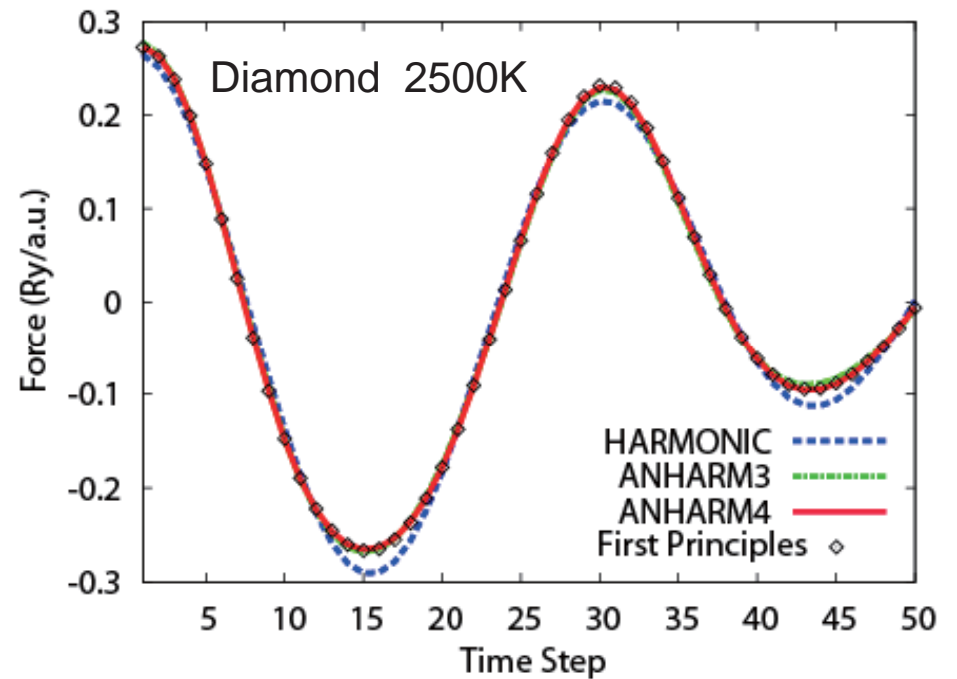
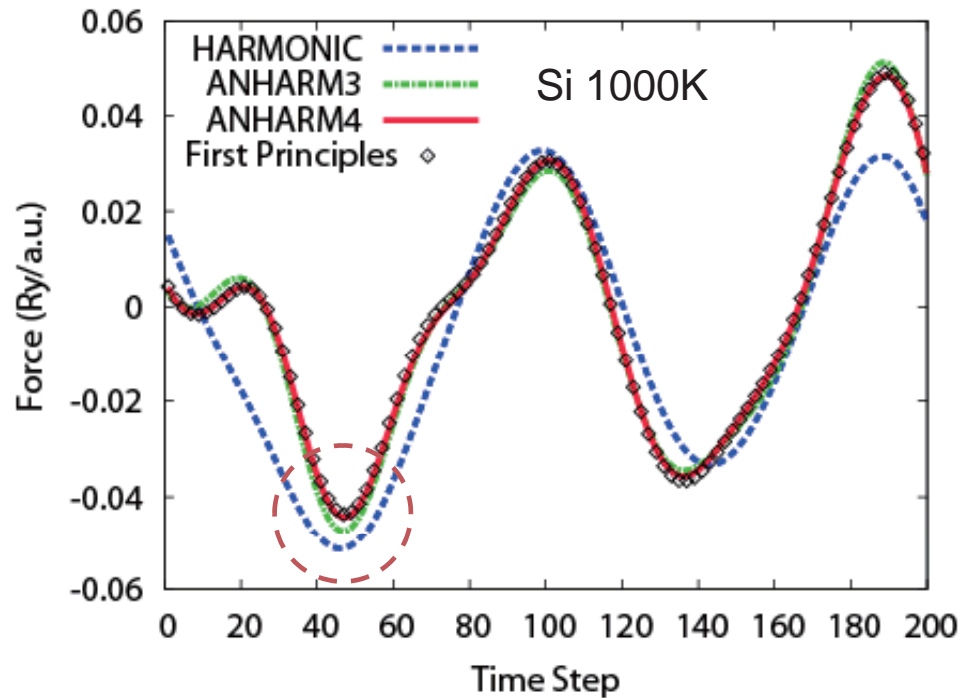
第一原理分子動力学法で計算された原子配置 $x_i(t)$ と力 $F_i(t)$ を使い、対称性の制限のもとで、力の誤差を最小化してモデルパラメータ Φ を決定する。【条件付き線形最小2乗法】

$$\chi^2 = \sum_t \sum_i \left[F_i(t) - \left(-\frac{\partial V_m}{\partial x_i(t)} \right) \right]^2$$

第一原理計算の力

非調和格子模型の力

Model vs. First-Principles MD

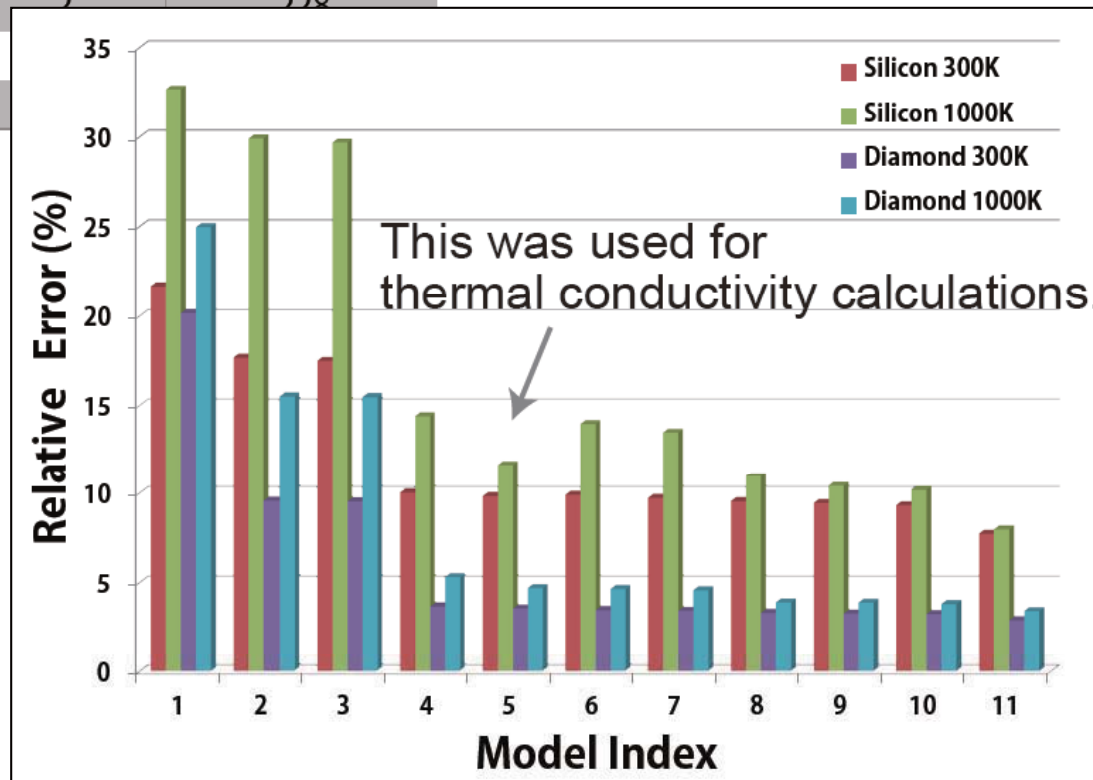


T. Tadano, Y. Gohda, S. Tsuneyuki, in preparation.

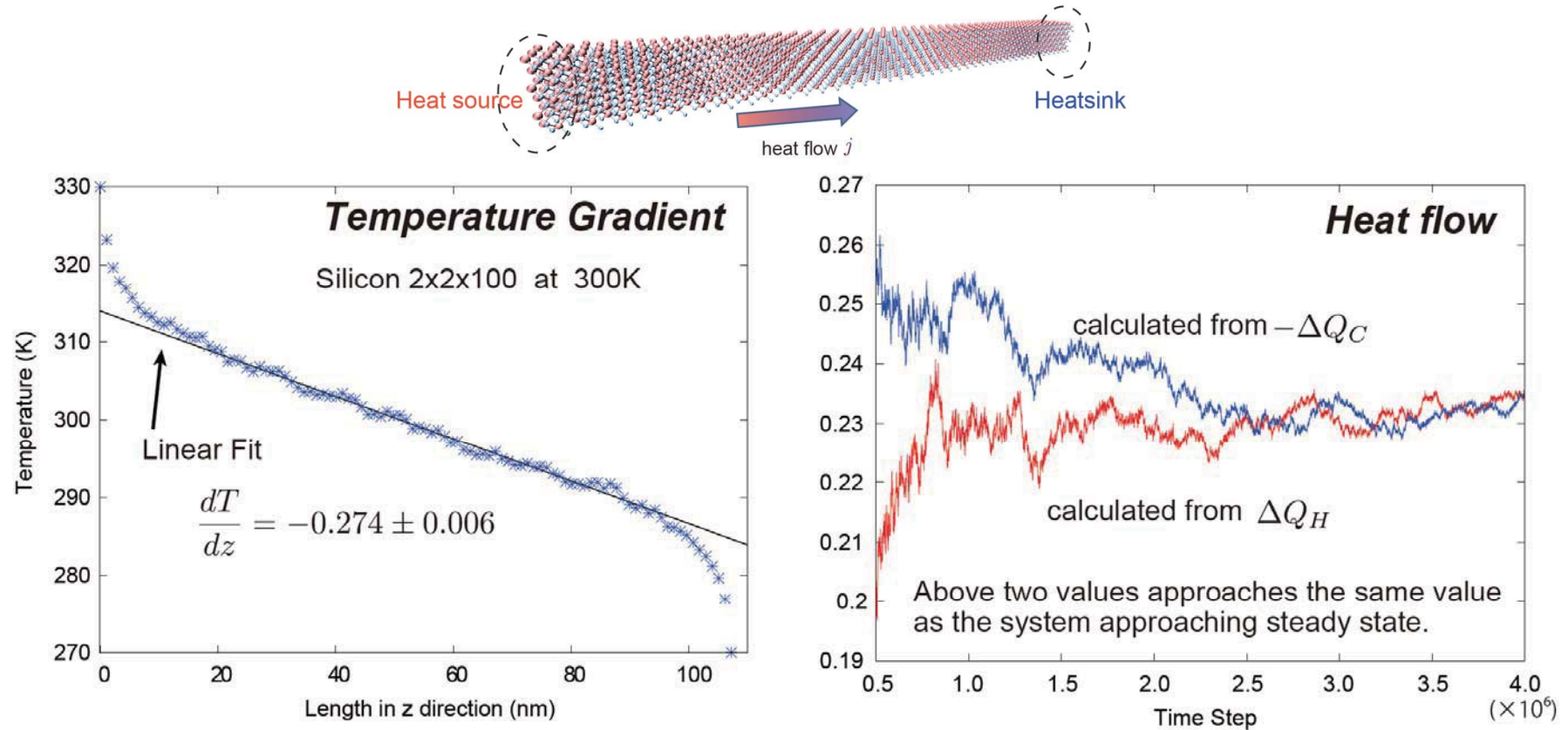
Model Index	HARMONIC	ANHARM3	ANHARM4	Number of IFCs
1	1	-	-	3
2	2	-	-	7
3	3	-	-	11
4	3	1	-	16
5	3	1	1	30
6	3	2	-	50
7	3	3	-	112
8	3	3	1	126
9	3	2	2	228
10	3	3		
11	3	3		

Model Types and Number of Parameters

Relative Error for Each Model



Non-Equilibrium Molecular Dynamics



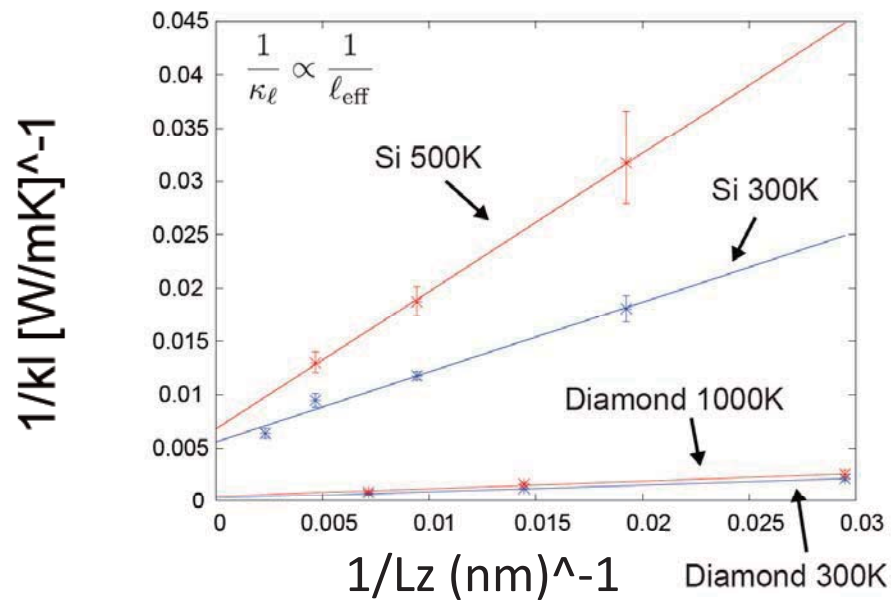
$$\kappa = -j / \frac{dT}{dz} \quad \text{where}$$

$$j = \frac{\sum_t^n [\Delta Q_H(t) - \Delta Q_C(t)]}{2nA\Delta t}$$

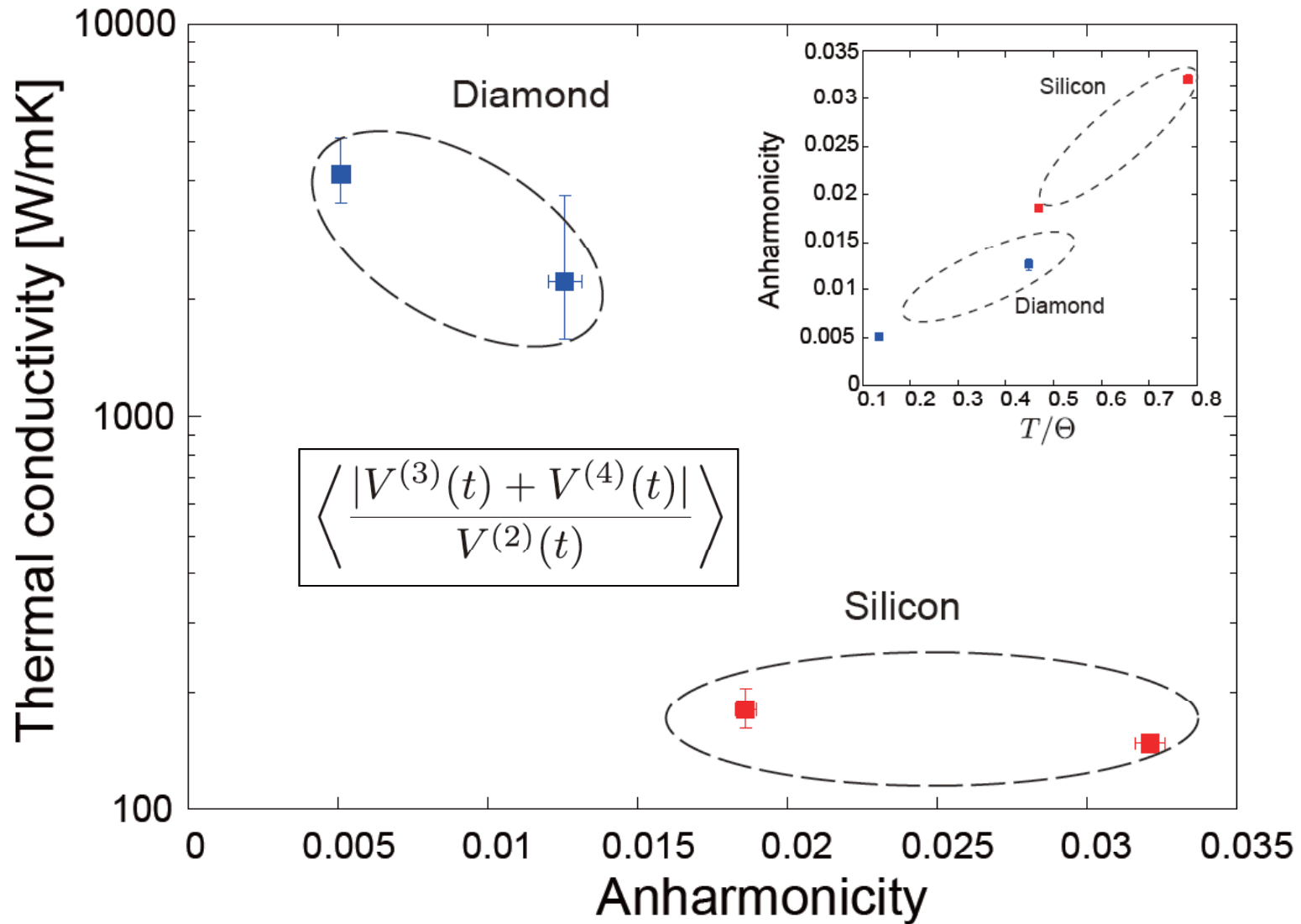
Estimated Thermal Conductivity [W/mK]

		This work	Preceding study [4] (SW and Tersoff)	Experiment [2],[3]
Si	300K	179 ± 24	N/A	200
	500K	147 ± 8	119 ± 40	120
Diamond	300K	4100 ± 1000	N/A	3000
	1000K	2200 ± 1500	573 ± 60	400

[2] W. S. Capinski et al., Appl. Phys. Lett. (1997). [3] L. Wei et al., Phys. Rev. Lett. (1993). [4] P. K. Schelling et al., Phys. Rev. B (2002).

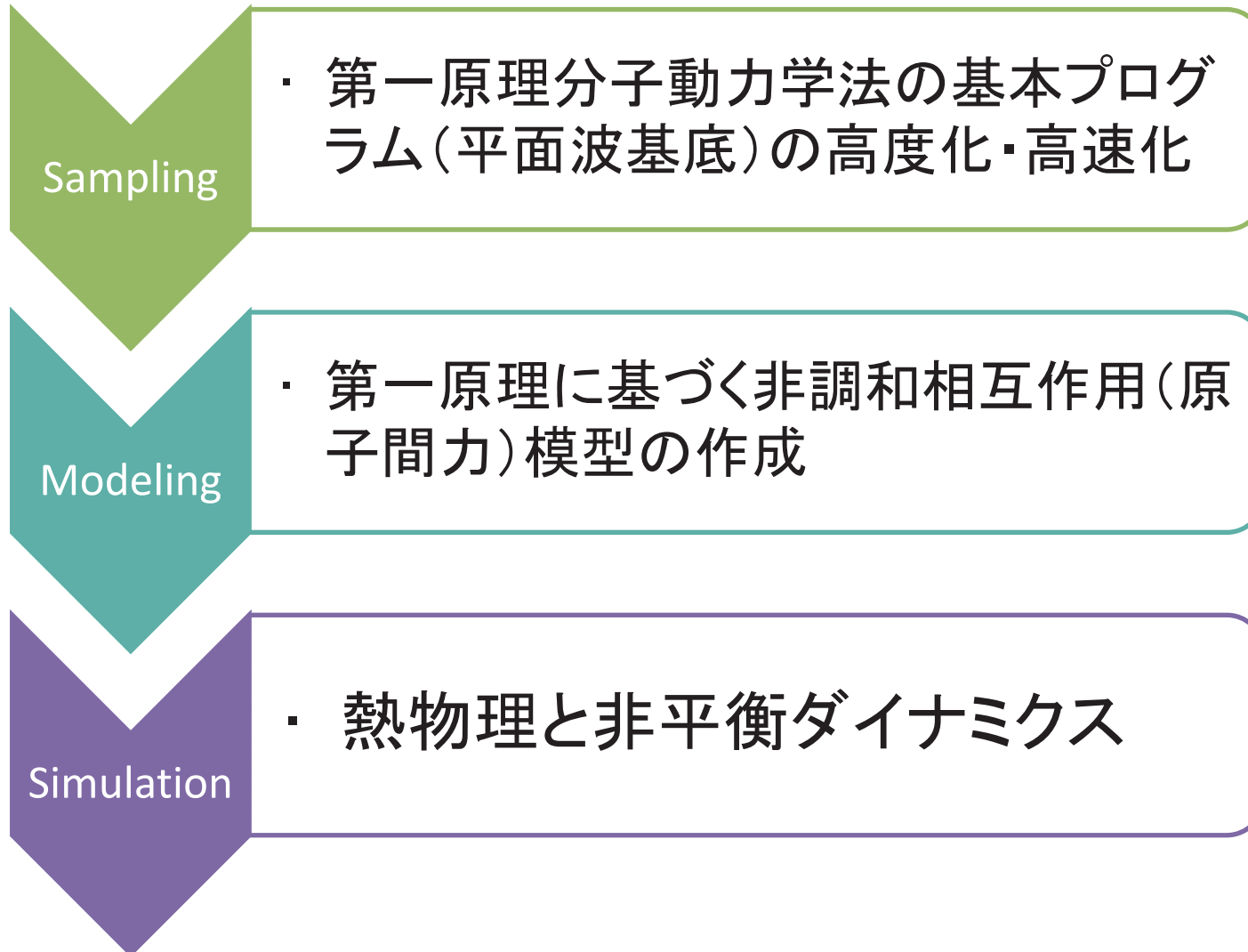


Thermal Conductivity vs Anharmonicity



常行班：まとめ

連携の可能性



A01
稲葉班
高橋班
張班

A02
押山班

A02
渡邊班
中西班