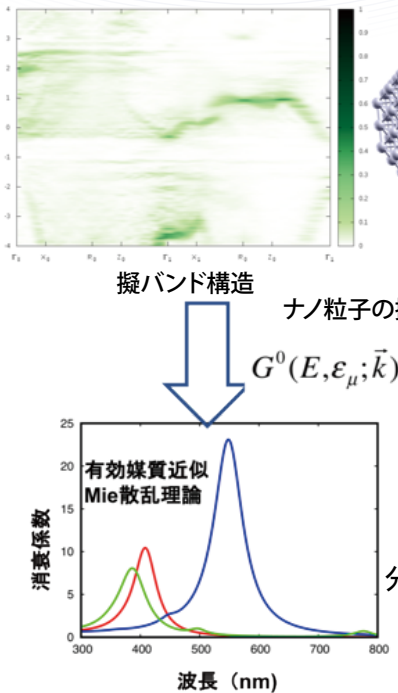


電気、光等のキャリア輸送シミュレータ (拡張CONQUEST)

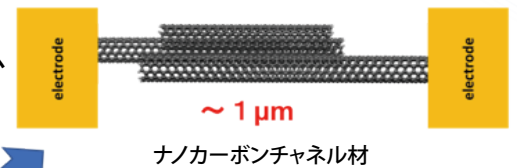
シミュレータ概要

- ▶ 本シミュレータは、物質・材料研究機構及びUniversity College Londonによって開発されている大規模電子状態計算プログラムCONQUEST (<http://ordern.github.io>)を拡張し、第一原理計算による電気や光等のキャリア輸送特性の予測機能を追加したのになっています。CONQUEST基幹部分の高効率化と併せて、1 μmスケールのチャンネル材料を含んだデバイス系の電圧-電流特性予測や、ナノ粒子の光学特性予測が可能です。後者についてはMie散乱理論の拡張した手法による、光学応答計算モジュールも追加されています。

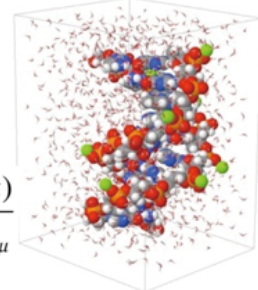
ナノ粒子のバンドエンジニアリング 光学特性予測機能



ナノカーボン・有機分子材料デバイス 電流-電圧特性の直接予測



大規模電子状態計算プログラム CONQUEST



高効率・高速化
擬ポテンシャル、基底関数系の整備

バンド伝導的電流+ホッピング電流補正

$$I = \frac{2e^2}{h} \int dE \tau(E) (f_L(E) - f_R(E))$$

$$\tau(E) = \text{Tr} [\Gamma_L(E) G^r(E) \Gamma_R(E) G^a(E)]$$

分散ナノ粒子の光学応答
スクリーニング

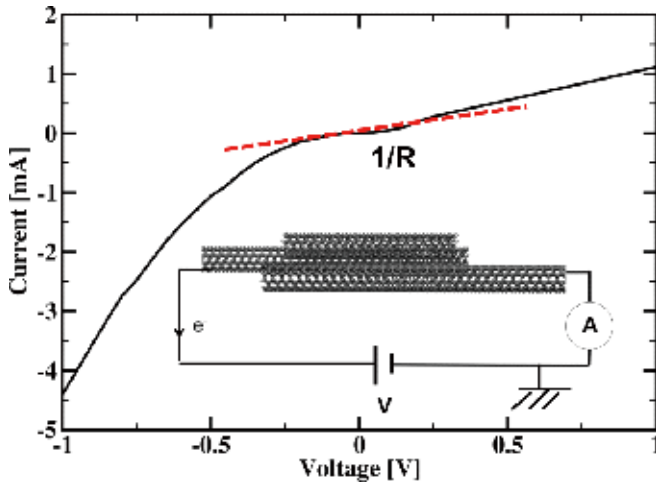
拡張CONQUEST概要図

拡張機能

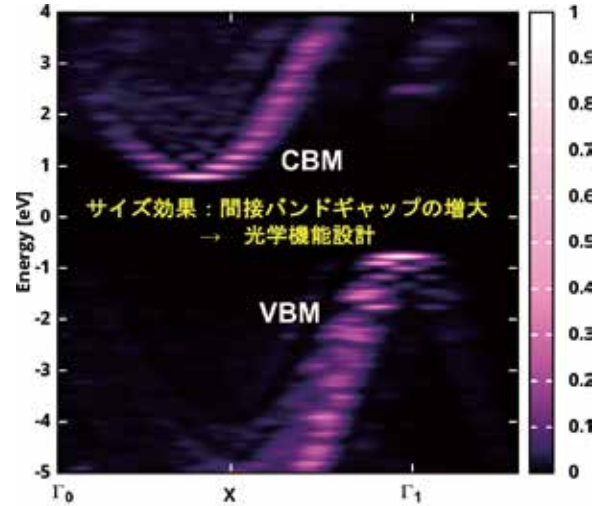
- ▶ 非平衡グリーン関数法による第一原理電気伝導計算モジュールを実装
- ▶ 電気伝導計算のオーダーN化と大規模並列化の実装
- ▶ 電子-フォノン相互作用によるホッピング伝導の計算機能を追加
- ▶ ナノ粒子の第一原理擬バンド計算手法を実装
- ▶ 媒質中ナノ粒子の光学応答計算モジュールの追加

想定用途

- ▶ ナノカーボン、有機材料をチャンネル材料とするデバイス材料の電流-電圧特性予測
- ▶ 異種材料接合による接触電気抵抗、電気伝導物性の温度依存性予測
- ▶ 金属・半導体ナノ粒子のバンドエンジニアリングによる光学機能設計
- ▶ 分散ナノ粒子の光学応答スクリーニング

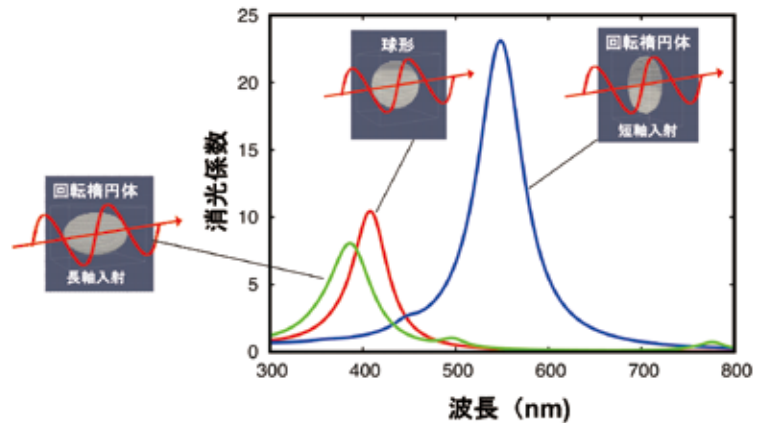


カーボンナノチューブバンドルの
電流-電圧特性



半導体ナノ粒子の擬バンド構造

金属ナノ粒子の光学応答
粒径・粒形依存性



動作環境

- ▶ ソースコード配布。Unix/Linux 上でコンパイル。推奨利用環境はIntel Fortran (MKL 及びMPIライブラリ含む)。これに加えて大規模行列計算用ライブラリMUMPS、PETSc(いずれもパブリックドメイン)をコンパイル時に使用。

ライセンス・配布方式

- ▶ 拡張機能部分についての利用規約は拡張CONQUESTのLicense 記載事項に従う
- ▶ CONQUESTについては、公開サイト(<http://ordern.github.io>)を通じて公開

—謝辞—

本シミュレータにおける電子状態計算基幹部の一部の改良とキャリア輸送計算に関する拡張機能のプログラムは、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託業務(P16010)により実装されたものです。

【連絡先】超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

【シミュレータ配布問合せ窓口】u2m-sim-ml@aist.go.jp

2020.04