



# GW space-timeコードの大規模な有機-金属界面への適用に向けた高効率化

## 1. 研究背景・目的

### 有機エレクトロニクス材料物質の基礎電子物性の理解

#### バンドエネルギーの精密予測(GW近似)

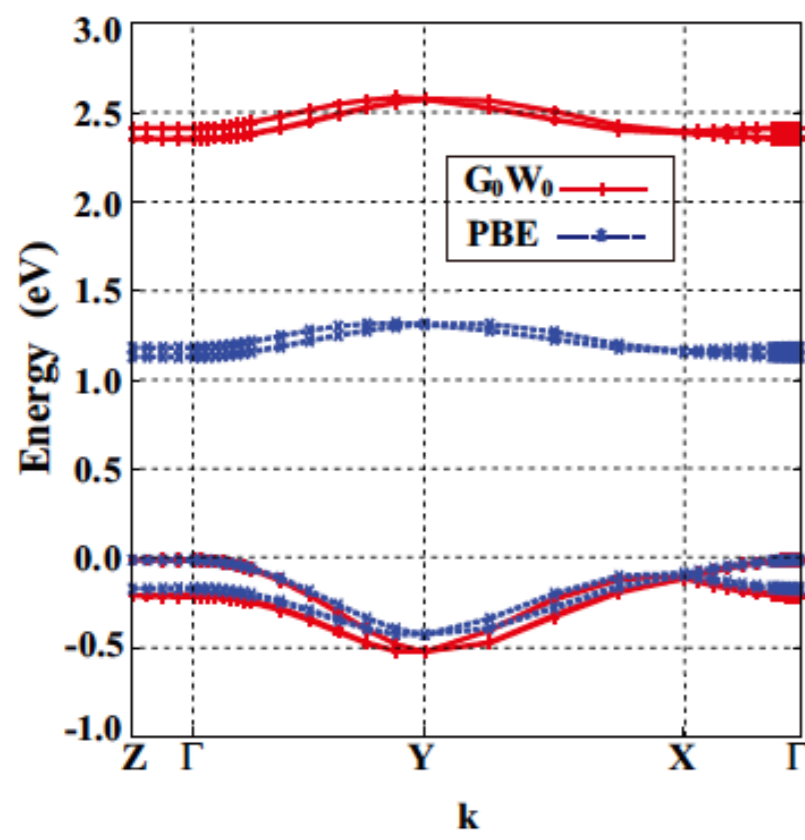
GW近似: GW space-time プログラム

#### 有機層と電極金属の界面

電荷(正孔・電子)の電極からの注入障壁の形成要因:  
界面での電荷移動、化学結合、電子密度分布の再構成...

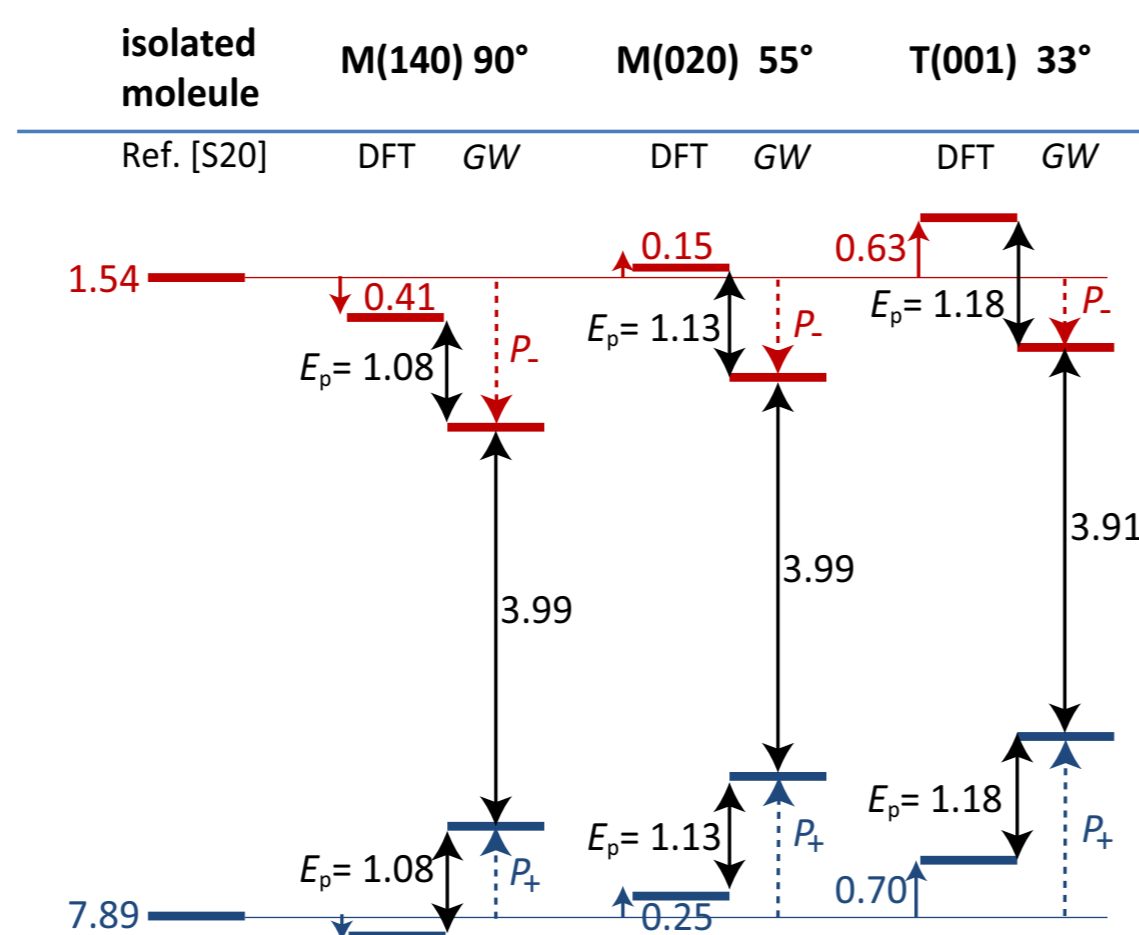
H. Ishii et al., Adv. Mater. **11**, 605 (1999).

#### 有機単結晶のバンド計算

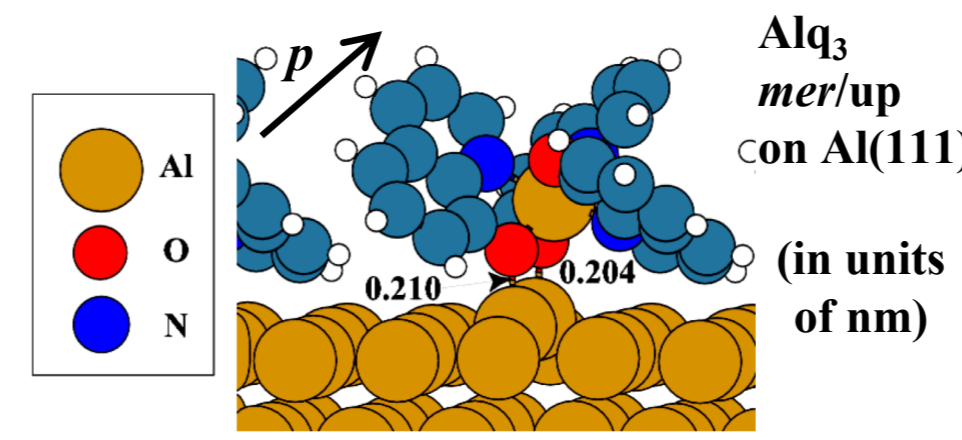


- SY, Y. Morikawa, and A. Schindlmayr, Phys. Rev. B **88**, 115438 (2013).
- SY, Y. Morikawa, and A. Schindlmayr, Jpn. J. Appl. Phys. **53**, 05FY02 (2014).
- SY and I. Hamada, J. Appl. Phys. **121**, 045501 (2017).

#### 表面での電荷注入準位 表面分子の配向依存性

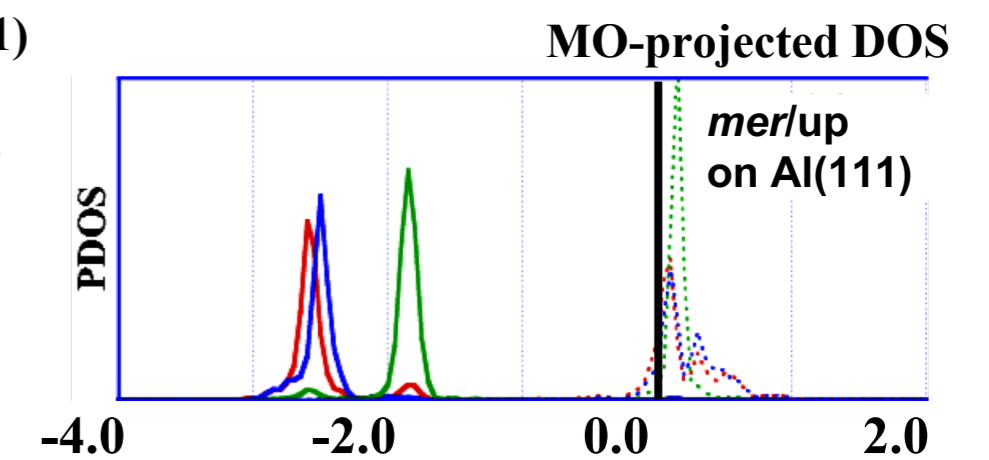


- SY, AIP Conf. Proc. **1906**, 030014 (2017).
- K Yamada, SY, T Koganezawa, K Mase, N Sato, and H. Yoshida, Phys. Rev. B, *in press*.



SY and Y. Morikawa, J. Chem. Phys. **128**, 244704 (2008).

#### 金属フェルミ準位と有機層の 最高占有/最低非占有 (HOMO/LUMO)準位の接続



#### 本研究の目的:

- ・有機-金属界面での準位接続の予測の精密化のために GW space-timeコードを大規模並列計算向けに高度化:  
- MPI並列とOpenMPとのハイブリッド並列化

## 2. 計算方法、プログラムの現状

### GW space-time 法

M. M. Rieger et al., Comput. Phys. Commun. **117**, 211 (1999).  
L. Steinbeck et al., Comput. Phys. Commun. **125**, 105 (2000).

$$W(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega) = \epsilon^{-1}(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega) v(\mathbf{G}, \mathbf{G}') \quad \text{畳み込み積分でなく、積を計算}$$

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau) = iG(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau) W(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau)$$

- ・高速フーリエ変換で、実空間/逆空間; 虚時間/虚振動数の切り替え。
- ・非局所な量や配列を計算。必要メモリが大きい。

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau) = -2iG(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -i\tau)$$

$$\tilde{\epsilon}_k(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega) = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} - \frac{4\pi}{|\mathbf{k} + \mathbf{G}||\mathbf{k} + \mathbf{G}'|} P_k(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega)$$

$$W_k(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega) = \frac{4\pi}{|\mathbf{k} + \mathbf{G}||\mathbf{k} + \mathbf{G}'|} \tilde{\epsilon}_k^{-1}(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega)$$

複素誘電行列の逆行列化がボトルネック。

### 29年度の内容 [jh170055-NAH]

- ・誘電行列  $\epsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$  のLU分解による逆行列化計算を、OpenMPでタスク並列化。ハイブリッド並列化して、効率向上を目指した。

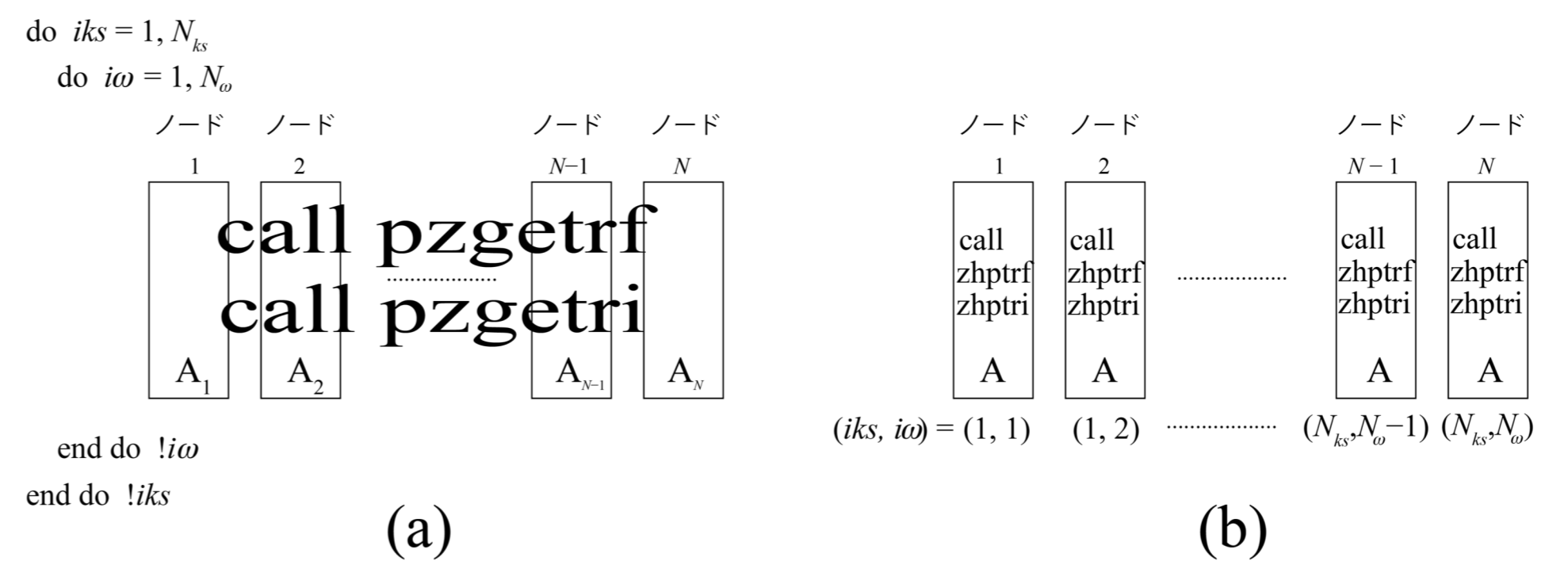


図1. 逆行列化の並列計算のイメージを表す図。(a)がScaLapackを用いたフラットMPI並列のコード。(b)では、各ノード内で逆行列化がタスク並列で行われる。

- ・フラットMPI並列のみのコードと比べ、全計算時間及び並列化効率にて少なからず改善が見られた(表1)。

表1.(a)と(b)を用いた場合の比較。1ノードあたり1コアを使用したフラットMPI並列計算。カッコ内は、逆行列化計算に要した計算時間。計測には、簡易性能解析機能 ftraceを使用。

	32コア	64コア
コード(b)を用いたプログラムの全計算時間(秒)	9944 (464)	5163 (267)
コード(a)を用いたプログラムの全計算時間(秒)	10836 (1239)	6061 (914)

テストの条件:  
ナフタレン単結晶(セル内36原子)、平面波のエネルギーカットオフ: 36 Ry、グリーン関数の計算での非占有バンド数: 2402。

## 3. 今年度の課題

- ・OpenMPIによるノード内タスク並列の、他の箇所への導入。実空間・逆空間グリッド変数の間のFFTについてタスク並列導入を進める。
- ・表面など、非周期系の計算実行のための計算法の実装:  
C. A. Rozzi et al., Phys. Rev. B **73**, 205119 (2006); S. Ismail-Beigi, *ibid.* **73** 233103 (2006).
- ・上記の実装を完了させ、典型的な無機半導体表面のスラブモデルへの適用・テストを進める。