

EX18801 (九州大学情報基盤センター推薦課題)

Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures

川添良幸 (東北大学 未来科学技術共同研究センター)

全電子混合基底第一原理計算法を活用したネットワーク型エネルギー絶対値算定マテリアルズ・インフォマティクス



【網羅的物質探索】

15年以上前の成功事例

「DFT計算による真空超紫外光(VUV)材料の設計・探索」

T. Nishimatsu, ..., Y. Kawazoe., Jpn. J. Appl. Phys. 41, L365 (2002).

ペロブスカイト構造を持つ直接遷移型ワイドギャップ半導体の網羅的探索

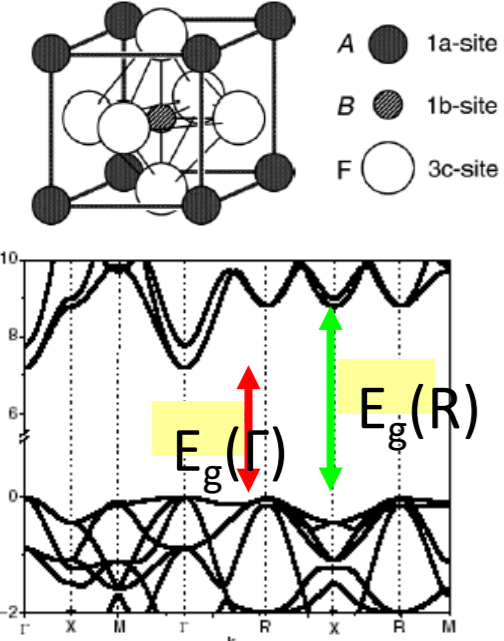


Table 1. Selected compositions for each band calculation of the perovskite-like structure of AB₃. Its calculated tolerance factor, band gap type (direct or indirect), and calculated band gap width E_g [eV] within the 12%.

Simply tetrahedron	Doubly tetrahedron											
	Ba	Mg	Ca	Sr	La	Pr	Cd	Hg	Pb			
Li	LiMgF ₃ 0.894 indirect 7.73 eV	LiMgF ₃ 0.894 indirect 7.73 eV	LiCaF ₃ 0.894 indirect 7.73 eV	LiSrF ₃ 0.894 indirect 7.73 eV	LiLaF ₃ 0.894 indirect 7.73 eV	LiPrF ₃ 0.894 indirect 7.73 eV	LiCdF ₃ 0.894 indirect 7.73 eV	LiHgF ₃ 0.894 indirect 7.73 eV	LiPbF ₃ 0.894 indirect 7.73 eV			
Na	NaMgF ₃ 1.081 indirect 6.08 eV	NaMgF ₃ 1.081 indirect 6.08 eV	NaCaF ₃ 1.081 indirect 6.08 eV	NaSrF ₃ 1.081 indirect 6.08 eV	NaLaF ₃ 1.081 indirect 6.08 eV	NaPrF ₃ 1.081 indirect 6.08 eV	NaCdF ₃ 1.081 indirect 6.08 eV	NaHgF ₃ 1.081 indirect 6.08 eV	NaPbF ₃ 1.081 indirect 6.08 eV			
K	KMgF ₃ 1.180 indirect 6.86 eV	KMgF ₃ 1.180 indirect 6.86 eV	KCaF ₃ 1.180 indirect 6.86 eV	KSrF ₃ 1.180 indirect 6.86 eV	KLaF ₃ 1.180 indirect 6.86 eV	KPrF ₃ 1.180 indirect 6.86 eV	KCdF ₃ 1.180 indirect 6.86 eV	KHgF ₃ 1.180 indirect 6.86 eV	KPbF ₃ 1.180 indirect 6.86 eV			
Rb	RbMgF ₃ 1.212 indirect 6.79 eV	RbMgF ₃ 1.212 indirect 6.79 eV	RbCaF ₃ 1.212 indirect 6.79 eV	RbSrF ₃ 1.212 indirect 6.79 eV	RbLaF ₃ 1.212 indirect 6.79 eV	RbPrF ₃ 1.212 indirect 6.79 eV	RbCdF ₃ 1.212 indirect 6.79 eV	RbHgF ₃ 1.212 indirect 6.79 eV	RbPbF ₃ 1.212 indirect 6.79 eV			
Cs	CsMgF ₃ 1.275 direct 4.86 eV	CsMgF ₃ 1.275 direct 4.86 eV	CsCaF ₃ 1.275 direct 4.86 eV	CsSrF ₃ 1.275 direct 4.86 eV	CsLaF ₃ 1.275 direct 4.86 eV	CsPrF ₃ 1.275 direct 4.86 eV	CsCdF ₃ 1.275 direct 4.86 eV	CsHgF ₃ 1.275 direct 4.86 eV	CsPbF ₃ 1.275 direct 4.86 eV			
Ag	AgMgF ₃ 1.311 indirect 5.31 eV	AgMgF ₃ 1.311 indirect 5.31 eV	AgCaF ₃ 1.311 indirect 5.31 eV	AgSrF ₃ 1.311 indirect 5.31 eV	AgLaF ₃ 1.311 indirect 5.31 eV	AgPrF ₃ 1.311 indirect 5.31 eV	AgCdF ₃ 1.311 indirect 5.31 eV	AgHgF ₃ 1.311 indirect 5.31 eV	AgPbF ₃ 1.311 indirect 5.31 eV			

既知のLiCaAlF₆以外に、Na/K/Rb/Cs/Ag等の網羅的DFT計算

新規真空超紫外光材料の発見→実験検証→実用化

計算科学による網羅的物質探索の有効性を実証!

→機械学習を使えば更に探索空間広がる

【GW計算基盤】

全電子混合基底第一原理計算法プログラム



TOhoku Mixed-Basis Orbitals Ab initio Simulation Package

東北大・川添グループ開発

大型並列計算機状での高効率GW計算実装

Hitachi SR1600/NEC SX-ACE/※Intel系マシンで要チューニング

全電子計算→エネルギー絶対値算定(×擬ポテンシャル計算)

【マテリアルズ・インフォマティクス/MI】

典型的には

物質・材料科学における最新トレンド

密度汎関数(DFT)法と機械学習の融合展開:

High Throughput Virtual Screening

高速な物性評価できれば

大量の化合物群で、物性値ランキング
所望の物性を持つ物質候補が見つかる

高速な物性評価エンジンは?

DFT法: 十分速くなってきたが、大量物性データ生成には辛い

そこで、「機械学習」

DFTは学習データ生成、大量物性評価は機械学習



【DFT/MIでVUV材料探索は可能?】

DFTは基底状態理論/発光波長算定には理論的に不適切

最低伝導帯(励起状態)と最高価電子帯のエネルギー差

DFT/バンドギャップ理論予測の問題

励起状態を正しく扱える理論が必要→「GW理論」

ダイソン方程式を解く多体電子論の枠組み→励起状態を扱える

最近のMI研究は大方DFTに基づく):-(

$$\Sigma = iGW$$

【課題設定】

GW計算と機械学習の融合展開:
「バンドギャップ・エンジニアリング」

次世代MI研究基盤の確立

【研究計画・拠点連携体制】

九大/ITOシステム

GW計算/MI計算のデータベース構築基盤



ネットワーク経由で
自動化データ転送

ITO上実施のGW計算対象系

1. NbドープTiO₂
→TOMBOチューニング
2. 真空超紫外(VUV)光発光材料
→機械学習の学習データ生成

本当に廻る

バンドギャップ・エンジニアリング
の枠組みに対する概念実証

TOMBO/GW計算の計算コスト

実績: Hitachi SR1600/NEC SX-ACE

1ケース = 5千ノード時間

実施予定計算:

チューニング/10ケース

MI学習データ/190ケース

合計/200ケース: 100万ノード時間

JAIST/並列計算機群

MI研究基盤確立/MIによるVUV新材料探索



情報社会基盤研究センター

Research Center for Advanced Computing Infrastructure



ネットワーク
経由で統合化

物性物理/計算材料学研究者の協働

川添良幸/東北大

研究統括

水関博志/KIST(韓国科科院)

MIに依る新規材料探索と公開

大野かおる/横国大

TOMBOプログラム開発

佐原亮二/NIMS(物材機構)

TOMBOプログラム実行

本郷研太/JAIST(北陸先端大)

MIプログラム作成・実行

南里豪志/九州大学

システム高度化チューニング

KIST/プラットフォーム

Web成果公開/国際的なネットワーク活用

cscweb.kist.re.kr
computational science center @ kist

SimP

Simulation Platform Creator a2.1