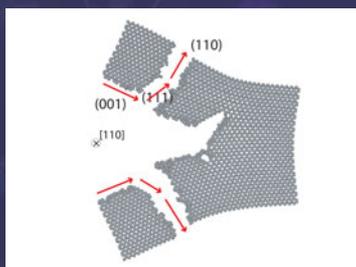


日本発ナノテク・材料計算ソフトウェアの世界標準化

# ELSEES

Extra Large Scale Electronic Structure Calculation

超大規模電子構造計算研究会



シリコンの亀裂展開が容易亀裂面に方向を変える

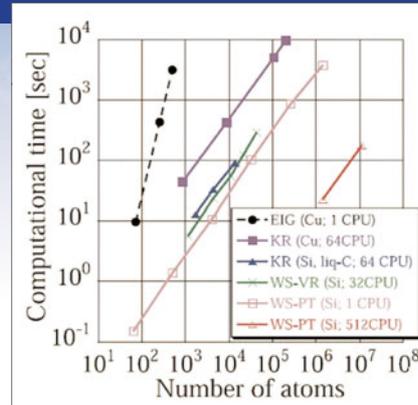
<http://www.elses.jp>

# ELSEES 研究会の目的

ナノデバイス、プロセスの設計・開発、新材料の開発  
通常の量子力学的第一原理分子動力学計算で扱える  
ELSEES研究会では100nmスケールサイズの系にお

## プログラムの概要

ELSEES (Extra Large Scale Electronic Structure Calculation) プログラムパッケージはタイトバインディング・ハミルトニアンを用いた電子構造計算、分子動力学法計算により、安定構造、ダイナミクスなど、様々なプロセスのシミュレーションを行うプログラムです。クリロフ部分空間法、Shifted-COCCG法などの数理アルゴリズムを用いた電子状態計算により 大規模系の電子構造計算を実現しています。数万原子規模の系については問題なく計算実行可能で、テスト計算では1千万原子まで行っています (ELSEESのベンチマーク結果)。



ELSEESのベンチマーク結果：  
直接対角化 (EIG) と種々のELSEES手法

## 超大規模電子構造計算プログラムパッケージ“ELSEES”の特徴

分子動力学法計算を用いた  
ナノ・メゾスケール  
シミュレーションプログラム

TBハミルトニアンを用いた  
電子構造理論にもとづく  
量子力学的計算

密度行列計算により  
高速、 $O(N)$  電子構造解析  
を実現

系に応じて最適な  
数理アルゴリズムを選択可能  
直接対角化法  
ワニ関数法  
クリロフ部分空間法  
Shifted-COCCG 法

XML 形式のファイル入力  
条件設定により  
汎用性、拡張性を確保

以下の物性値の計算が可能  
原子位置、速度、各原子に働く力  
動径分布関数、平均二乗変位  
エネルギー、温度、圧力  
全電子状態密度、局所状態密度

## 今後の 開発予定項目

材料設計の研究開発現場における  
様々なニーズへ対応するために、  
プログラムの開発・改良を行う予定です。  
右に開発予定項目を示します。

### 開発現場におけるニーズ

#### メゾ・マクロスケール材料評価

- ・材料特性予測、新機能材料開発支援
- ・量子効果を考慮した高精度な解析

#### シミュレーションによる研究開発方法の革新、 QTAT向上、試作削減

熱、化学反応

表面、界面における反応

多元素系

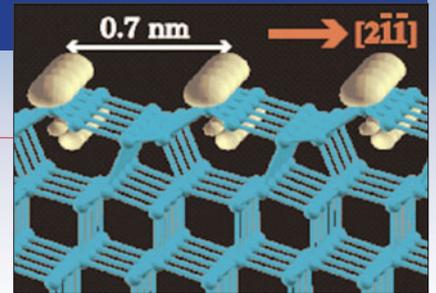
高速化、大規模、長時間化

を行うにあたり、計算機シミュレーションを活用した新しいスキームが期待されています。  
 原子数は数百程度であり、産業界で理論的解析が望まれる100nmスケールサイズの原子数を扱うことは困難です。  
 電子状態及び系の構造に適応できる量子力学計算の開発と応用を目指します。

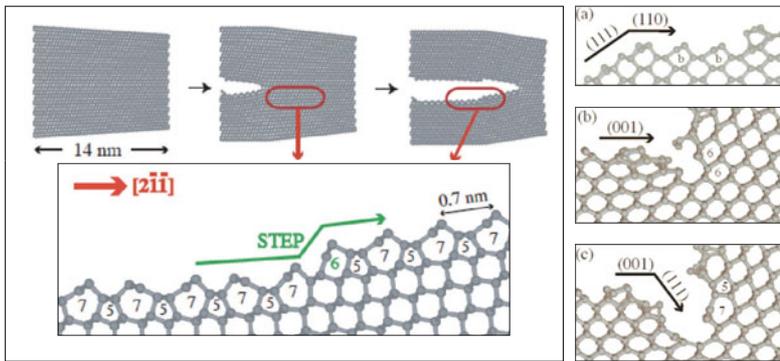
## 解析事例

### 解析事例 1... Si結晶における亀裂伝播と表面再構成

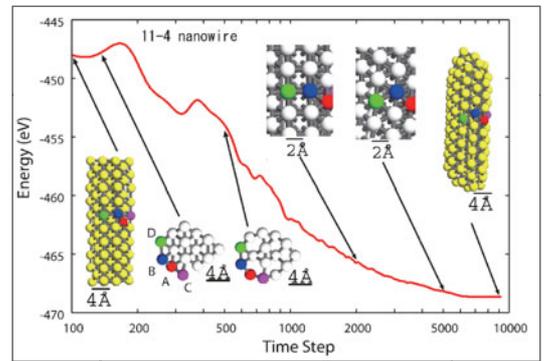
Si結晶の[001]方向に対して外力を与えた場合の亀裂伝播、形成表面の構造再構成、容易亀裂面などの解析を行った。シミュレーションでは(001)面の亀裂が、(111)面、(110)面に沿った方向に亀裂の進行方向を変える様子が観測された。このことは(111)面、(110)面がSiの容易亀裂面であるという実験事実と一致する。



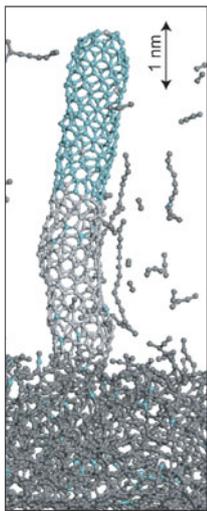
亀裂表面における電子状態



(001) 亀裂面の再構成の様子 (左図) および亀裂容易面 (111) 面、(110) 面への進展 (右図)



金ナノワイヤの分子動力学計算における全エネルギーおよび構造変化



カーボンナノチューブの液相からの成長

### 解析事例 2... Auヘリカルナノワイヤの多重殻構造

Auナノワイヤに対する分子動力学法計算により、ナノワイヤの多重殻構造におけるマジックナンバー、ヘリシティなどの原因を明らかにした。Au結晶(面心立方格子)の(110)シートを重ねたワイヤを初期構造として600Kの定温計算を行うと、表面に現れた(100)面上で原子列のずれが発生し、表面全体が(111)面によって覆われた構造が発生する。この構造変化がヘリシティを誘起し、マジックナンバーを説明する。この計算事例は本シミュレータが金属系にも有効であることを示している。

### 解析事例 3... カーボンナノチューブの成長

液体カーボンとの相互作用によるカーボンナノチューブの成長解析を行った。シミュレーションでは液体カーボンにナノチューブの先端を沈めた後、液面から引っ張り上げた。液面に現れたカーボンのチェーン構造がナノチューブの先端に結合し、ナノチューブを成長させる様子がみられた。本解析事例はシミュレータの液体系の解析および化学反応解析への可能性を示唆するものである。

#### プログラム対応項目

汎用化、多元系への対応

高速化、大規模系への対応

操作容易化

化合物系に対応可能な  
タイトバインディングモデルの開発

自己無撞着に決定された電荷を  
考慮したハミルトニアン

開発予定  
項目

非平衡グリーン関数を用いた  
有限電界下での伝導特性解析

電子状態密度解析  
アルゴリズムの高速化

モデリング、解析支援  
ツールの整備

## ELSEES研究会のご案内

### ー日本発ナノテク・材料計算ソフトウェアの世界標準化に向けての開発と普及ー

ナノデバイス、プロセスの設計・開発、新材料の開発を行うにあたり、計算機シミュレーションを活用した新しいスキームが期待されています。しかし、通常の量子力学的第一原理分子動力学計算で扱える系は数百原子程度であり、産業界で理論的解析が望まれる100nmスケールサイズの原子数を扱うことは困難です。

ELSEES (Extra Large Scale Electronic Structure Calculation) は東京大学において科学技術振興機構 (JST) 戦略的創造研究推進事業 (CREST) (課題名:複手法を用いた電子構造計算技術の開発、代表者藤原毅夫) の下で開発された、独創的なアルゴリズムに基づいた量子力学的分子動力学計算手法であり、電子状態計算に基づく分子動力学計算を原子数に比例した計算時間とメモリで可能にします。これにより100nmスケールの超大規模系の電子状態の変化を含めた構造変化などの分子動力学計算が可能となり、産業界の現実的なナノデバイス・プロセスの理論的解析が可能となります。

しかしながら、このELSEESプログラムパッケージは現状では直ちに産業界で活用していただける段階ではなく、今後、より多くの元素への対応やソフトウェア機能の強化を進めると共に、表面、界面、不純物、液体、金属原子系での実証的解析を進めることが重要となります。

ELSEES研究会は東京大学 産学連携本部の産学連携創出スキーム「UCR-研究会」に基づき、藤原毅夫教授を代表として大学・企業並びに研究機関の有志による幹事会と会員で構成され、ELSEESの開発・実証を進め、ELSEESをナノテク・材料分野における日本発の世界的ソフトウェアに開花させることを目指しています。

ELSEES研究会の会員になることにより以下の利用が可能です。

- ・ ELSEESの最新技術開発状況の紹介
- ・ ELSEESを用いた解析結果・成果の発表
- ・ 大規模計算の研究状況に関する情報交換

ELSEES研究会の会員の方々にはELSEESを利用していただくとともに、その開発・実証にも参加していただき、ELSEESの育成・普及の一端を担っていただければと存じます。

皆様の参加をお待ちしております。



### 連絡先

ELSEES研究会は11月初旬活動開始に向けて準備中です。ご関心ある方は以下までご連絡下さい。  
東京大学産学連携本部 本間高弘 homma@ducr.u-tokyo.ac.jp