

文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発  
 「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」  
 第一原理法に基づく電磁波物性解析プログラム UVSOR 3.10  
 – 高速化・並列化 –

Research and Development for Next-generation Information Technology of MEXT,  
 “Revolutionary Simulation Software”  
 UVSOR 3.10: First-principles Calculation Program for Investigating Electromagnetic  
 Properties of Materials – Tuned and Parallelized Code –

東京大学生産技術研究所 ————— 計算科学技術連携研究センター

分類	ナノシミュレーション
キーワード	第一原理計算、誘電応答
開発者	濱田智之、大野隆央
作成年月	2007年12月
コード名	UVSOR 3.10
使用言語	Fortran90

#### ◇第一原理法に基づく電磁波物性解析プログラム UVSOR 3.10：高速・並列版

UVSOR は、PHASE の計算結果に基づいて物質の誘電・光学応答を解析する第一原理分光ソフトウェアである。電子系・格子系誘電関数のほか、吸収スペクトル、反射係数、屈折率、非線形光学感受率 (SHG 及び THG 過程)、光学的有効質量等の多様な誘電光学物性を計算できる。今回公開する UVSOR 3.10 はすでに公開されている UVSOR 3.00 ソースコードを大幅にチューニング・MPI 並列化することにより、物質の誘電・光学応答の解析をより高速に行うことを可能としたソフトウェアである。UVSOR 3.10 は、並列計算機を用いた大規模計算による材料スクリーニング及び大規模系での誘電・光学応答解析に有効である。

#### ◇プログラムの概要

- (1) 従来版 UVSOR と比較して電子系誘電関数の計算が大幅に高速化されている。計算速度は、UVSOR 1.00 (2005年6月公開) の約6倍、UVSOR 3.00 (2007年6月公開) の約2倍である。SHG 非線形光学感受率計算は、UVSOR 3.00 の約2倍高速化されている。
- (2) MPI 並列化されている。複数プロセッサを有するコンピュータを使用することにより誘電関数・光物性の並列計算が可能である。
- (3) 多様な計算機に適用している。PHASE 同様、PC クラスタから大規模並列コンピュータ上で使用できる。計算機環境は LINUX である。

本ソフトウェアは文部科学省 IT プログラム「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトのもとで開発された。本プロジェクト WEB ページ (<http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/>) より 2007 年 12 月に公開を予定している。

## ◇計算時間

図1にバルクSiの電子系誘電関数をk点数を変化させて計算した場合の必要時間を示す。UVSOR 3.10は、従来のver. 1.00、2.00及び3.00と比較して誘電関数計算に必要な時間が大幅に短縮されていることがわかる。UVSOR 3.10による誘電関数計算時間は、各k点メッシュにおいて、バンド計算時間の1割以下である。

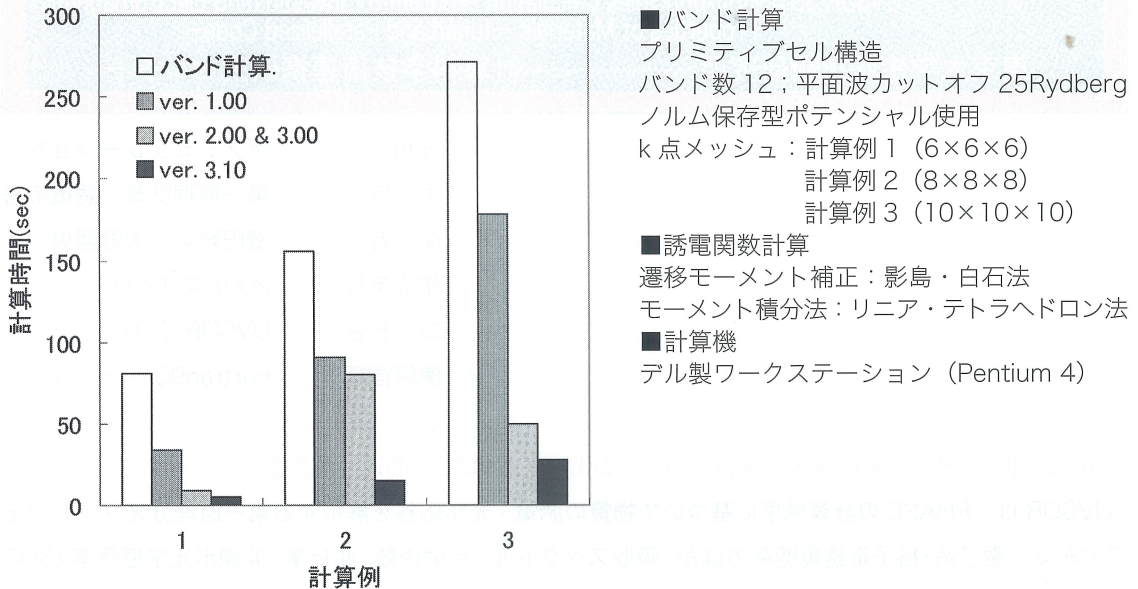


図1 バルクSiの誘電関数計算時間。計算時間をバンド計算部分と誘電関数部分に分け、UVSOR各バージョンの誘電関数計算を比較して示す。

## ◇3次非線形光学感受率の並列計算

3次非線形光学感受率 $\chi^{(3)}$ は計算が困難であり、これまでほとんど系統的な研究がなされていない。UVSOR 3.10を用いて各種半導体及び $\alpha$ -quartzの $\chi^{(3)}$ を並列計算した。表1に静的感受率 $\chi^{(3)}(0)$ の結果をまとめる。計算値は、文献値よりも実測値に近い。UVSOR 3.10は、計算コストが大きい材料の $\chi^{(3)}$ 予測に有効である。

表1 各種半導体及びSiO<sub>2</sub>( $\alpha$ -quartz)の3次非線形光学感受率 $\chi^{(3)}$ (10<sup>-12</sup>esu).

	This work	Other work	exp.
Si	25.629	48 <sup>a</sup>	24±14
C (Diamond)	0.222	—	0.18±0.03
GaAs	39.392	80 <sup>a</sup> 69.5 <sup>b</sup>	39
SiO <sub>2</sub> ( $\alpha$ -quartz)	0.0109	—	0.0296±0.0148

<sup>a</sup> Empirical tight binding (*Phys. Rev. B*, **41**, 1542 (1990)).

<sup>b</sup> LDA-PP (*Phys. Rev. B*, **45**, 8738 (1992)).