

## 超並列計算機向け大規模第一原理電子状態計算プログラム RSDFT の開発

### 成果のポイント

- ・超並列計算機を駆使した第一原理電子状態計算プログラム”RSDFT”を開発
- ・世界最大の規模である一万数千原子を越える系の電子構造シミュレーションを達成
- ・次世代スパコンによる第一原理半導体デバイスシミュレーションの道を拓く

### 概要

筑波大学計算科学研究センターの岩田潤一助教らの研究グループは、超並列計算機向けの大規模電子状態計算プログラム RSDFT (Real-Space Density-Functional Theory) の開発をし、本学計算科学研究センターの PACS-CS を用いて量子力学の基本原理のみに立脚した物質中電子シミュレーションの計算規模を従来の 10 倍～100 倍にすることを世界ではじめて可能にしました。これによって半導体デバイスに代表されるナノメートルサイズの現象をありのままに調べることが可能となります。

量子力学の基本原理以外の仮定を一切置かず、電子の運動を正確に取り扱って物質の振舞いを計算機上で予測する研究手法を“第一原理計算”あるいは“第一原理シミュレーション”と呼びます。これは 1998 年にノーベル賞を受賞した W. Kohn 博士らによる密度汎関数理論に基づく計算科学的アプローチであり、実験値と合わせる調整パラメータ等がないため物性予測の信頼性が高いものです。従来、第一原理シミュレーションが実行可能なサイズは原子数にして数百個程度でしたが、近年急速に発展しているスーパーコンピュータの性能を十分に引き出すプログラム開発を今回新たに行い、これによって扱える原子数を一気に数千～一万数千原子程度にまで引き上げることができました。扱える原子数が飛躍的に増えたことにより、これまで主に「現実の一部分を切り出した小さいモデル」に対して行われていた第一原理シミュレーションを「現実の物質系そのまま」に対して実行する道が拓けてきました。開発した RSDFT プログラムを用いて、次世代半導体デバイス材料として有望視されているシリコンナノドットおよびシリコンナノワイヤの電子状態に関する第一原理シミュレーションを実行しました。ナノメートルというサイズは実際にデバイスとして応用されるときサイズであり、原子数にして一万個を越えるシステムになります。計算は筑波大学計算科学研究センターの超並列計算機 PACS-CS を利用し、CPU1000 台以上による大規模並列計算を約 300 時間かけて行いました。今回の計算は、最先端のスーパーコンピュータを駆使することにより世界で初めて原子数一万を越える超大規模系の第一原理シミュレーションを達成し、さらに次世代スーパーコンピュータが利用できるようになれば実際の半導体デバイスサイズの第一原理シミュレーションが可能となることを示すものである。

## 背景

密度汎関数理論に基づく物質の量子力学的第一原理シミュレーションは、比較的少ない計算量（システムサイズの3乗に比例）で定量性のある物性予測を可能にし、またその非経験的性格（ノンパラメータ）から未知物質の物性予測にも大きな力を発揮し、物性物理・化学の分野はもちろん、産業界における材料開発の現場においても用いられるほど重要なツールとなっています。

計算量が比較的少ないといえども量子力学の第一原理以外の仮定を置かない手法であるために、他の「より近似を進めた手法」や「実験パラメータを含む手法」等と比べると扱えるシステムサイズは比較的小さく、原子数にして数百～一千個程度の系が限界であると思われていました。そのような背景に伴い、より大きな系を扱うためにはまた別の計算理論（オーダーN法と呼ばれる）が必要になるだろうという考えも生まれ、現在そのような理論面からの研究も活発に行われています。

## 研究手法と成果

### (1) 超並列型計算機向け第一原理シミュレーションプログラム “RSDFT”の開発

従来の第一原理計算プログラムは平面波展開を利用するものがほとんどで、その計算には高速フーリエ変換（FFT）が必要不可欠ですが、FFTは並列計算が非常に困難であることが知られています。そこで実空間法というFFTを必要としない定式化に基づくプログラムを新たに開発し、これによって超並列第一原理計算を可能にしました。またシステムサイズの3乗に比例する演算部分にLevel 3 BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms)を積極利用するアルゴリズムを開発し、これによって計算機のピーク性能に近い速さで演算を実行することを可能にしました。

本プログラムの開発において、計算物性の研究者のみならず、計算機科学および情報科学の研究者という分野横断的な共同研究が行われたという点も特筆すべき事です。

### (2) 世界最大規模、一万原子超のシリコンナノ構造に対する第一原理電子状態計算を達成

開発したRSDFTプログラムを用いて、次世代の半導体デバイス材料として有望視されているシリコンナノドットおよびシリコンナノワイヤの電子状態に関する第一原理シミュレーションを行いました。ともに原子数一万を越える、これまで第一原理シミュレーションで扱われた系の中では世界最大規模であり、現実のデバイス応用に供される際のサイズをほとんどそのまま扱えることを実証しました。計算は筑波大学計算科学研究センターの超並列計算機PACS-CSを1000ノード用いて行い、一つの計算につき100時間～300時間を要しました。

## 今後の展開

RSDFTによる超並列計算により、第一原理シミュレーションで扱える原子数が飛躍的に増えたことにより、次世代半導体デバイス材料として期待されているシリコンナノ構造体について、現実のサイズそのままを調べることができるようになりました。さらに次世代スパコンが利用できるようになれば、現実の様々な状況をよりリアルにシミュレーションすることができるようになり、次世代デバイス開発の大きな指針作成につながると期待されます。

本成果は、Journal of Computational Physics 誌のオンライン版に掲載されるとともに、3月20日発行の第229巻6号に掲載予定です。

研究に関する問合せ先

筑波大学大学院数理物質科学研究科・計算科学研究センター

岩田 潤一 助教

## 用語解説

1 ナノメートル： 1 m の 10 億分の 1 の長さ。

量子力学： 電子のようなミクロな粒子の運動を記述する基礎法則

第一原理シミュレーション： 量子力学の基礎原理を認める以外一切の仮定やパラメータを持ち込まないで行う計算科学的物性研究手法

密度汎関数理論： 第一原理シミュレーションを実際に数値計算する際の基礎理論。1998 年にノーベル賞を受賞した W. Kohn 博士らが提案した理論。

BLAS： Basic Linear Algebra Subprograms の略。数値計算でよく現われる行列・ベクトル演算をライブラリ化したもので、計算機ごとにチューニングされたものが用意されている。演算のタイプに応じて Level 1～Level 3 まであり、Level が上がるほど演算性能が高まる。

PACS-CS： Parallel Array Computer System for Computational Sciences の略。筑波大学計算科学研究センターにある、計算科学における大規模シミュレーションの効率的実行を目指した新しいコンセプトの超並列 PC クラスタ。

(システム)

ノード台数：2560

CPU：Intel LV Xeon EM64T 2.8GHz, 1MB L2 cache

メモリ：2 GB/ノード

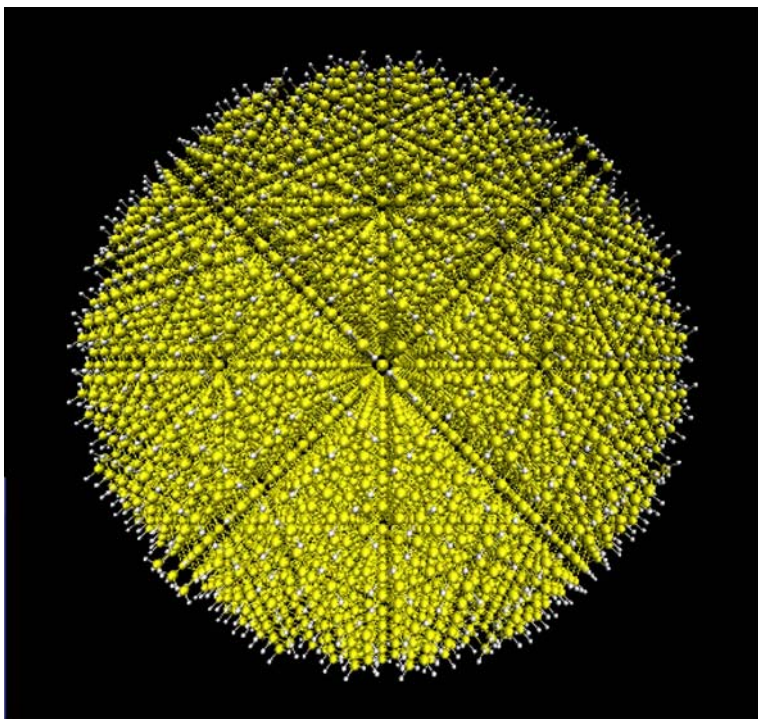
ネットワーク：3次元ハイパークロスバー網

リンクバンド幅：単方向 250 MB/s ～ 750 MB/s (3次元同時転送時)

理論ピーク性能：14.3 TFLOPS

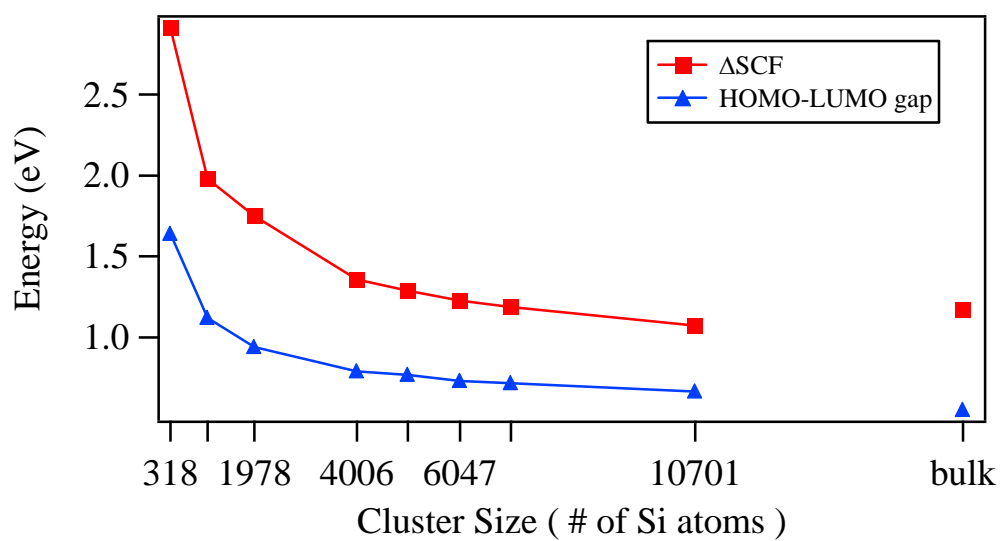
参考図1

シリコンナノドット(Si10701H1996)の原子構造。



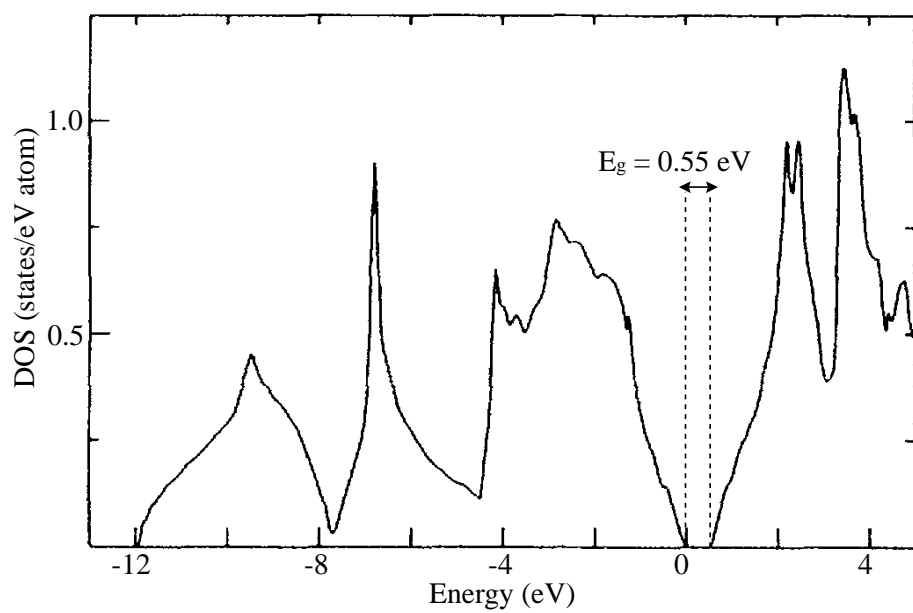
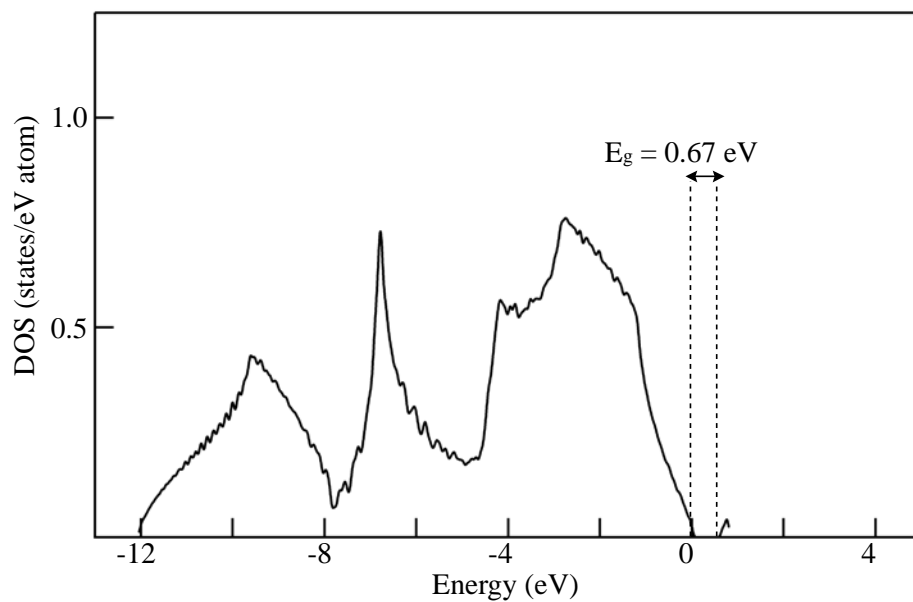
参考図2

シリコンナノドットのバンドギャップ (サイズ依存性)



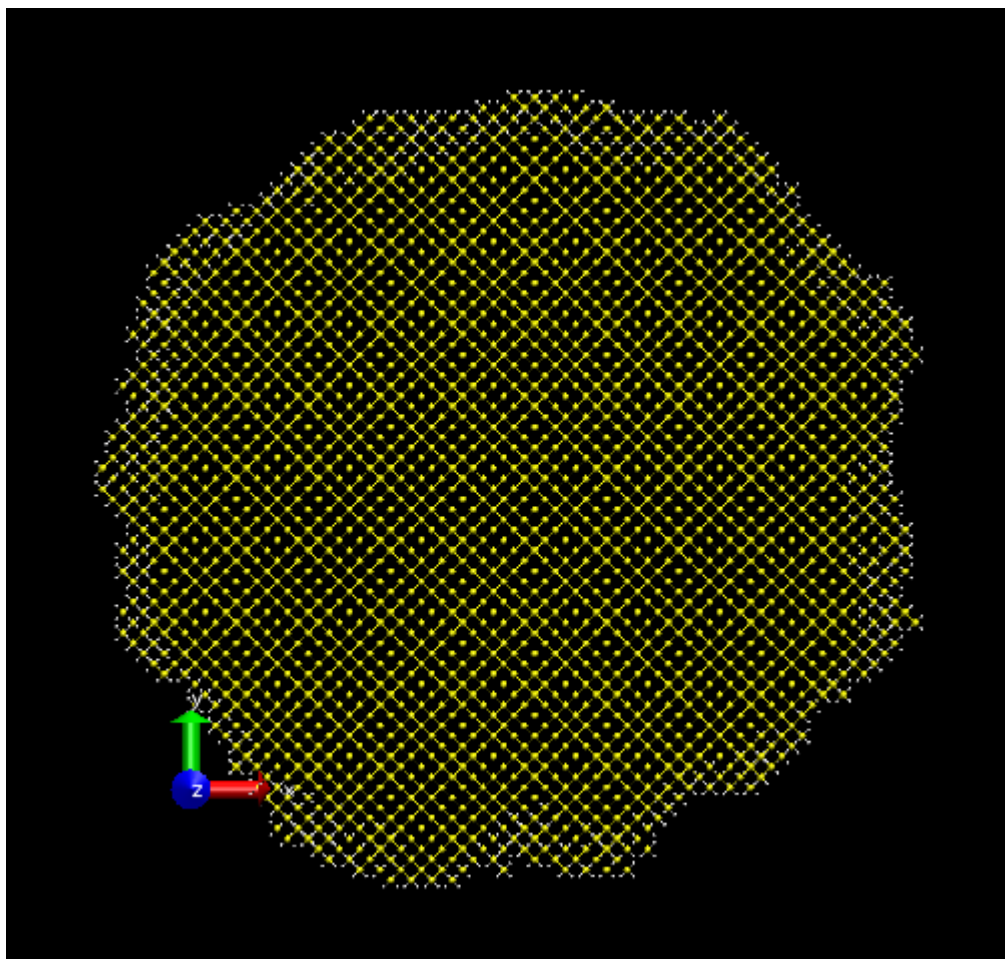
### 参考図3

長シリコンナノドット（上図）とバルクシリコン（下図）の状態密度。



#### 参考図4

表面に乱れのあるシリコンナノワイヤの原子構造（断面図）。平均直径は 10nm。



### 参考図5

表面乱れのあるシリコンナノワイヤの電子状態密度。

