

分野2「新物質・エネルギー創成」

# 研究課題の進捗状況

10月31日(水)

計算物質科学イニシアティブ (CMSI)  
統括責任者 常行真司

# 分野2の戦略目標と4つの戦略課題

## 戦略目標

**計算物質科学：基礎科学の源流から  
物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ**

## 戦略課題

第2部会

**次世代先端  
デバイス科学**

量子論で切り開く  
次世代デバイスの  
ブレークスルー

第4部会

**エネルギー  
変換**

次世代エネルギー技術の基盤  
となる物質機能性の探索

第3部会

**分子機能と  
物質変換**

ナノスケールの分子・分  
子集団系の構造形成と  
機能発現、機能制御

第1部会

**新量子相・新物質の  
基礎科学**

計算基礎科学と革新技术から湧き出す潮流：  
量子概念・量子機能の解明・予測・設計

## 分野2 CMSIで推進する研究課題

### ◆第1部会「新量子相・新物質の基礎科学」

課題1「相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明」

課題2「電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開」

### ◆第2部会「次世代先端デバイス科学」

優先課題2

課題3「密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究」

### ◆第3部会「分子機能と物質変換」

優先課題1

課題4「全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開」

優先  
課題  
選定

### ◆第4部会「エネルギー変換」

課題5「燃料電池関連物質における基礎過程の大規模計算による研究」

課題6「水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性」

課題7「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」

## 優先課題1

# 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

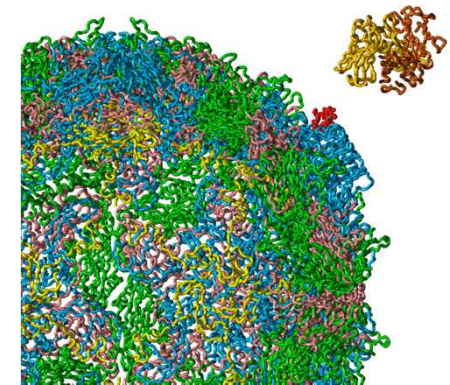
代表者 名古屋大学 岡崎 進

### 概要

高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト **modylas** を用いて水中の **小児マヒウイルスカプシド** (約1,000万原子) の **全原子シミュレーション** を行い、物質と生命の境界領域にあるウイルスを計算科学の俎上に乗せ、物質科学としての **ウイルスの分子論** を確立する。

### 目標

1. ウイルスカプシドの構造安定性の解明
  - ➡ **RNAを持たない究極の人工ワクチンの開発に繋がる**
2. 感染初期過程の分子機構の解明
  - ➡ **新しい作用原理を持つ抗ウイルス剤の開発に繋がる**



小児マヒウイルスカプシドとレセプター

### 取り組み体制

**幅広い共同研究体制**の下で推進

プログラム開発に関しては **理研、富士通、分子研と共同開発**

サイエンス研究に関しては **大阪大学、微生物化研と共同研究**

➡ **今後もさらに拡充**

関係機関の間で、すでに25回以上の開発打ち合わせと、10回以上の研究打ち合わせの会合

### 割り当て計算資源

10,608,500 ノード・時

## 優先課題2

# 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究

代表者 東京大学 押山 淳

### 概要

2011年度ゴードンベル賞を受賞した第一原理電子状態計算法である実空間密度汎関数法(RSDFT)と、オーダーN 密度行列法(CONQUEST)を二つの柱とし、「京」コンピュータの性能をフル活用し、ナノ構造体、とくに次世代デバイスの根幹材料であるSi/Ge系ナノ構造の電子物性を解明・予測し、次世代デバイス開発の基盤を形作る。

### 目標

1. 数万Si原子から成るナノワイヤーの電流・電圧特性の解明と最適ナノ形状の予測  
デバイス量子シミュレータ: 次世代高速・省エネトランジスターの量子デザイン
2. Ge/Siエピタキシャル成長でのクラスターナノ構造の生成機構と安定構造解明  
プロセス量子シミュレータ: ナノ生成機構解明による演繹的ものづくり

### 取り組み体制

RSDFT: 東京大学(押山淳、岩田潤一他)、理研(長谷川幸弘)

CONQUEST: 物質・材料研究機構(宮崎剛、Sergiu Arapan他)、理研(大塚教雄)

実証実験: 東京工業大学(岩井洋、名取研二、角嶋邦之)

### 割り当て計算資源

12,440,000 ノード・時

# 計算資源の利用状況と進捗状況

これまで利用した計算資源

利用期間IV(9月まで) 期間IV割当量の95%

供用開始後 今期割当量の20%

その資源で行った計算

## Siナノワイヤーの電子状態計算 (RSDFT)

1. SCF計算(1000 - 10,000 原子系、数百 - 4000 ノード)

・Self-Consistent-Field (SCF; 電子密度)を得る困難

→ 新たな前処理アルゴリズムを導入

2. エネルギーバンド計算

・新アルゴリズム(櫻井・杉浦法)の導入

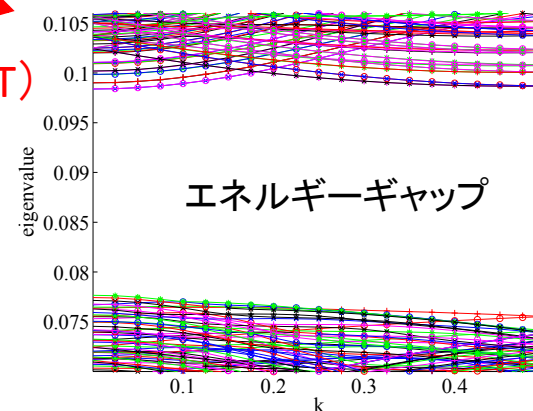
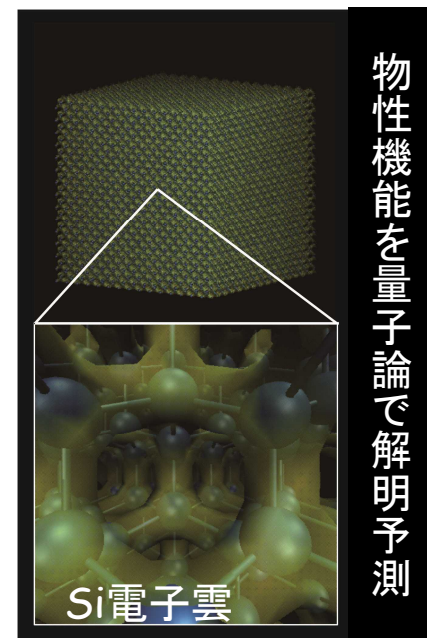
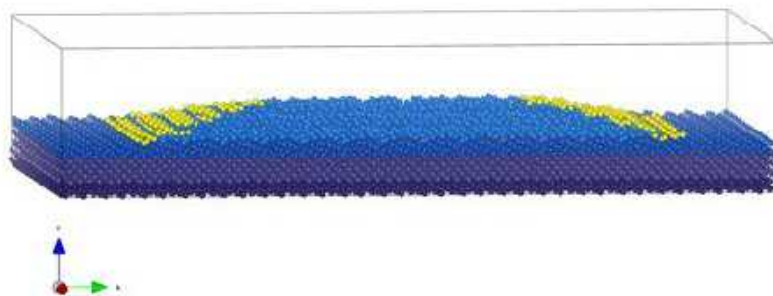
→ 重要なエネルギー領域を狙い撃ち

計算時間の低減

## Si面上Geナノクラスター(hut cluster)の構造決定(CONQUEST)

1. 密度行列最適化による構造決定

・19973原子系の構造決定に成功



Siナノワイヤーのバンド構造

## 今後の予定

### 今年度最終成果目標

#### 1. Siナノワイヤーの電子状態と電流・電圧特性解明

全方位ゲートで囲まれたSiナノワイヤー型トランジスターは、ゲート制御性に優れ、漏れ電流を軽減し、次世代高速・省エネトランジスターの切り札。断面ナノ形状の違いが、異なるトランジスタ特性を生み出す。

数万Si原子から成るSiナノワイヤーの最適ナノ形状を量子デザイン

#### 2. Si表面上Ge hut ナノクラスターの構造決定

ナノ構造はエピタキシャル成長、リソグラフィ、酸化の複雑プロセス。ヘテロ・エピタキシャル成長での原子過程解明がものづくりの処方箋の鍵となる。

Ge/Si系をターゲットに、成長過程での界面ナノ構造をCONQUESTで決定

### 今年度の予定

#### 1. 配分された計算資源は100%使用予定

### 来年度以降の計画と得られる成果

#### 1. 実際のナノワイヤー構造(酸化によるラフネス、ナノ断面形状、結晶方位)の決定とその安定構造での電子状態解明、電流・電圧特性の解析

CONQUESTによる大規模構造決定計算 + RSDFTによる電子状態計算  
+ コンパクトモデル(NATORI MODEL)による電流解析

#### 2. 弾道輸送コードNEGFとの結合により、ナノデバイス全体の伝導シミュレーション

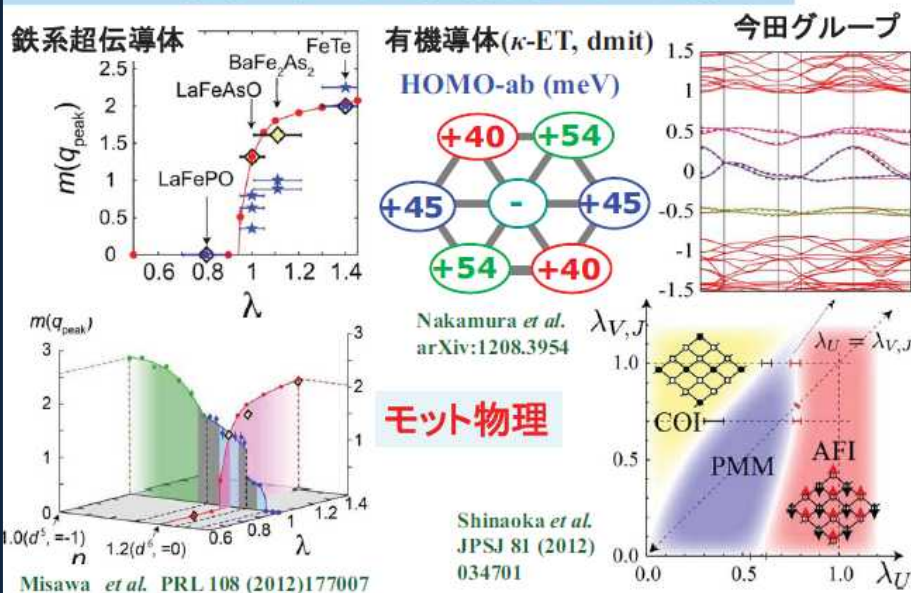
提案課題全体としての最終目標の達成には、25年度以降も一定の優先枠配分が必要



# ◆第1部会「新量子相・新物質の基礎科学」

## 課題1「相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明」

### MACE (階層的第一原理強相関電子状態計算法)



### スピン軌道相互作用と新量子相

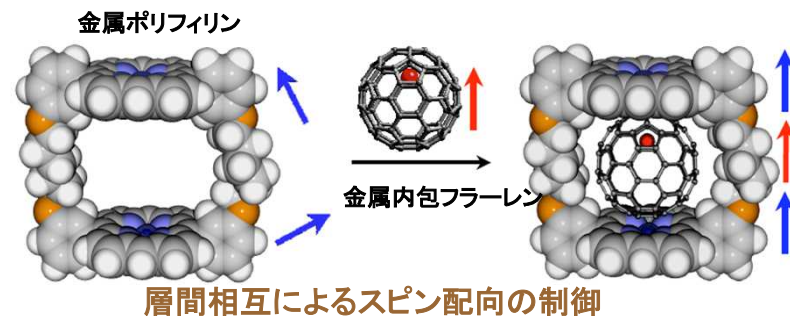
Ir化合物、マヨラナスピン液体、トポジカル絶縁体

第2部会サブ課題3(スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索)と連携

### 超伝導シミュレーション

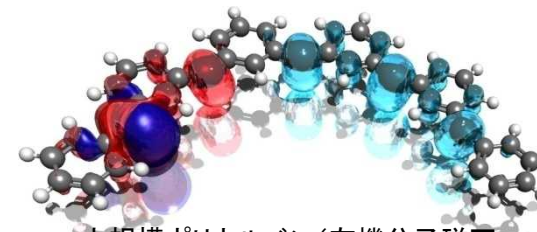
鉄系超伝導体、銅酸化物超伝導体

## 課題2「電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開」



### 強相関計算

繰り込み群アルゴリズムに基づく超並列対角化法  
プロジェクターモンテカルロ法



大規模ポリカルベン(有機分子磁石のプロトタイプ)のスピン相関密度による量子揺らぎの解析。

超並列計算環境による  
ポストハートリーフォックの高精度計算



エナジエティックスや物性の正確な予測  
革新的な機能性ナノ分子材料の開拓  
実験に先立って可能



# ◆第4部会「エネルギー変換」

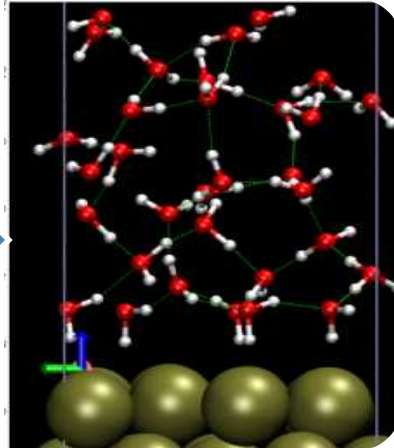
## 課題5「燃料電池関連物質における基礎過程の大規模計算による研究」

白金電極界面の水素-酸素反応モデル計算

時間スケールの克服

高精度電子状態計算

- 専用計算機(ナノ秒、
- 多体波動関数理論( $O(N^5-6)$  beyond)

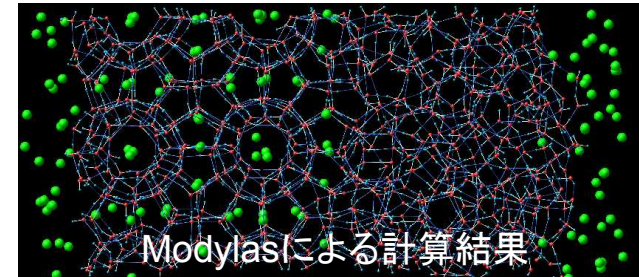


- ① 金属・水溶液界面の計算手法とモデリングの確立(H24-H25)  
 <目標> 白金(貴金属)水素極の問題解決。定量的予測へ
- ② 実効的予測計算へ向けて (H26~)  
 <目標> 構造と機能性の関連の明確化。微視的電気化学

## 課題6「水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性」

水 736分子  
メタン128分子

三相共存温度  
 $T_3 \sim 280$  K



[具体的な成果目標]

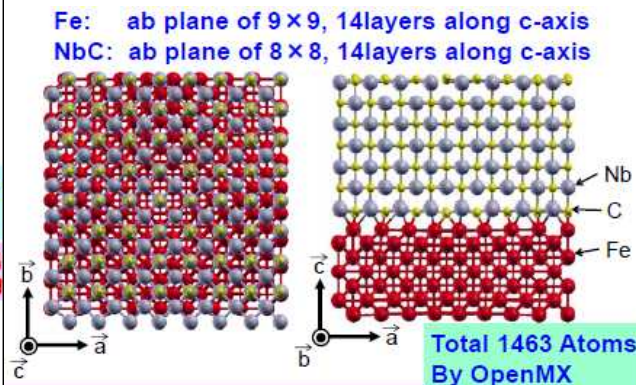
1. メタンハイドレートの生成・融解機構と効率的なメタン採取法の探索
2. 水素ハイドレートへの熱力学的安定性の評価と水素貯蔵の可能性
3. 水素移動のメカニズム(量子効果を含む)の解明
4. ハイドレートの多形とその相挙動の予測
5. 水和構造の溶質依存性と熱力学量の解明

## 課題7「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」

Our Target: "Multiscale" and "Material Design"



Pictures Ref.: <http://www.honda.co.jp/facebook/auto/safety/20000510/> and <http://storm.nsls.gov/~jmorris/> 「府立大・上杉作成」



今後の計画

1. 析出物/鉄の界面エネルギーの析出物依存性
2. 析出物/鉄の水素補足能の析出物界面依存性
3. 転位と固溶元素の相互作用