物性研究所談話会

標題：超並列化オーダーN 第一原理電子状態計算の進展
日時：2014 年 9 月 18 日(木)　　午後 4 時～午後 5 時
場所：物性研究所本館 6 階 大講義室（A632）
講師：尾崎 泰助
所属：東京大学物性研究所
要旨：

より現実に近い物質系をより精密にシミュレーションすることで、第一原理計算に基づく物質デザインが可能になりつつある。物質構造の相対的安定性などの予測精度は信頼に足る精度に達しており、ナノスケールデバイスの電気伝導特性の設計、永久磁石の磁気異方性予測など、より挑戦的な課題に対して実験に先立って物質設計が行われるようになっている。さらに一歩を進め、産業応用を志向した物質設計を考えた場合、現実の複合構造の複雑さから超並列計算機を持ってしても第一原理計算の適用は容易ではない。そこで我々はより現実に近い物質系の取り扱いを可能とするために、計算コストが原子数に比例したオーダーN 法を開発し、第一原理計算の適用範囲を大幅に拡張してきた。講演ではその理論と応用例を紹介したい。オーダーN 第一原理電子状態計算法は今後の超並列計算機の進展に伴い、産業界における新規物質の研究・開発のための必須ツールとして、幅広く応用展開が進んでいくであろう。

【講師紹介】

尾崎所員はこれまで第一原子計算の計算手法を開発するとともに様々な物質に適用しその物性を明らかにされてきました。開発された計算コードはオープンソースソフトウエア OpenMX（Open source package for Material eXplorer）として公開されており、広く使われています。このたび 2014 年 6 月に計算物質科学研究センターに特任教授として着任され、第一原理計算による物質デザインに取り組んでおられます。