

実空間密度汎関数法コード RSDFT の機能拡張

東大院工 岩田潤一

大規模系に対する第一原理シミュレーションの実現は、量子力学的効果を取り込み、ナノメートルサイズの系や周りの環境まで考慮した現実的モデルを扱うという多大な需要のある問題である。我々はこれまで京コンピュータに代表される超並列計算機に向け、密度汎関数法に基づく第一原理電子状態計算コード「RSDFT」の開発を行ってきた。従来の平面波基底を用いる計算コードとは異なり、RSDFT は実空間差分法を採用しているために、高速フーリエ変換がほとんど必要なく、高並列環境で高い性能を発揮するコードとなっている[1]。しかしながら現在の RSDFT は、局所密度近似 (LDA) および一般化密度勾配近似 (GGA) の範囲で基底状態の電子および原子構造という最も基本的な物性のみが扱えるだけのコードであり、熱的、電氣的、光学的性質や、LDA・GGA を越える精度の電子相関を扱うことなど、より広範な物性に関する第一原理シミュレーションを実デバイスサイズに匹敵する大規模系に対して実行していくためには、RSDFT をベースにさらなる計算機能の拡張を行うことが急務となっている。

本発表では、RSDFT をベースに Car-Parrinello 型の分子動力学法を実装した RSCPMD の概要と京コンピュータ上での性能評価についてお話する。また Gate-All-Around タイプの電界効果トランジスタのシミュレーションを想定した円筒型有効遮蔽媒質法の実装、さらに現在進行中の RSDFT の機能拡張に関するいくつかの話題についてご紹介する。

文献

[1] Y. Hasegawa, *et al.*, ; International Journal of High Performance Computing Applications, to be published.