

大規模第一原理計算プログラム CONQUEST の開発と公開： ナノ構造物質の原子と電子の 振る舞いをコンピュータで解明

SATテクノロジー・ショーケース2022

■ はじめに

ナノメートル(nm)スケールで構造を制御された物質が特異な電気伝導特性、磁氣的性質や高い触媒活性等の新奇な現象を示す事例が数多く報告されています。同じ種類の原子から作られていても原子の配列が違えば、物質・材料は全く異なる性質を示します。物質・材料における原子の多様な振る舞いは主に電子状態によって決まりますが、**第一原理計算**は量子力学にもとづいた計算手法で電子状態を定量的に解明し、原子の振る舞いの多様さを高精度で明らかにすることができる強力な研究手法です。現実にはまだ知られていない未知の物質を設計する能力もあり、最近ではAIと組み合わせることによって、望まれた特性を持つ物質を実験よりも先に設計、発見している例もあります。

しかし、第一原理計算には複雑かつ膨大な計算が必要であり、数百原子を含む系の計算にはスパコンが必要となります。さらに、従来の方法では計算する対象が含む原子数の3乗に比例して計算量が増加します。このため、大規模系に対する計算が苦手であり、スパコンを使っても数万原子以上を含む物質の計算は極めて困難です。我々は**独自の計算手法、そしてプログラムの開発**を行うことにより、膨大な数の原子を含む数十nmスケールの物質・材料を第一原理計算で扱うことを可能としました。

■ 活動内容

1. 大規模第一原理計算プログラムCONQUESTの公開

我々の研究グループでは英国の研究グループと共同で大規模第一原理計算プログラムCONQUESTの開発を行っています。このプログラムではオーダーN法や独自の局在軌道法を用いることによって、通常の第一原理計算手法では扱えないような巨大な系に対しても第一原理計算に基づいた電子状態解析、構造最適化、分子動力学が可能となっています。

プログラムCONQUESTは2020年1月に寛容型オープンソースライセンスであるMITライセンスにより公開されました。これにより、国内外の研究者がこのプログラムを無償で用いることが可能となりました。

2. 百万原子を含む巨大系に対する第一原理計算

プログラムCONQUESTは並列化効率にも優れ、「京」や「富岳」のような超大型並列計算機でも高い計算効率で計

算可能です。これにより、百万原子を含むような巨大な系に対しても第一原理計算が可能であることを確認しています。これは、従来の第一原理計算手法が扱える2桁以上大きなサイズとなっています。また、超大規模系は扱えませんが、PCやクラスタ計算機上を用いた研究も可能です。

3. 様々な物質群への応用

第一原理計算は様々な物質に適用可能です。我々は今までに、半導体ナノ表面構造、半導体コアシェル型ナノワイヤ、金属ナノ微粒子、シリカガラス、ポリマー、水溶液中の巨大生体分子、などに対して大規模第一原理計算による解析を行ってきました。今後、より広範囲の物質群に適用していく予定です。

■ 関連情報等(特許関係、施設)

CONQUESTのサイト:<https://ordern.github.io>

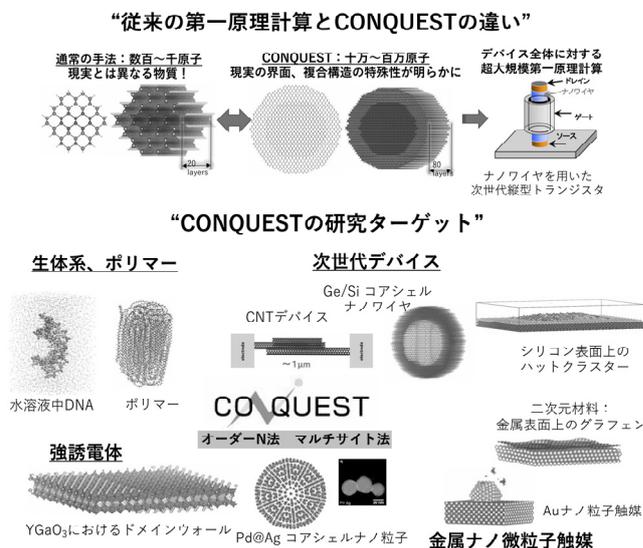
プログラム公開サイト:

<https://github.com/OrderN/CONQUEST-release>

プログラム紹介の論文:

A. Nakata et al., *J. Chem. Phys.* **152**, 164112 (2020).

<https://doi.org/10.1063/5.0005074>



代表発表者 **宮崎 剛(みやざき つよし)**
 所属 **物質・材料研究機構
 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点
 量子物性シミュレーショングループ**
 問合せ先 〒305-0044 茨城県つくば市並木 1-1
 TEL: 029-860-4961 FAX: 029-860-4974
 MIYAZAKI.Tsuyoshi@nims.go.jp

■キーワード: (1) 第一原理計算
 (2) オーダーN法
 (3) 第一原理分子動力学
 ■共同研究者: 中田彩子(物質・材料研究機構)
 David R. Bowler
 (英国ロンドン大学, 物質・材料研究機構)