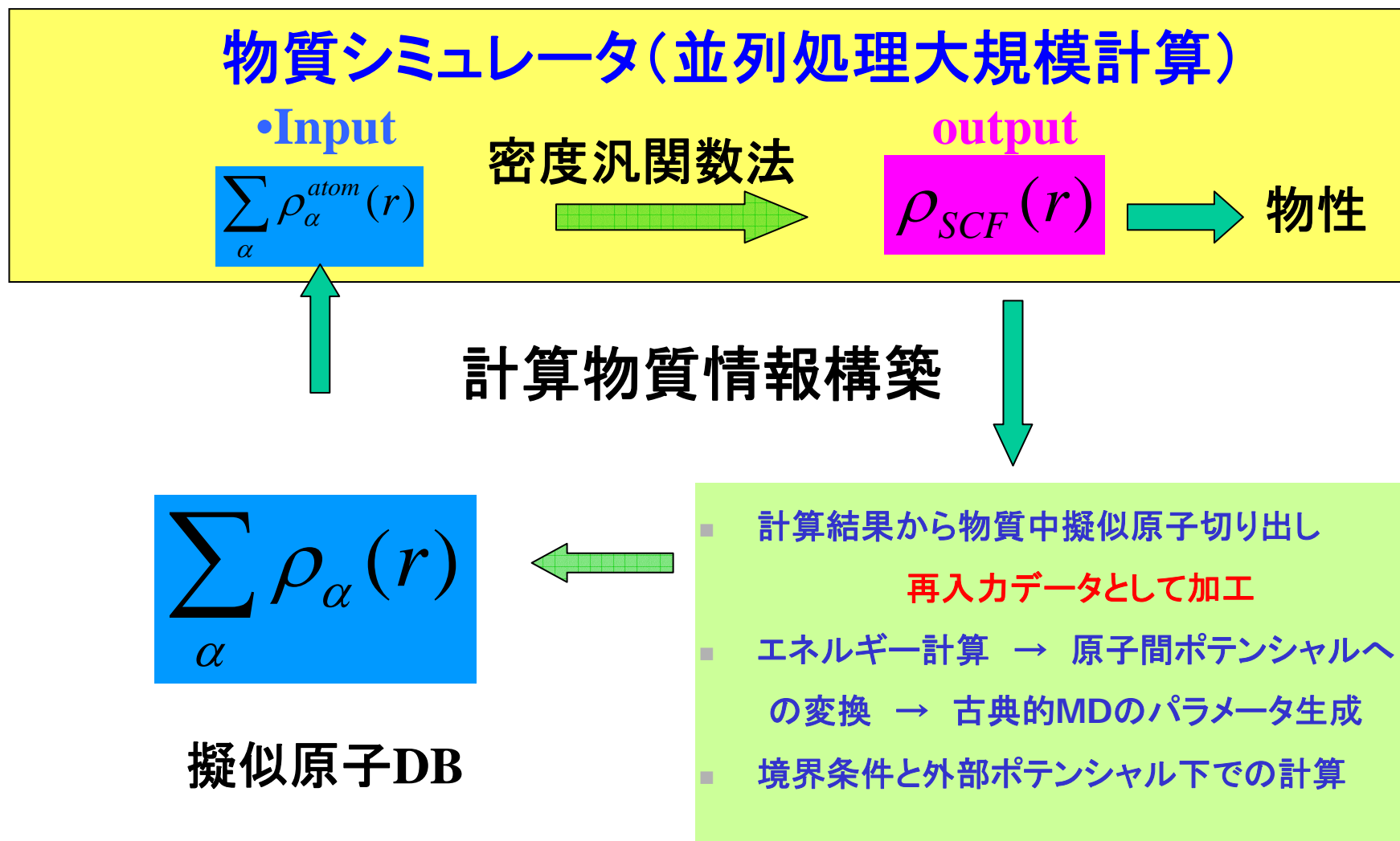


計算材料科学のための物質情報 構築法の開発

CAMPグループ

大西 檜平(NEC)

計算材料科学のための物質情報構築法



3年間のプロジェクト:最終年

次年度計画(2004) → 今年度成果(2005)

◆非周期系LCAO-PSプログラム

擬原子のデータベース構築継続

1次DB → 2次KB

◆周期系プログラム
CAMP-ATAMIの移植

連携動作および
並列化の効率改善

(1)擬似原子の取り出し

とその電子状態計算

(2)エネルギーから

原子間ポテンシャルの取り出し

先端大型設備戦略活用プログラム
へ移行

Poisson Equation in LCAO-PS 法

$$\rho_{SCF}(r) \Rightarrow \sum_{\alpha} \rho_{\alpha}(r) \quad \rho_{\alpha}(r) \equiv \omega_{\alpha}(r) \rho_{SCF}(r)$$

DO $i=1, \alpha$

$$\rho_{\alpha}(r) = \sum_{\lambda m}^{\lambda_{\max}} \rho^{\alpha}_{\lambda m}(|r|) Y_{\lambda m}(r) \quad \leftarrow \text{Numerical Expansion } l_{\max}=8$$



MPI

$$V_{ext}^{\alpha}(r) = \sum_{\lambda m}^{\lambda_{\max}} V^{\alpha}_{\lambda m}(|r|) Y_{\lambda m}(r) \quad \text{External Potential for } \alpha \text{ site}$$

$$V^{\alpha}_{\lambda m}(|r|) = \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \frac{4\pi}{2\lambda+1} \left[\sum_{m=-\lambda}^{\lambda} \int \frac{r_{<}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} \rho^{\beta}_{\lambda m}(r') dr' \right] Y_{\lambda m}(r)$$

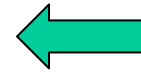
End do

$$V_C(\rho) = \sum_{\alpha} V_{\alpha}(\rho_{\alpha})$$

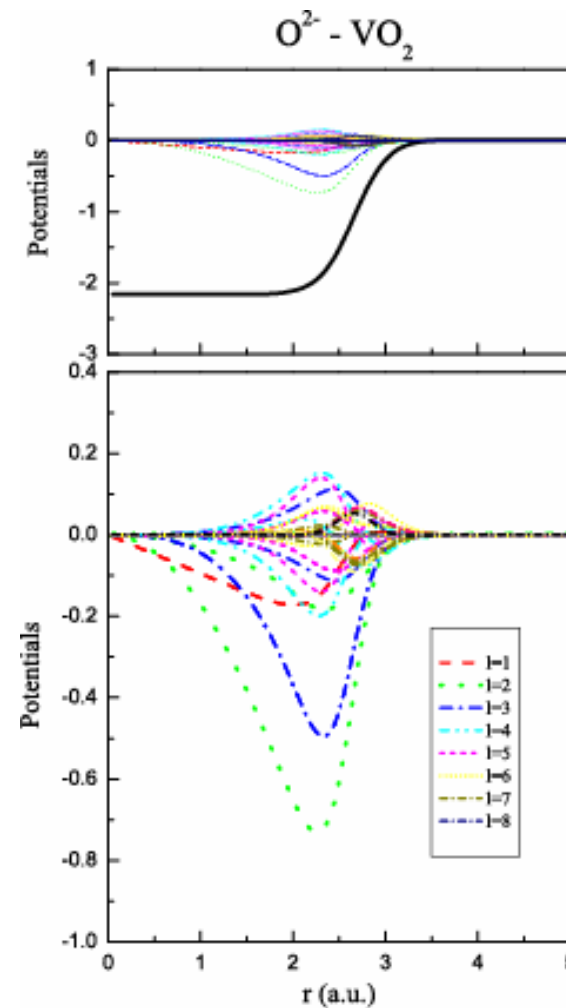
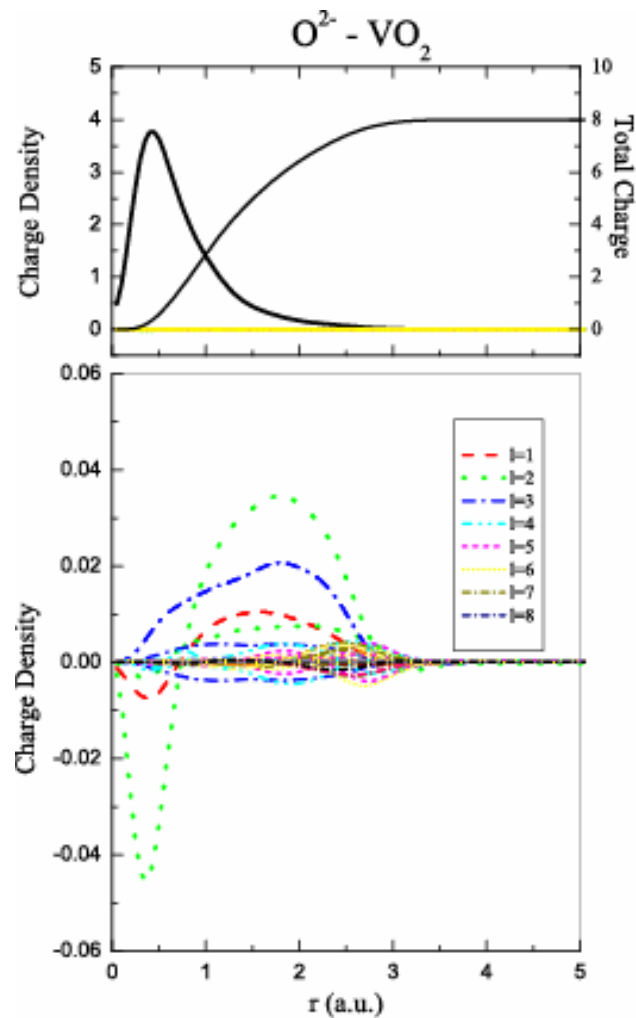
$O(N) \rightarrow O(1)$ MPI通信のみ : 約20秒

O^{2-} in $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$

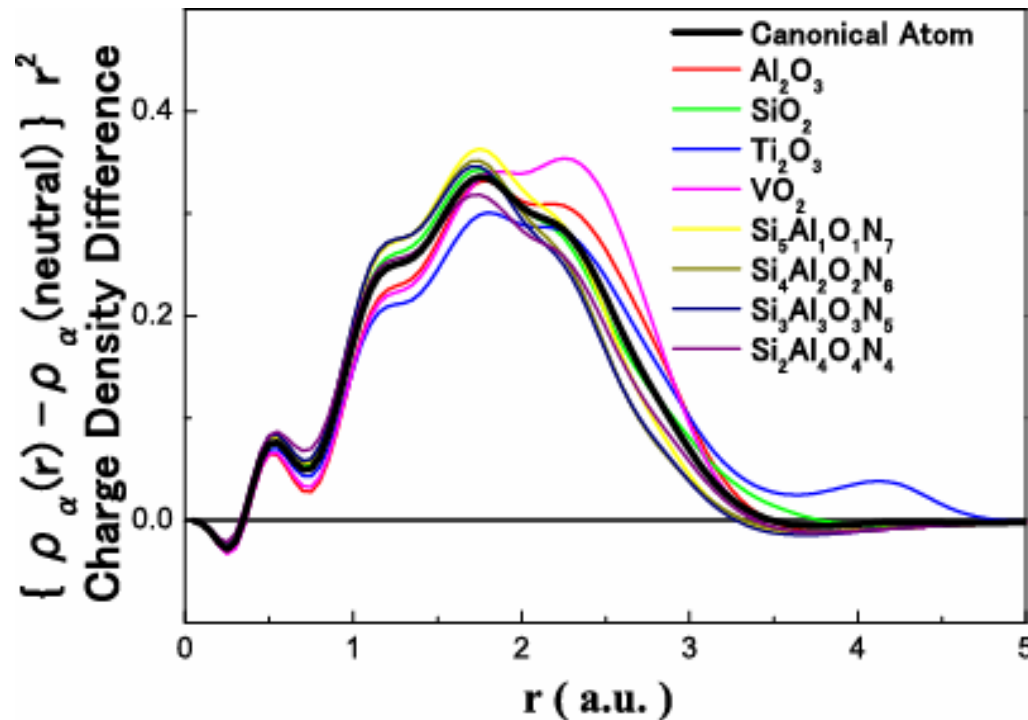
非球対称ポテンシャル中の
 O^{2-} の固有値問題



Mixed basis calculation
LCAO-PS+Plane Wave



擬似原子の例 O^{2-} in Oxides



Self-consistently
Determined

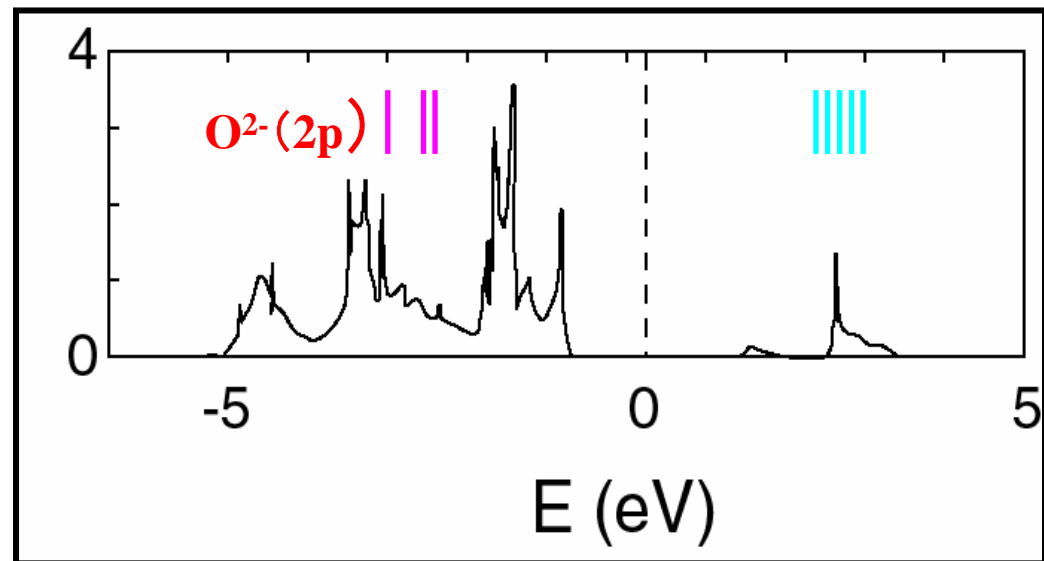
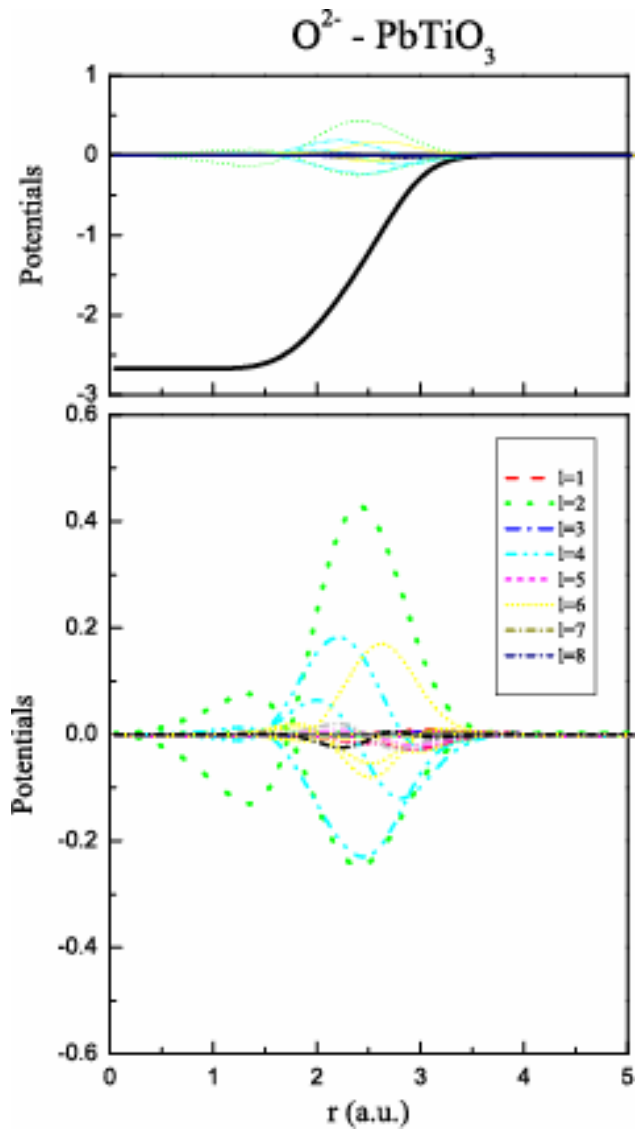
$$\rho_\alpha(r)$$

in Various Structures

結晶中の球対称 O^{2-} 動径方向の分布

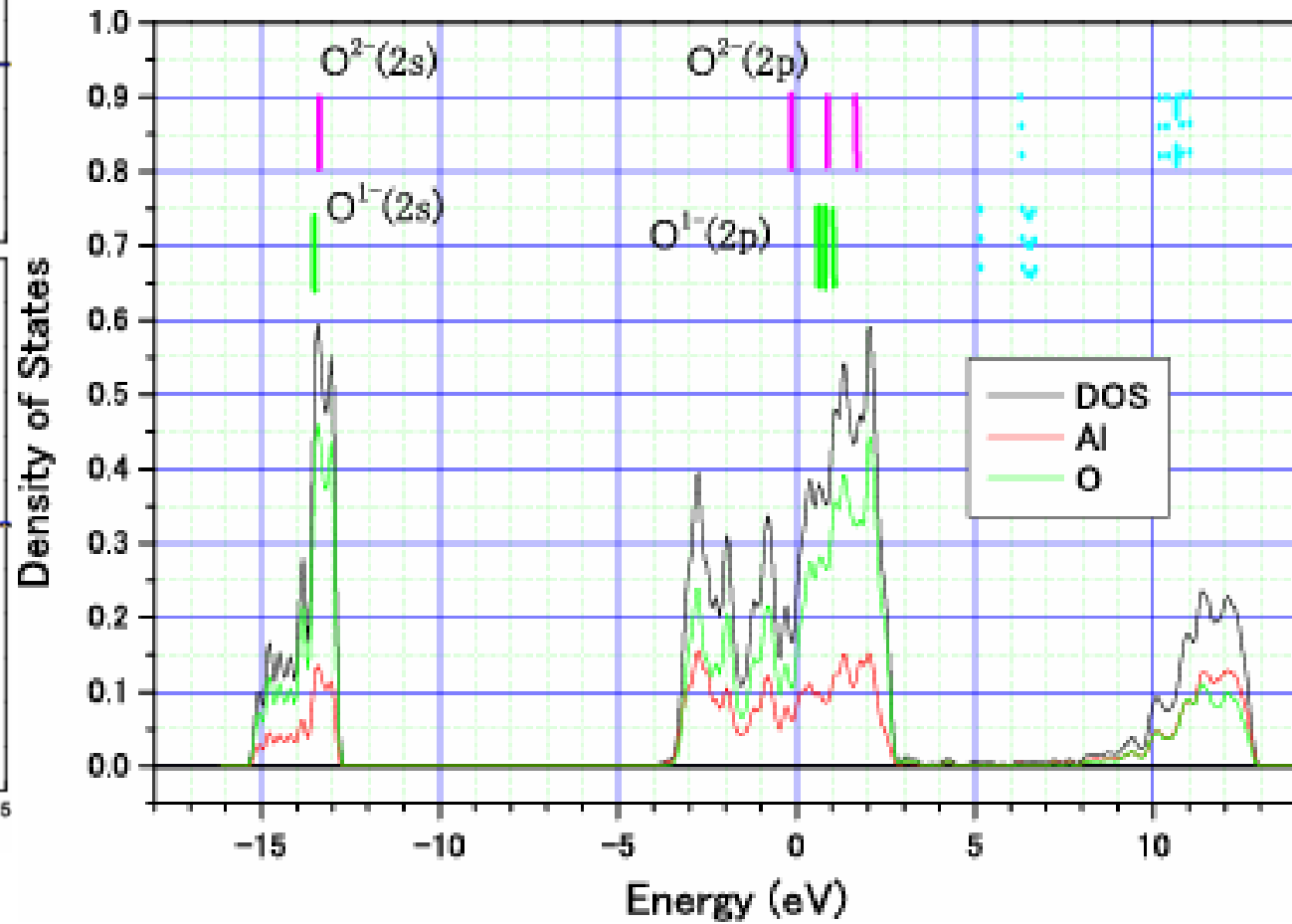
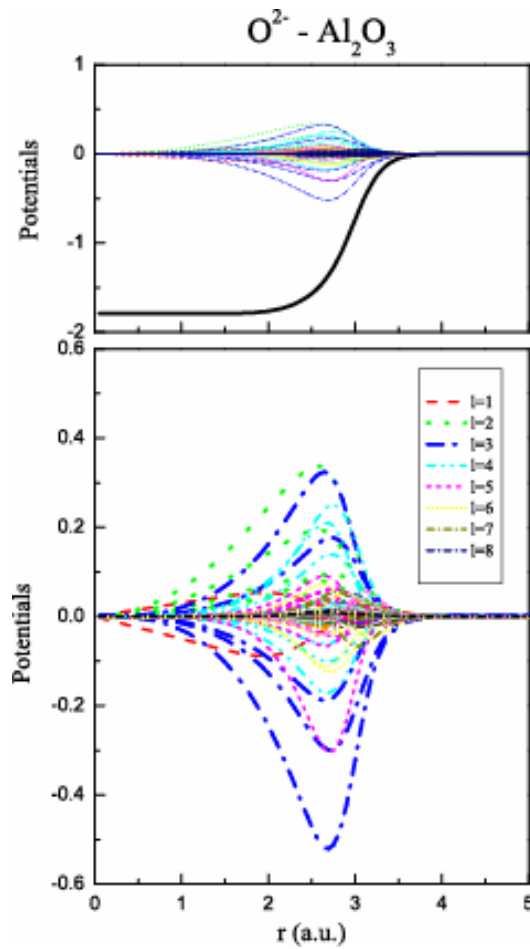
$V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ の影響？

PbTiO₃





$$E(\text{O}^{2-}) < E(\text{O}^{1-}) \quad \Delta E = 2.3 \text{Hr}$$



逆問題

- 第一原理計算 $\rightarrow E_b(r) \rightarrow$ 原子間ポテンシャル

メビウス変換

$$F(x) = \sum_{n=1} f(nx) \Rightarrow f(x) = \sum_{n=1} \mu(n) F(nx)$$

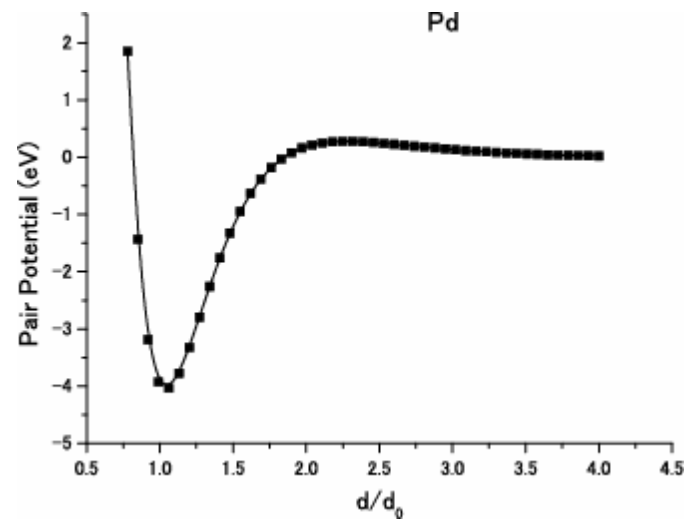
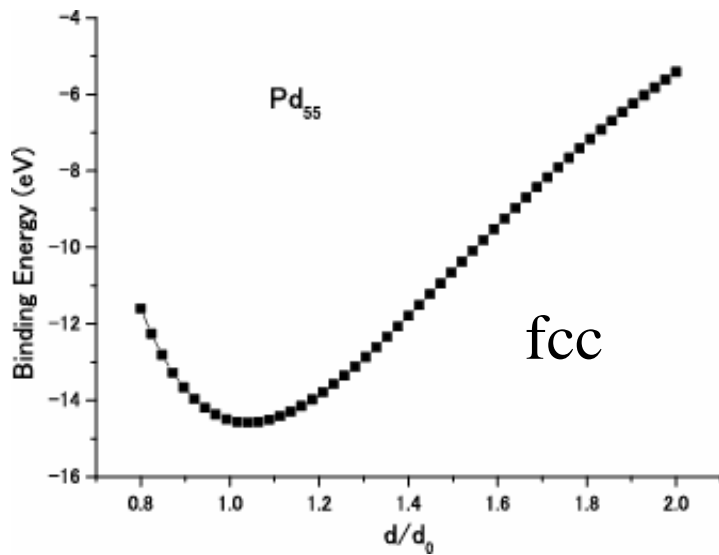
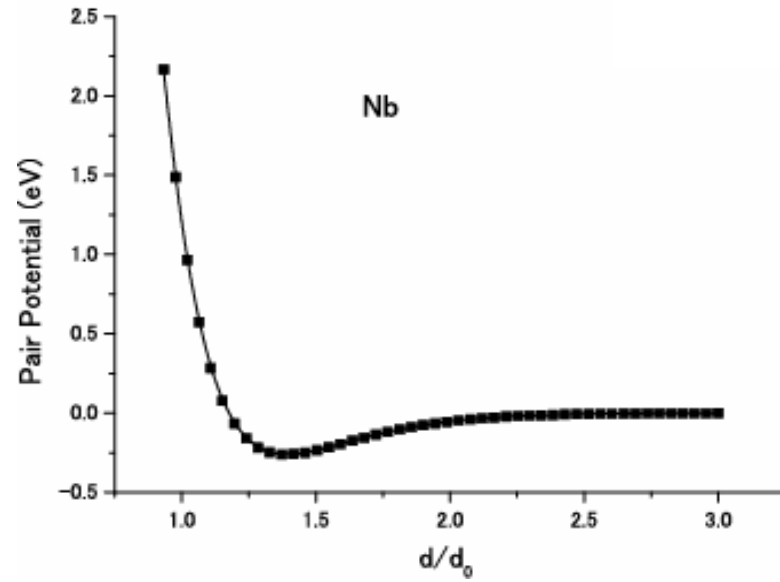
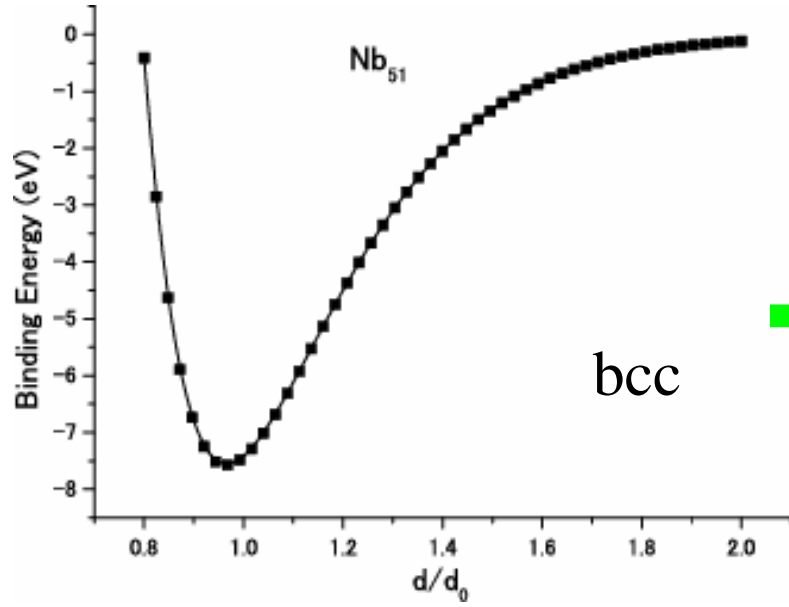
$$\mu(n) \equiv \begin{cases} 1 & n = 1 \\ 0 & n \neq p^2 \\ (-1)^k & n = p_1 \times \dots \times p_k \end{cases} \quad p \equiv \text{prime}$$

変形メビウス変換(3次元格子)

$$E_b(r) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq 0} \Phi\left(\left| \begin{smallmatrix} 0 \\ R_\alpha \end{smallmatrix} \right|\right) = \sum_{n=1} \omega(n) \Phi(\sqrt{n}r)$$

$$\Phi(r) = \sum_{n=1} \mu(n) E_b(\sqrt{n}r)$$

$$\sum_{n|k} \omega(n) \mu(k/n) = \delta_{1k}$$



計算物質情報構築

- 大規模シミュレーション: 計算機実験

ナノメタルクラスター: Pt, Au, Pd, Ni, Mo, Fe, Nb, Ti, V.....

- 計算結果からのデータベースの取り出し

1次データベース → 電子電荷分布密度の再構築
クラスターの結合エネルギー

2次データベース → 知識ベース

擬似原子: atom in materials

ポテンシャル関数: 2体間相互作用

プロジェクトのまとめ

◆ 目的

- (1) 計算材料科学の知見情報として利用可能な形での蓄積
- (2) 知見情報として利用可能な情報のためのシステム開発
- (3) 材料計算に関する知識ベースによる計算情報の公開

◆ 結果

- (1) LCAO-PSコード開発による
ナノサイズクラスター計算
 - クラスタ系: 新化合物合成コード(2004)
 - ナノ物質データベース構築
 - 電子・原子計算知見情報集積
- (2) 擬似原子取り出し→物質の積み木細工
ポテンシャル計算→分子動力学法へ
- (3) 先端大型設備戦略活用プログラムへの移行推進