

HPCI戦略プログラム
分野2
新物質・エネルギー創成

平成28年3月9日(水)

計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

統括責任者

東京大学 常行真司

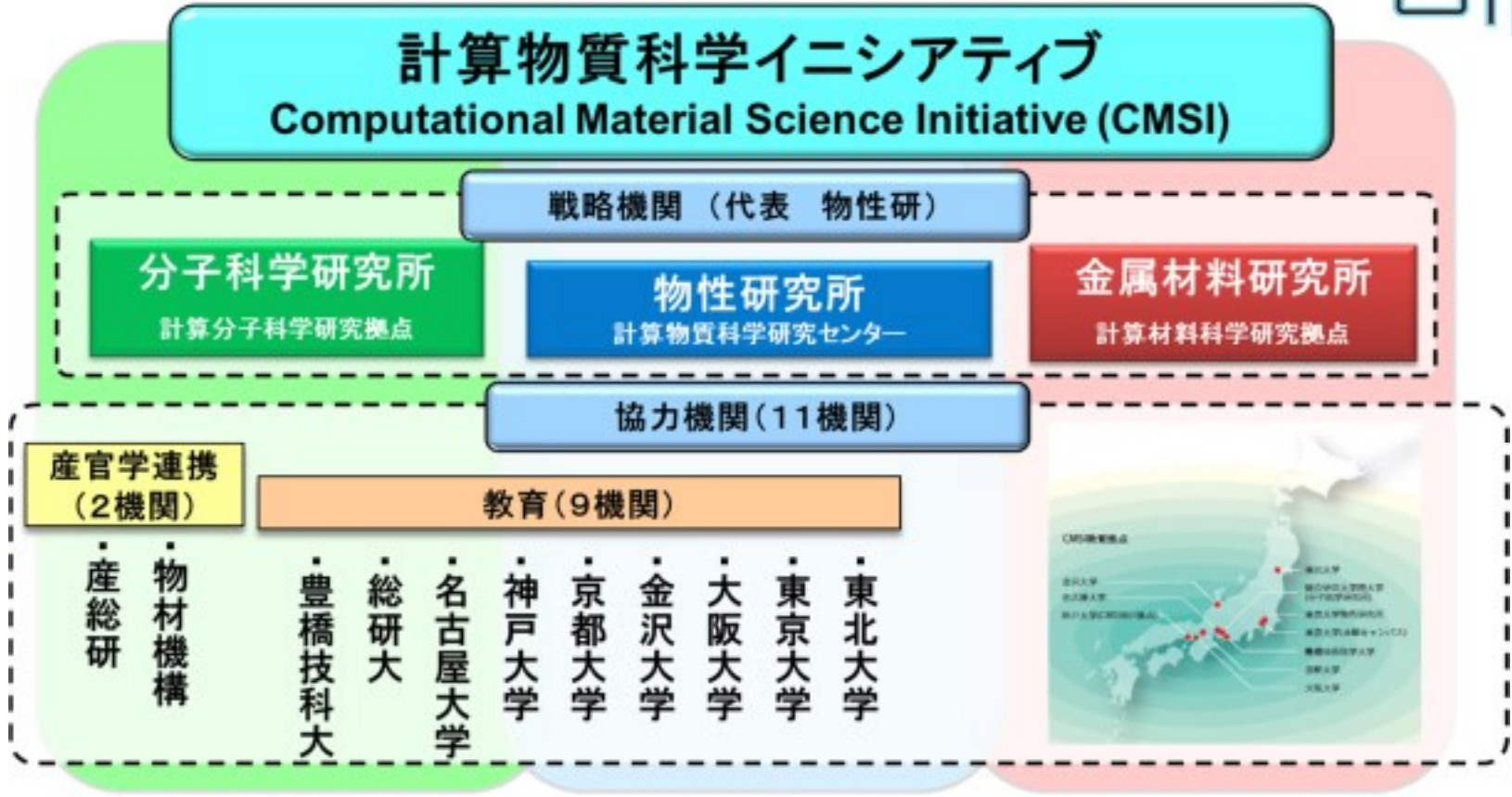
説明内容

1. **戦略分野概要**
2. **研究開発目標**
3. **課題の達成状況**
4. **今後の展望**

戦略目標

基礎科学の源流から物質機能とエネルギーを操る奔流へ

物性・分子・材料分野の連携体制で推進



参加者数(研究・体制): 117名
機関数: 28大学・4独法・6企業

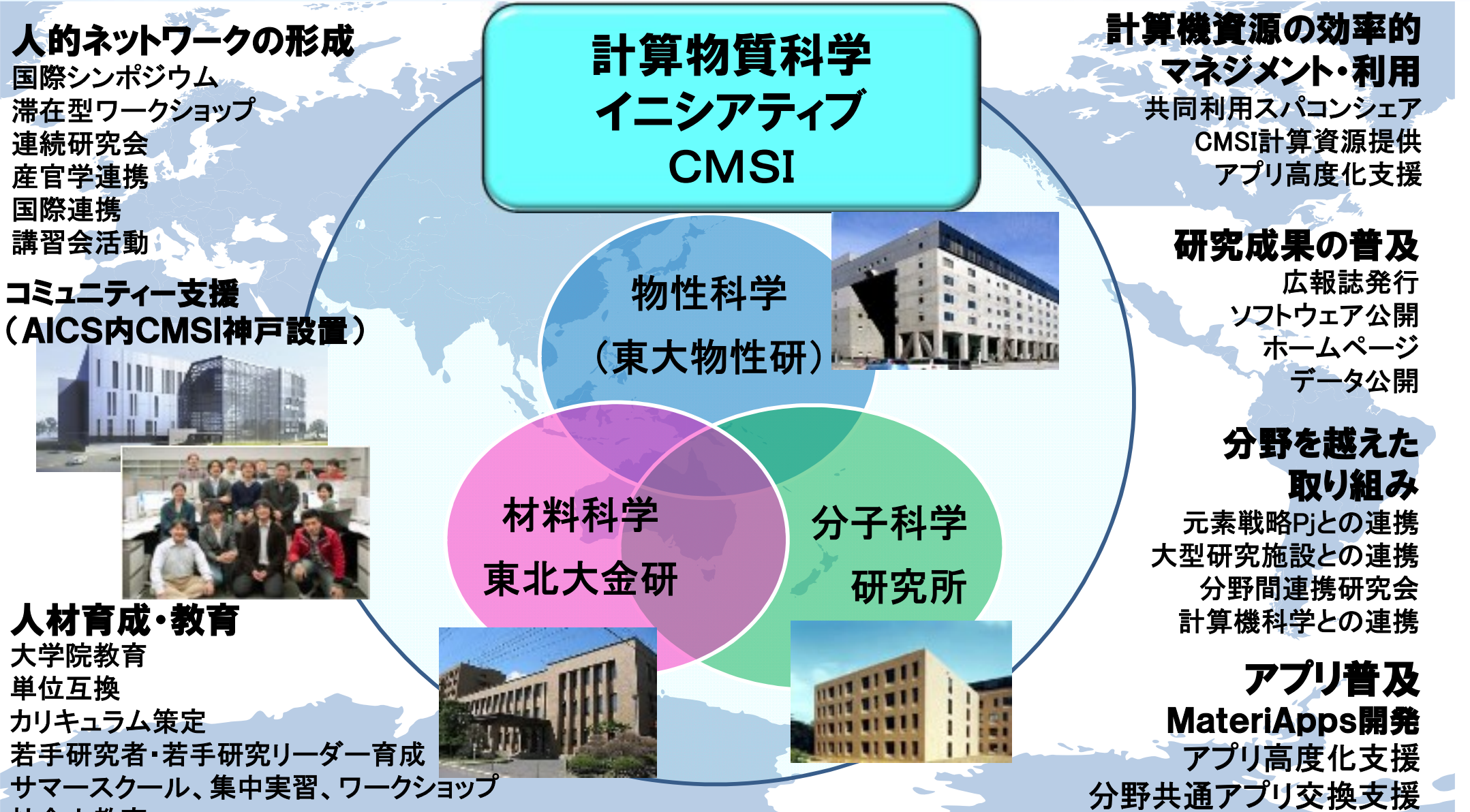
説明内容

1. 戦略分野概要
2. 研究開発目標
3. 課題の達成状況
4. 今後の展望

2) 戦略課題とその目標

部会	戦略課題	目標
第1部会 新量子相・新物質の 基礎科学	課題Ⅰ：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	高温超伝導、新量子相、新相転移、強い非平衡に伴う高励起ダイナミックスが生み出す新原理、新現象を解明。
	課題Ⅱ：電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開	分子の性質を定量的に予言し、炭素材料分子やかさ高い官能基による新規な物質の発現原理の解明と設計。
第2部会 次世代先端 デバイス科学	課題Ⅲ：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	量子論の第一原理に立脚した先端的計算を行い、その電子物性・機能を解明・予測する
第3部会 分子機能と物質変換	課題Ⅳ：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	感染機構や免疫機構、また抗ウイルス剤との相互作用などを自由エネルギーレベルで明らかにする。
第4部会 エネルギー変換	課題Ⅴ：エネルギー変換の界面科学	リチウムイオン2次電池と燃料電池の電極と電解質の界面の電子移動と性能劣化、変換効率の関連を解明
	課題Ⅵ：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	ハイドレートの生成解離過程や熱力学的安定性、融解と生成の過程を明らかにし、実用に対する指針を得る。
第5部会 マルチスケール 材料科学(H24～)	課題Ⅶ：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	金属材料の機械的性質を原子レベルの転位や粒界、欠陥、不純物と関連付けて高精度に解明する

課題Ⅷ：計算物質科学推進体制構築



Pj後の各研究所活動への浸透

説明内容(重要なポイントをプレゼン)

1. 戦略分野概要

2. 研究開発目標

3. 課題の達成状況等

(1) 研究開発目標の達成状況について

① 研究開発計画(平成28年2月1日時点)

- ・各課題とも順調に推移

② 研究開発目標及び研究開発計画の変更理由と対応

③ 目標達成状況(平成28年2月1日時点)

- ・学術的には大幅、着実に達成

④ 中間評価等指摘事項への対応

- ・対応済

⑤ 研究開発成果

⑥ 独創性・優位性

(2) 研究開発体制について

(3) 成果の利活用

4. 今後の展望

3. 課題の達成状況等(1) 研究開発目標の達成状況について

② 研究開発目標および研究計画の変更理由と対応

部会	戦略課題	H24年度	H25年度	H26年度
第1部会	課題Ⅰ：相関の強い量子系の新量子相探求とダイミックスの解明		3項目課題を1つに集約し、スピン軌道相互作用の物理に関する共同プロジェクト立ち上げ	
	課題Ⅱ：電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開		3項目課題を1つに集約	重点課題4のFMO課題を取り込み光合成光システムⅡ研究開始
第2部会	課題Ⅲ：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			光誘起電子ダイナミックスの課題を取り込み課題名変更「密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現」
第3部会	課題Ⅳ：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		トランスフェリンレセプターならびに抗体によるカプシド認識の分子機構の解明を追加	トランスフェリンレセプターならびに抗体によるカプシド認識の分子機構の解明に代えて、B型肝炎ウイルス抗ウイルス剤のDDS分子機構の解明を追加
第4部会	課題Ⅴ：エネルギー変換の界面科学		リチウムイオン二次電池の研究追加し、重点的に「京」利用	
	課題Ⅵ：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			
第5部会	課題Ⅶ：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	新規重点課題として追加		

3. 課題の達成状況 (1) 研究開発目標の達成状況⑤、⑥

課題 I : 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

概要

強相関多体量子系解明は凝縮系物理学の中心課題である。高温超伝導など新概念の宝庫であると同時に、応用は、広範な技術革新へと結びつく。「京」を含む大規模計算によって初めて第一原理に立脚し、網羅探索と組み合わせて強相関量子多体系の解明・高精度な予測が可能になった。このスキームを利用し新奇な量子多体現象の発見・機構解明や新物質探索と制御法の開拓を行なう。

計算科学の取組

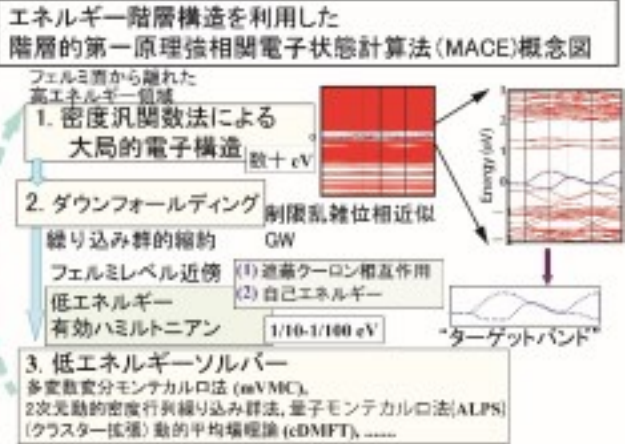
本課題で提唱する第一原理的な強相関模型導出法(MACE)に基づき、制限乱雑位相近似、GW近似、および低エネルギー有効模型のソルバー(多変数変分モンテカルロ法、量子モンテカルロ法、2次元密度行列繰り込み群法、テンソルネットワーク法)等の開発改良が進展。計算スキームの高精度化、精緻化、多機能化(スピン軌道相互作用、電子格子相互作用、ダイナミクスの取り込みなど)を行ない、高並列化と合わせて、実行効率も10000ノード以上10-50%達成。超伝導解明にあたって、提唱する理論の実験検証で実験グループと共同研究し、銅酸化物超伝導体の電子構造解明に寄与。

「京」以前

「京」以前から強相関量子系の解明には大規模数値計算の知見は必須。しかし世界的に見て単純な理論模型の限られたサイズでの計算によって、性質を推定するのが精一杯と考えられてきた。

「京」でブレークスルーした計算技術

第一原理的に強相関量子系の有効模型を導出して解き、第一原理パラメタを含む網羅探索で機構解明、設計指針提案も行なう新汎用手法が可能になった。広く強相関電子物質—高温超伝導体、トポロジカル物質、有機伝導体等に適用



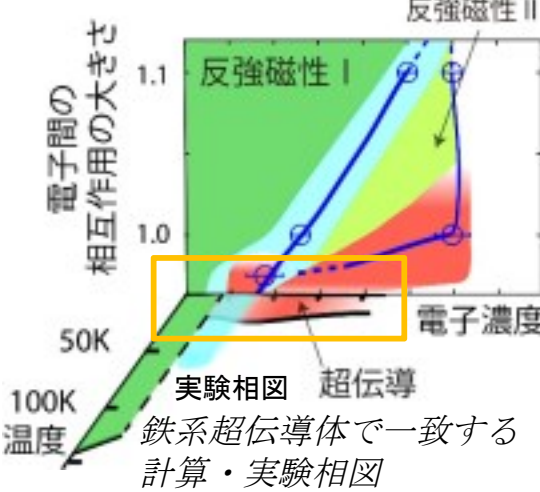
「京」で開発したアプリ・アルゴリズム等の普及

開発改良したMACE(多階層第一原理強相関電子状態計算法)のもとで多変数変分モンテカルロ(cVMC)コードをGitHubおよび理研ミニアプリとして公開。ALPSはMateriApsおよびhttp://alps.comp-phys.org/mediawiki/index.php/Main_Page, 並列計算機に対応した数値厳密対角化法による有効模型ソルバーパッケージ「HΦ」、MateriApsに公開、フォーラム形成

3. 課題の達成状況 (1)研究開発目標の達成状況⑤、⑥

課題 I : 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

科学的成果



強相関電子系超伝導の普遍機構理解への貢献

1. 鉄系高温超伝導体の第一原理計算により、超伝導を含む実験相図を再現。
2. 網羅計算で鉄系超伝導の発現機構を特定: 密度ゆらぎと相分離を伴う超伝導。
3. 銅酸化物模型網羅計算で鉄系と共通の超伝導機構特定。

4. 銅酸化物高温超伝導の主因となる、隠れたフェルミオン発見
5. 界面超伝導特性の優位性の機構を解明。今後の超伝導素子機能の開拓への指針を得た。

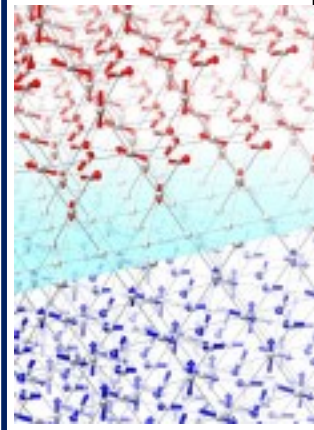
◆独創性・優位性

1. 鉄系超伝導、スピン軌道トポロジカル相候補物質を含む多くの強相関電子系に対し初めて強相関ゆらぎ効果を高精度で取り込む第一原理計算を実現。鉄系超伝導の高温超伝導機構の第一原理的解明は初めて。追従できるグループはまだない。

◆成果の活用・今後の展望

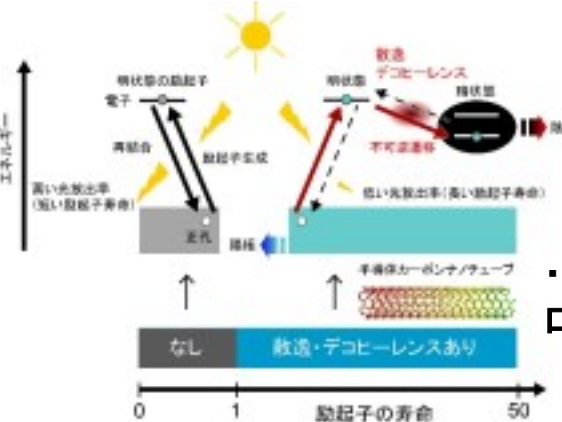
MACEの汎用手法の普及推進。実験家・産業界も使えるアプリケーションへ。ポスト京プロジェクトで中心手法として活用
高温超伝導機構、トポロジカル相候補物質の物性解明を基礎に非平衡や薄膜・界面の高機能性・優位性解明・物質設計へ

実用的成果



・高機能・可動トポロジカル界面の予言と予言に基づく実証—実験とのサイクルから高機能化へ

1. パイロクロア構造を持つイリジウム酸化物で反強磁性磁壁のみがトポロジカルな金属となることを予言
2. 初の可動トポロジカル界面
3. 予言と一致する実験観測
4. さらにヘリカル金属としての円二色性



- などの予言、実証提案
- ・量子スピン液体候補の物性解明・実現指針
- ・太陽電池高効率化のための散逸利用と探索指針提案

・新しい実験手段: ポンプ・プローブ分光の解析手法提案

- ・ J-PARCや放射光施設での実験と連携を加速。

◆独創性・優位性

他に例がない新概念: 可動金属界面(磁壁)の予言、実証

◆成果の活用・今後の展望

・ J-PARCやSPring-8の実験研究者との連携強化、強相関電子系の共同研究を発展、アプリの実験・産業界利用推進 10

3. 課題の達成状況 (1)研究開発目標の達成状況⑤、⑥

課題Ⅱ：電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開

概要

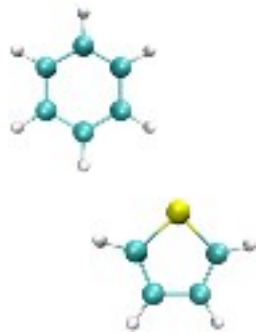
斬新な計算手法の発展と超並列計算環境の援用により、**高精度ポストハートリー・フォック計算によるナノスケールの材料設計**を可能とし、有機太陽電池や光合成活性中心の機構解明へと発展させる。

計算科学の取組

非経験的分子軌道計算の基底関数展開を著しく加速するF12電子状態理論をもちいた。超並列計算環境での分子積分の生成と積分変換を高効率に行うために、部分的に実空間での分子求積法を利用した実装を行った。「京」での性能は2万ノード以上で実効性能30%、並列化効率80%程度を示し、ナノスケールでの有機電子材料の計算をルーチンで行える実装を可能とした。

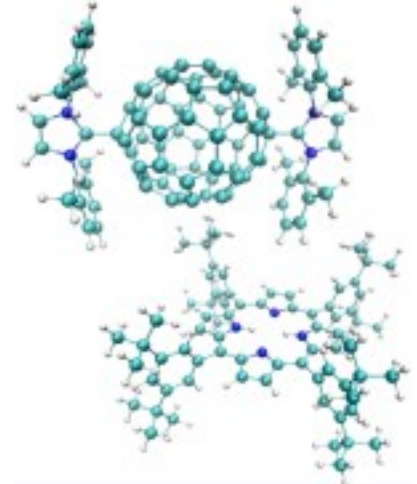
「京」以前

高精度の波動関数理論は系の大きさに対して5乗以上の計算コストがかかるためナノ分子系への適用が困難であった。



「京」でブレークスルーした計算技術

F12電子状態理論の「京」に最適な実装を行うことにより、複数のヘテロ環状カルベンのC60への結合体や分子ベアリングの計算が実現した。更にモデル空間量子モンテカルロ(MSQMC)法やPHF法などの強相関の手法と応用も前進した。



「京」で開発したアプリ・アルゴリズム等の普及

実装を行ったGELLAN量子化学プログラムはリクエストによるバイナリ公開であり、それを通じた成果の普及を行う。ポスト「京」重点課題⑤でもアプリ、アルゴリズムの継承を行う。

3. 課題の達成状況 (1) 研究開発目標の達成状況⑤、⑥

課題Ⅱ：電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開

科学的成果

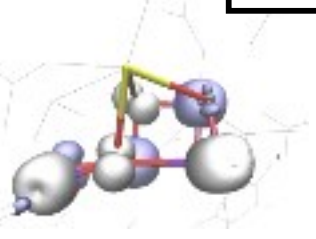


図1: PSIIマンガンクラスター: S₂基底状態スピン密度

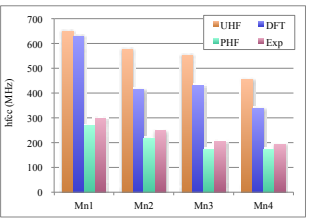


図2: 超微細構造定数(S₂)

PHF法によってPSIIのマンガンクラスター(OEC)の厳密なスピン固有状態での最適化構造が得られた。超微細構造定数は、実験を定量的に再現し、正しいスピン状態の取り扱いがESRの見積もりに重要である事を示した。又、DFT-FMO法を使用することによってOECへの電荷移動蛋白部位を明らかにした。更に、従来のQMCでは困難であった擬縮退系や励起状態の計算を可能にしたMSQMC法を開発し、スピン状態の計算を行った。

◆独創性・優位性

PHF法によりOECの厳密なスピン固有状態での構造最適化や高精度のENDORスペクトル解析が可能である。OECと周辺アミノ残基の相互作用は、超並列FMO計算によって解析できる。MSQMC法では、サンプリングにより大きな強相関係の高精度計算が可能である。

◆成果の活用・今後の展望

PHF法やMSQMC法は強相関電子系ソルバとして有用である。人工光合成においては、多核遷移金属錯体が光触媒の候補物質として検討されており、今後、PHFやMSQMCをこれらの系に適用することによってメカニズムを解明し、人工光合成触媒の理論設計に繋がると期待できる。

実用的成果

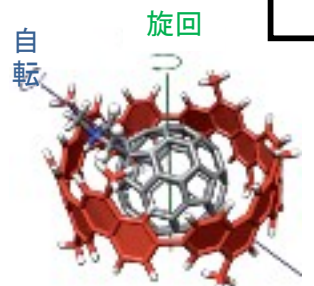


図3: 分子ベアリングの二種類の回転運動

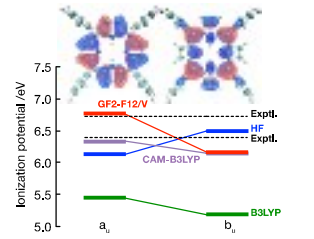


図4: テトラフェニルポルフィリンのイオン化ポテンシャル

MP2-F12 計算によって分子ベアリング(左図)の二種類の回転運動のエネルギー障壁の高精度計算を行い、実験研究者と連携してNMRの温度依存性と回転運動のメカニズムを解明した。

GF2-F12計算によって種々の有機分子(左図一例)のイオン化ポテンシャルをHFやDFTよりも高精度に計算できるようになり、分子の基本的な電子的性質の一つを定量的に算出することを可能にした。

◆独創性・優位性

超並列F12理論による大規模計算は、本課題で開発したGELLANプログラムの独自機能であり、本プログラムでしか計算できない分子は多い。MP2-F12法では分子間相互作用エネルギー、GF2-F12法ではイオン化ポテンシャルの高精度計算が可能である。

◆成果の活用・今後の展望

分子同士の配向や分子間の距離が重要となる有機薄膜太陽電池や微妙なエネルギー差が重要な分子機械・分子スイッチなどの微視的な構造を決定するために、MP2-F12法が活用できる。また、イオン化ポテンシャルは、物質の安定性や活性の指針であるため、有機電子材料の分子設計にGF2-F12法が有効であると期待できる。

課題Ⅲ-1: RSDFTコードの高速化・高度化

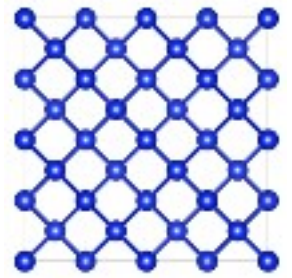
概要

密度汎関数法に基づく第一原理電子状態計算は物質科学の広範な分野において重要な研究手段となっている。これを超並列計算機で効率的に実行可能なコードの開発を行う。

計算科学の取組

Kohn-Sham方程式に基づく $O(N^3)$ アルゴリズムの計算コードは平面波基底を用いた実装がほとんどである。しかしこれはFFTを多用するため、並列数の増大に伴い急速な計算効率の低下を招く。我々は実空間グリッドを用いる実装でこれを回避し、また、空間グリッドのみならず、固有ベクトルのラベル(バンド)についても並列化を行い、並列化可能な軸が増え、「京」全ノード利用に堪えるコードを開発した。

「京」以前



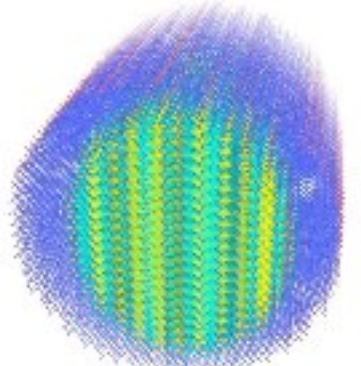
Si 64原子モデル

「京」以前(そして今でも多くの人)は、第一原理計算といえは高々数十~数百原子を扱うのがやっとで、とても現実のデバイスサイズのシミュレーションには使えないとあきらめていた(いる)



「京」でブレークスルーした計算技術

「京」およびRSDFTにより、扱える原子数が「数十~数万」の範囲に拡大。FETの伝導に重要なチャネル部分ならば実際のデバイスと同じサイズで第一原理計算が可能となっている



40,000原子超のSiナノワイヤの電子伝導に寄与する波動関数

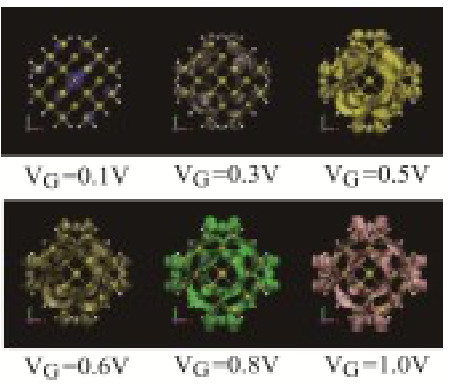
「京」で開発したアプリ・アルゴリズム等の普及

- 開発したRSDFTを非常に自由度の高いライセンスで公開
- 第一原理計算の応用範囲は非常に広く、産業応用等で利用されることを通じて、経済的・社会的インパクトにつながる可能性をもつ

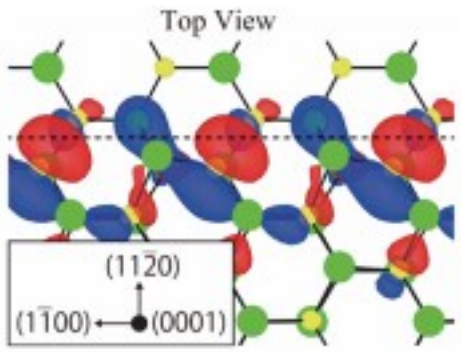
3. 課題の達成状況 (1)研究開発目標の達成状況⑤、⑥

課題Ⅲ-1~3: 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測

科学的成果



SiナノワイヤーFETの電流密度のゲート電圧依存性



SiCナノファセットでのスピン新機能を発現する電子状態雲

量子論に基づく実空間手法を、京で高度化し、前人未踏の10ナノメートル構造体の探索計算、電子状態計算、1ナノメートル電子構造・輸送係数計算を実現し、ナノスケール原子構造と電子機能の相関を解明

◆独創性・優位性

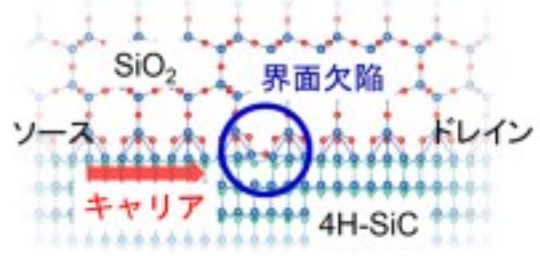
コンピューティクス(計算機・情報・数理科学と計算物質科学の融合)による、前人未到大規模・高速計算

◆成果の活用・今後の展望

より広範な物質群に対する量子論物質デザイン計算動的振舞いを解明する大規模CPMD計算

実用的成果

- ✓ **パワーエレクトロニクス材料**として重要な、SiCバルク結晶での固有欠陥によるトラップ準位同定。
- ✓ SiCデバイス界面での欠陥同定とリーク電流計算。

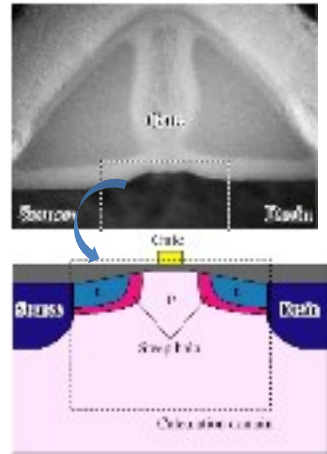


◆独創性・優位性

デバイス丸ごとシミュレーションを可能にする、マルチコア超並列アーキテクチャでの大規模高速計算技術確立

◆成果の活用・今後の展望

- ✓ デバイス構造での電場計算と結合し、デバイス丸ごと量子論輸送シミュレーション手法の開拓
- ✓ 成膜実験、デバイスプロセスとの定量的比較



3. 課題の達成状況 (1) 研究開発目標の達成状況⑤、⑥

課題Ⅳ：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

概要

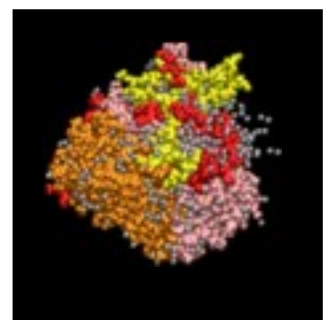
ウイルスの全原子シミュレーションやウイルスタンパク質の全電子計算等を実行することにより、感染機構や免疫機構、また抗ウイルス剤との相互作用などを自由エネルギーレベルで明らかにし、計算科学によるウイルスの分子科学を世界に先駆けて確立する。

計算科学の取組

系の全自由度に対するニュートンの運動方程式を解くために必要な力を計算するにあたり、FFTフリーなFMM法を採用し、「京」における高効率な高並列計算を可能にした。ウイルス学、構造生物学の実験研究者と共同研究を行い、カプシドの分子レベルでの振る舞いの生物学的な意味を明らかにした。また、消化器内科の研究者とB型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤のカプシドを浸透する薬剤送達についての共同研究へと展開している。

「京」以前

正二十面体対称性を仮定したウイルスカプシドの断片のMD計算、もしくはX線回折からの低温での静止した結晶構造に対する不正確な解析を行っていた。

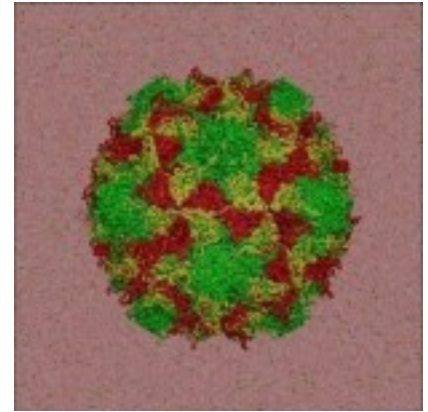


10万原子系



「京」でブレークスルーした計算技術

ウイルスカプシドの丸ごと計算により、球殻であるカプシドの全体構造が示す特異な振る舞いを明らかにし、**ウイルスの安定性の起源を分子レベルで解明**した。また、断片の計算のみからでは本質的に不可能な**カプシドとレセプターとの相互作用を自由エネルギーレベルで計算可能**とした。この技術は、他のウイルスにも容易に適用可能である。



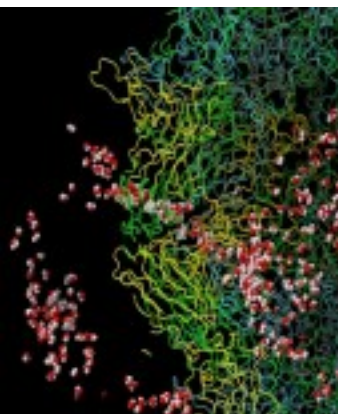
1,000万原子系

「京」で開発したアプリ・アルゴリズム等の普及

本技術は社会的要請の高いB型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤の開発に応用し用いられているほか、高分子や界面活性剤にも展開されている。現在、他省プロジェクト2件、企業との共同研究7件が進行中である。

課題Ⅳ：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

科学的成果



小児マヒウイルス

- ・カプシドの内部と外部での水の高速な交換とウイルスの圧力耐性、乾燥に対する不活化の関係を解明。
- ・カプシド内の電解液圧力は負の値を示し、empty capsidの不安定性の一因を解明。
- ・感染の初期過程であるレセプターとウイルスの結合において、両者の相互作用を自由エネルギーレベルで解析。引力の存在を証明。
- ・レセプターがウイルスを認識し接近する際に、確率論的な過程が含まれていることを解明。

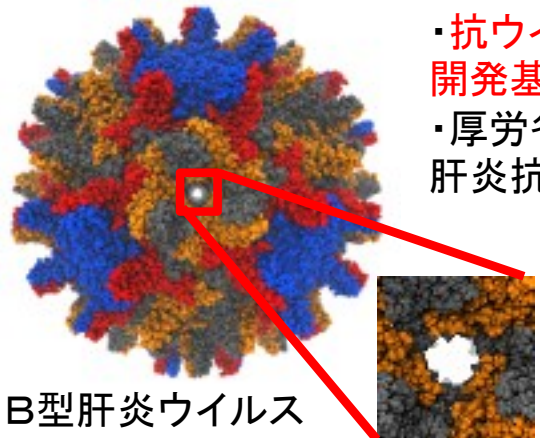
◆独創性・優位性

ウイルスの丸ごとシミュレーションは、世界的にもごく少数。その中でも、人類にとって重要なウイルスに対して物理化学として分子論を展開しているのは本研究のみ。

◆成果の活用・今後の展望

本課題で得られた軌跡を他研究機関にも提供。ウイルス研究の計算科学基盤が確立されつつある。また、本課題で開発した手法を抗ウイルス剤の開発に活用し、実用研究も開始。

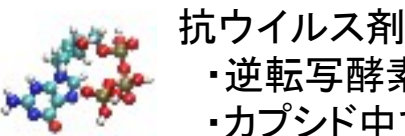
実用的成果



B型肝炎ウイルス

- ・抗ウイルス剤の開発に貢献できる開発基盤を確立。
- ・厚労省のプロジェクトであるB型肝炎抗ウイルス剤開発へと展開中。

- ・高分子、界面活性剤研究のシミュレーション基盤としても活用可。
- ・総理府のImPACTプロジェクト「しなやかタフポリマー」にも展開中。



抗ウイルス剤

- ・逆転写酵素阻害剤
- ・カプシド中で作用。カプシド内へ薬剤送達。

◆独創性・優位性

1,000万原子規模の大規模系に対する効率的な自由エネルギー計算は本課題においてのみ可能。汎用アプリであるMODYLASにより様々な問題に展開可。

◆成果の活用・今後の展望

ウイルスに限ることなく、産業的に重要な様々な課題に展開できる。産応協と連携して、さらに産業へと普及。他プロジェクトへも展開。

課題V: エネルギー変換の界面科学

概要

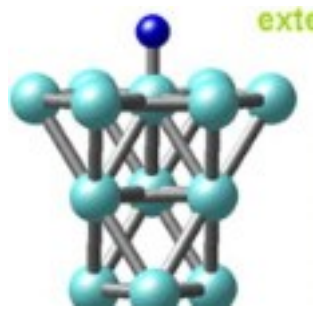
異相界面における化学結合エネルギーと電気エネルギーの変換に関わる学理をシミュレーションにより構築し、21世紀の重要産業である再生可能エネルギー技術開発に資する科学的基盤の充実化を図る。

計算科学の取組

化学反応のシミュレーションに適した第一原理分子動力学を発展させて計算手法の高度化と計算規模の拡大を行い、二次電池や燃料電池におけるエネルギー変換過程の解明を可能にする。電池開発や構造測定に関わる実験グループとの戦略的連携体制をとり、知見の獲得とフィードバックを高速化する。

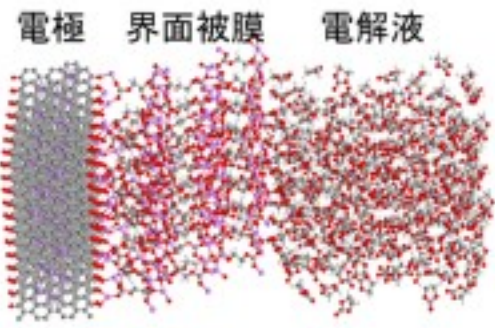
「京」以前

電極や溶液を含まない静的な計算が主流。反応前後のエネルギー差の計算に基づく現象論的な材料探索が多く行われていた



「京」でブレークスルーした計算技術

電極と電解液を含むモデルを用い、電池過程を動的に計算することが可能になった。化学反応やイオン拡散の予測精度が格段に上がり、実験グループとの連携による戦略的な共同研究が可能になった。

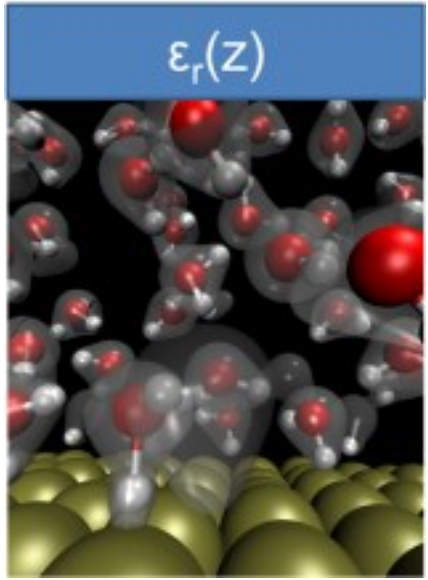


「京」で開発したアプリ・アルゴリズム等の普及

電気化学コンソーシアムなどを通して民間企業の研究者にも普及が進められ、開発の現場での利用が進むものと考えられる。今後、データベース化を進めることにより、アプリだけでなく計算結果そのものの普及も進められるものと考えている。

課題V: エネルギー変換の界面科学

科学的成果



現実的な電極界面模型を用いたエネルギー変換過程のシミュレーションが可能になった。その結果、シミュレーションから電極物質の性質と電極反応の関連が明らかになった。また、シミュレーション結果と実験結果を化学反応論に基づいて詳細に解析することにより、**白金(111)表面上の反応機構**に関する問題を解決することができた。さらに、電流電圧曲線の予測精度が向上した。

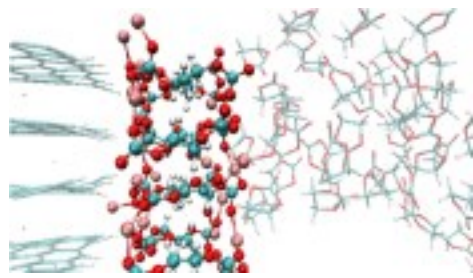
◆独創性・優位性

電極や溶液の片方に焦点を当てた研究は多いが、界面での動的過程を扱った研究としては先駆的。未知の電極物質への適用可能性の面で優位性が高い。

◆成果の活用・今後の展望

本手法を新型電池開発に用いるべく実験との共同研究が進んでいる。電池開発への幅広い活用が期待される。

実用的成果



リチウムイオン二次電池の**電解液の劣化過程**が明らかになり、**添加剤の設計指針**に資する知見が得られた。また、新規電解液のイオン輸送特性や耐性に関する理論的裏付けを与

え、**電解液開発に大きく貢献**した。さらに、電解液が還元分解しそれが凝集して界面保護膜を形成する過程を示すシミュレーション結果も得られ、電池設計の新たな指針の獲得につながった。このように、シミュレーションのレベルが上がり、耐性の向上につながる研究につながった。

◆独創性・優位性

非経験的なシミュレーションを開発指針の獲得につなげた先駆的研究であり、世界的にみてもレベルの高い研究。

◆成果の活用・今後の展望

既存の二次電池研究で培った本手法を次世代二次電池に対して適用し、開発研究への貢献を行うことが計画されている。

3. 課題の達成状況 (1)研究開発目標の達成状況⑤、⑥

課題VI: 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

概要

クラスレートハイドレートは、水と疎水物質からなる結晶であり、**エネルギーの貯蔵・輸送手段**として注目を集めている。また、日本近海の海底にはハイドレートの形でメタンが多量に存在しており、**未来のエネルギー資源**として期待されている。計算機シミュレーションにより、実験的に調べるのが難しいハイドレートの分子レベルの振る舞いを明らかにすることで、今後のハイドレートの産業利用に貢献する。

計算科学の取組

- ・水素ハイドレートの統計力学
vdWP理論の拡張とGCMCの活用。水素分子の多重占有の記述やfilled iceの物性予測が可能に。
- ・メタンハイドレートの分解過程
京による大規模な分子動力学計算。分解過程における泡生成の重要性と溶質効果を解明。
- ・実験家との連携
産総研メタンハイドレート研究センターと共同シンポジウムを開催。

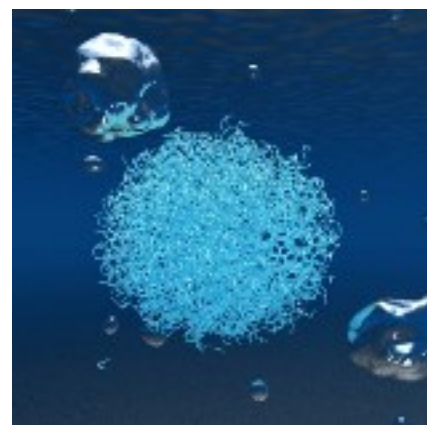
「京」以前

相転移は系が**大規模**に変化する非常に**遅い**過程
↓
にもかかわらず
小さな系(数千分子)
短い(1ナノ秒程度)計算



「京」でブレークスルーした計算技術

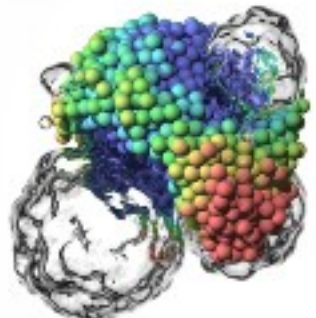
現実に近い、穏やかな条件での分解を再現
・10万分子以上の**巨大**な系
・100ナノ秒を超える**長時間**計算
↓
メタンハイドレートの分解機構を解明
・ 泡の生成による分解の促進
・ 塩やアルコールの効果



課題VI: 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

科学的成果

- ・水素ハイドレートの熱力学的安定性
標準理論であるvdWP理論を拡張。籠の中の分子の多重占有の記述や、filled iceの物性予測が可能に。
- ・ハイドレートの分解
泡生成による分解促進と、大きな溶質効果の存在を明らかに。分解の各過程の自由エネルギーに基づく明快な機構を提示。
- ・速度論的阻害剤
阻害剤がエントロピー的引力によって吸着することを説明。



塩水中の非等方的なハイドレート分解

◆独創性・優位性

クラスレートハイドレートに関する、これまで未解決だった様々な統計熱力学的問題を解決。

◆成果の活用・今後の展望

- ・ 静的物性と動的現象の関係を解き明かす。
熱移動、分子拡散、濃度揺らぎ、核生成
- ・ 複雑な構造のセミクラスレートハイドレートの解析。

実用的成果

- ・水素ハイドレートの熱力学的安定性
実験が容易ではない、非常に高い圧力における熱力学的物性の予測が可能に。
- ・ハイドレートの分解
分解速度に対する様々な分子レベルの機構を解明。海底からのハイドレート採掘や、ガスの貯蔵・輸送過程におけるハイドレート分解の巨視的なモデル作成の助けに。
- ・速度論的阻害剤
アミド基が必ずしも必要でないことが明らかに。より自由な発想による阻害剤の設計へ。

◆独創性・優位性

大規模計算の優位を生かし、実験を強く意識した現実に近い問題設定の分子シミュレーションを実行。

◆成果の活用・今後の展望

- ・ ハイドレートによる水素貯蔵の実用性の検討。
- ・ 泡生成を活用した効率のよい分解プロセスの可能性。
- ・ 高性能な速度論的阻害剤の開発。

3. 課題の達成状況 (1) 研究開発目標の達成状況⑤、⑥

課題Ⅶ: 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

概要

金属系構造材料は、産業や社会基盤を支える材料であり、飛躍的な高性能化のために、性能を支配する「微細組織」(異相界面、転位、粒界、合金元素etc.)の構造や機械的性質を原子・電子まで掘り下げて解明するとともに、ミクロからメゾ・マクロまでマルチスケールで解明し設計する手法の構築を目指す。

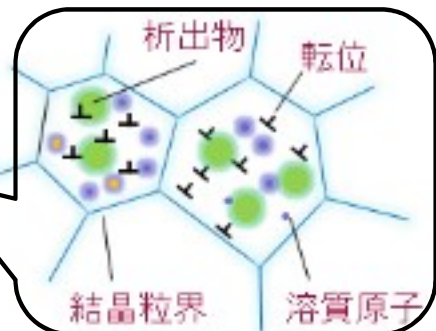
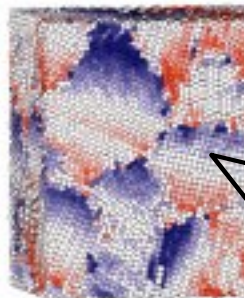
計算科学の取組

微細組織の構成要素の大規模構造(異相界面や転位)の、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を、OpenMXコードを用いて「京」で実行。OpenMXは世界的に金属的な系のオーダーN法計算を実行できる唯一のコード。またQMASコードで局所エネルギー・局所応力解析を行い、掘り下げた分析を実行(東北大の計算機)。こうした第一原理計算をメゾ・マクロのフェーズフィールド法に連結する手法も検討した。

「京」以前

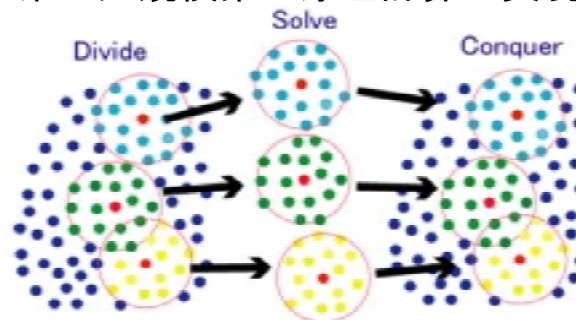
微細組織の異相界面、転位、粒界等の大規模複雑構造の第一原理計算は不可能

微細組織の構成要素

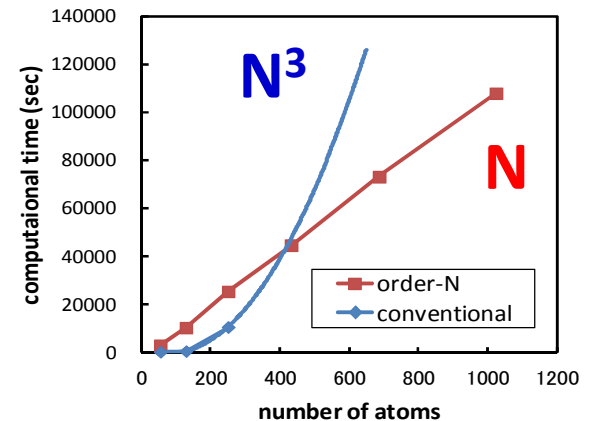


「京」でブレークスルーした計算技術

OpenMXを「京」で用いることで金属系の大規模第一原理計算が実現



クラスタ毎に電子構造を計算し繋げることでオーダーN計算を実現



計算時間は原子数Nに比例、大規模構造になると従来法(N^3)を凌駕

「京」で開発したアプリ・アルゴリズム等の普及

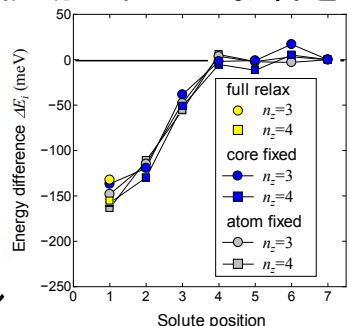
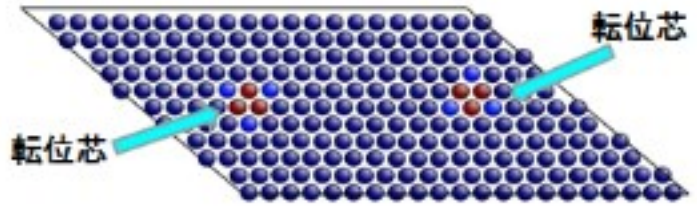
各種ワークショップ、セミナーで普及を推進: OpenMX/QMAS Workshop (2015年5月)、第12回CMSI産学官連続研究会「物質科学計算環境MateriApps LIVE! 講習会」~OpenMXで第一原理計算を始めてみよう~(2016年1月)等。

3. 課題の達成状況 (1)研究開発目標の達成状況⑤、⑥

課題Ⅶ: 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

科学的成果

鉄鋼材料では、異種原子を固溶させ、転位移動の障害にして強化する(固溶強化)。Feの転位(らせん転位)と一連の遷移金属や典型元素などの添加原子との相互作用をOpenMXによる大規模第一原理計算で求めた。相互作用が添加元素の周期表の位置に依存する傾向が見いだされ、各元素のFeの固溶強化能の実験と合致する。転位の移動過程の準安定構造との相互作用も元素に依存し、転位の移動過程にも影響を及ぼすことが分かった。



Fe中のらせん転位芯計算のスーパーセル

Si原子と転位芯の相互作用

◆独創性・優位性

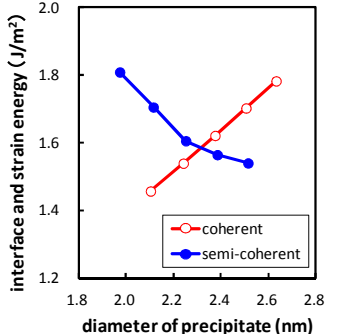
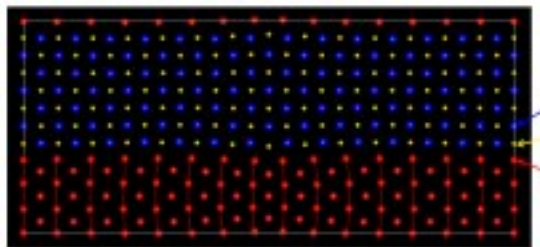
転位と添加元素との相互作用を現実的な転位芯構造の第一原理計算から解明し、添加元素の周期表の位置による傾向を初めて系統的に明らかにした。Feの転位の動き易さへの添加原子の効果を電子構造から解明した価値は、極めて大きい。

◆成果の活用・今後の展望

転位と添加元素の相互作用を電子挙動に基づいて解明する成果は、金属の材料科学を新たなステージに引き上げる。材料設計や希少元素代替の技術に繋げていくことが期待できる。

実用的成果

鉄鋼材料ではTiC等を析出させ、転位移動の障害にして強化する(析出強化)。析出初期には、Fe/TiC界面は整合界面だが、成長するとmisfit歪のため界面周囲の歪エネルギーが増加し、部分整合界面に遷移する。遷移の臨界サイズが設計上重要である。部分整合界面の大規模構造(4319原子/セル)の第一原理計算をOpenMXで実現し、**界面エネルギーと歪エネルギーから遷移の臨界サイズの高精度計算に成功した。**



Fe/TiC部分整合界面の安定原子配列

整合界面(赤)と部分整合界面(青)の比較による臨界サイズの決定

◆独創性・優位性

異相界面は微細組織の主要な構成要素で、格子misfitから大規模構造を扱わねばならない。OpenMXを用いることで初めて金属系の大規模構造の第一原理計算が可能となった。

◆成果の活用・今後の展望

金属系構造材料の微細組織の大規模構造を高精度に解明する道が開けた。さらにフェーズフィールド法等に繋げることでマルチスケール設計技術を確立することが期待できる。

3. 課題の達成状況 (1) 研究開発目標の達成状況⑤、⑥

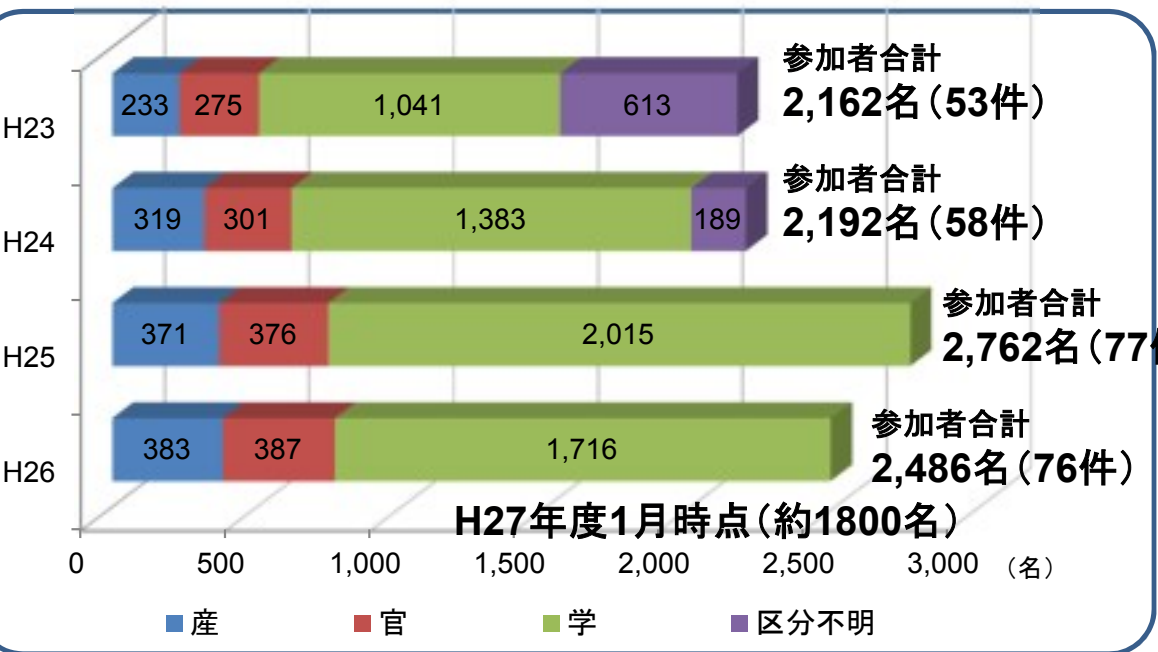
課題Ⅷ：計算科学推進体制の構築

取組	体制構築状況(H28年度以降、継続される体制)
CMSI体制	<ul style="list-style-type: none"> ・分子研：ポスト「京」重点課題(5)、物性研・金研：ポスト「京」重点課題(7)、3研究所+阪大：「科学技術人材育成コンソーシアム」を受託し、連携を継続。
計算資源効率的マネジメント	<ul style="list-style-type: none"> ・CMSIで実施してきた物性研、分子研、金研のスパコン計算資源20%を、上記のプロジェクトに引き続き提供する仕組みを3研究所で継続する体制を構築。
高並列計算研究支援	<ul style="list-style-type: none"> ・CMSIで開発している計算物質科学アプリケーションポータル「MateriApps」の継続運営。物性研はアプリ高並列化支援人員2名を平成27年度より増員。
人材育成	<ul style="list-style-type: none"> ・AICS+5分野で人材育成TFを設置し、平成28年度以降の超並列計算技術に関する教育体制の継続を検討中。実施してきた配信講義を分野全体に展開予定。
人的ネットワークの形成	<ul style="list-style-type: none"> ・元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>の立ち上げと電子論グループ形成に貢献し、実験研究者との共同研究促進。SPring-8、J-PARC、KEK-PFとの連携シンポ実施が、具体的課題に対する勉強会に発展。
研究成果普及	<ul style="list-style-type: none"> ・コミュニティ誌「TORRENT」を11巻発行。特集号として、「ケイサン・ブッシュ・カガク」のムック本出版。CMSIアプリの講習会を各研究所で実施。USB1本で科学技術計算が開始できる「MateriApps LIVE!」を開発し、導入・教育ツールとして配布。
分野を超えた取組の推進	<ul style="list-style-type: none"> ・5分野連携課題としてポスト「京」萌芽的課題への提案を検討中。 ・情報統合型物質・材料研究拠点とマテリアルズインフォマティクスで連携開始。

3. 課題の達成状況 (1) 研究開発目標の達成状況⑤、⑥

課題Ⅷ：計算科学推進体制の構築-1

CMSIイベントのべ参加者数と開催件数推移



<H27年度の新イベント・支援体制>

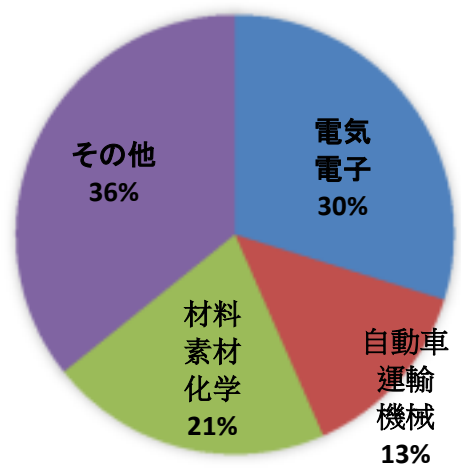
- ・配信講義「計算科学技術特論C」
- ・計算物質科学ムック本制作
- ・MateriApps Live！講習会
- ・物性研新3ペタマシン供用開始(「京」の3/10)

<雇用博士人材のキャリアアップ例>

5年間で40名の博士人材雇用
⇒半数以上がキャリアアップ

- ◆企業： 4名
(アルゴグラフィック・日産アーク・ソフトベンダー、ベンチャー)
- ◆助教 10名
- ◆特任講師 4名
- ◆准教授 4名

平成26年度
企業イベント参加者
383名の業界比率



課題Ⅷ: 計算科学推進体制の構築-2

”MateriApps” アプリ開発者と利用者の共創

- ・物質科学計算アプリを国内外問わず紹介(H28.2時点169件登録)
 - ⇒ベンチマーク可能な検索システムで適したアプリを選択可能
- ・CMSIで公開、維持、管理を支援
 - ⇒利用者への安心感とハイエンドアプリの迅速な普及
- ・有望アプリの講習会開催、マニュアル作成、広報活動実施
 - ⇒開発者と利用者のコミュニティー形成し、発展的アプリ創造可能

MateriAppsの効果

MateriApps LIVE! 開発

- ・物質科学関連フリーアプリ、OS、エディタ、可視化ツールなどが収められたパッケージ。
- ・導入・教育ツールとしての利用に最適。

USBで配布

WEBサイト

物質科学シミュレーションのポータルサイト

3. 課題の達成状況 (3) 成果の利活用

実験との共同Pj開始

- ◆ SIP「次世代パワーエレクトロニクス」
- ◆ 元素戦略Pj<研究拠点形成型>
 - ・磁性材料・電子材料・触媒電池材料・構造材料
- ◆ MagHEM
- ◆ 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ
- ◆ ImPACT「タフポリマー」
- ◆ AMED(名古屋市大医 共同研究)
- ◆ NEDO固体高分子形燃料電池実用化推進技術開発
- ◆ CREST・さきがけ・ALCA(リチウムイオン2次電池)

最先端アプリの公開

- 重点課題で開発した最先端アプリを公開
- ◆ 強相関格子模型ALPS
 - ◆ 第一原理計算RSDFT(密度汎関数)
 - ◆ 汎用分子動力学計算MODYLAS
 - ◆ 量子力学計算FMO公開
 - ◆ 第一原理計算OpenMX(局在基底)
 - ◆ 強相関電子計算mVMC(多変数変分モンテカルロ)

企業との共同研究開始

- <第2部会>
デンソー、豊田中研、神戸製鋼
- <第3部会>
 - ・大日本住友製薬・日東電工・旭硝子・住友化学
 - ・ブリヂストン・三菱樹脂・東洋紡株式会社・東レ
- <第4部会>
 - ・富士フイルム・パナソニック・東京ガス
- <第5部会>
 - ・新日鉄住金・富士通・昭和電工・日産アーク

コンソーシアムなどの設置

- ・超伝導実験・理論フォーラム
- ・トポロジカル物質実験・理論フォーラム
- ・新機能デバイス・高性能材料のための産官学連携フォーラム
- ・電気化学界面SIMコンソーシアム
(企業19社)
- ・FMOコンソーシアム

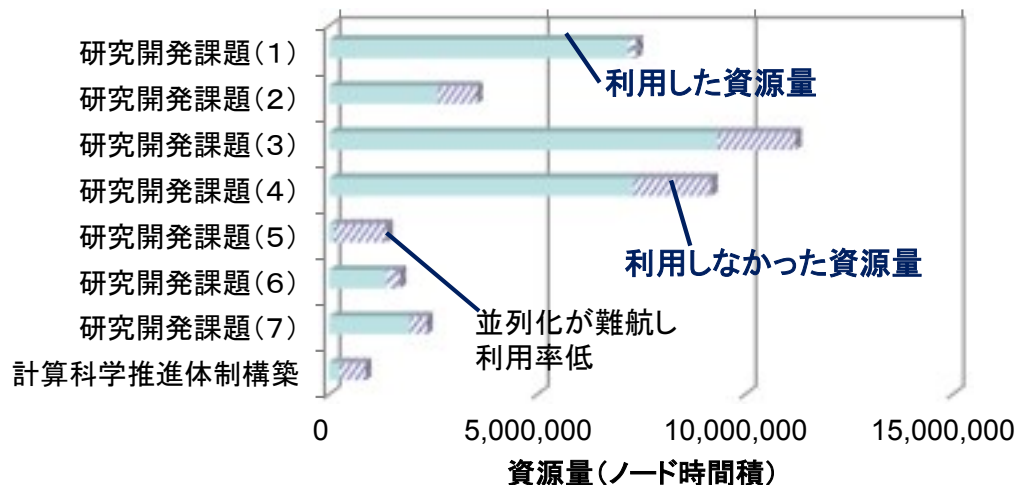
4. 今後の展望

部会	戦略課題	今後の展望
第1部会 新量子相・新物質の 基礎科学	課題Ⅰ：相関の強い量子系の新量子相探求とダイミックスの解明	産業界・実験家フォーラム連携。界面・薄膜非平衡での超伝導・トポロジカル物質設計
	課題Ⅱ：電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開	PHFやMSQMCを適用し、人工光合成触媒の理論設計に繋げる
第2部会 次世代先端 デバイス科学	課題Ⅲ：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	最先端の計算機上で効率的に動作する第一原理計算コードRSDFTのコデザイン推進ナノ界面科学の確立と量子論デバイス・プロセスシミュレータの開発
第3部会 分子機能と物質変換	課題Ⅳ：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	B型肝炎抗ウイルス剤開発へと展開中
第4部会 エネルギー変換	課題Ⅴ：エネルギー変換の界面科学	電気化学コンソーシアムでの活動を通して、アプリの電池開発現場での利用を促進
	課題Ⅵ：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	産業的な現場における分解過程の速度論的モデルの構築に役立たせる
第5部会 マルチスケール 材料科学(H24～)	課題Ⅶ：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	第一原理計算をPhase-Field法に繋げる。材料設計や希少元素代替技術に繋げる。
分野振興活動	課題Ⅷ：計算科学推進体制の構築	HPCI戦略プログラムで培った連携体制で、ポスト「京」重点課題に取り組み

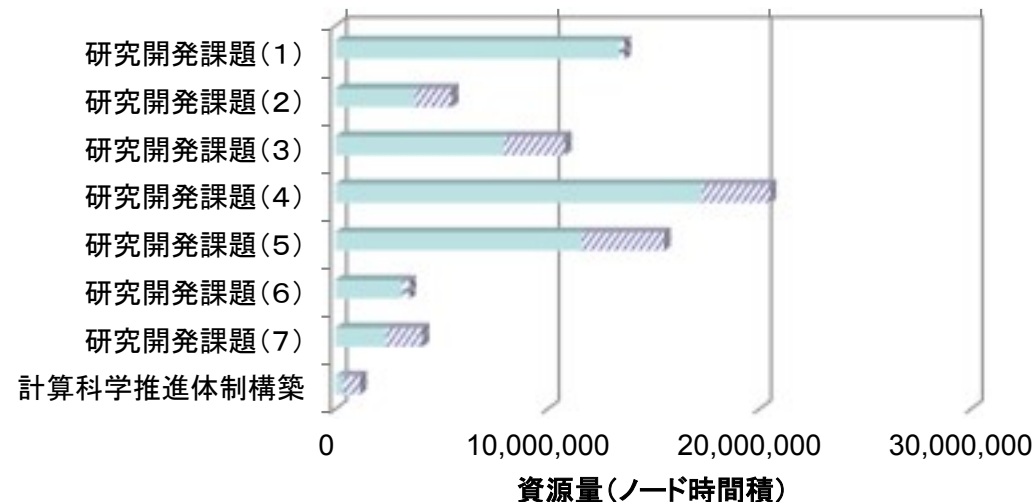
「京」の利用状況（H24年度下期～H25年度上期）

各年度とも順調に計算資源を利用

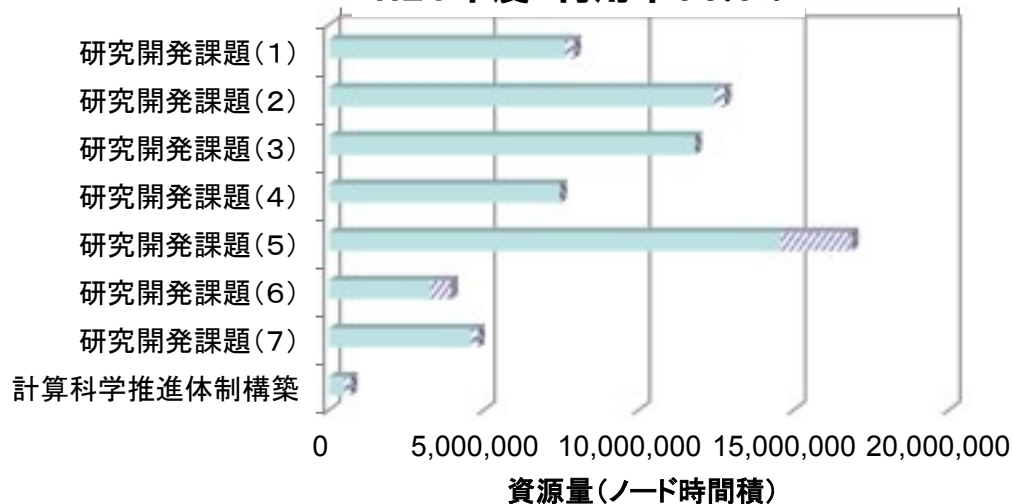
H24年度下期：利用率80.1%



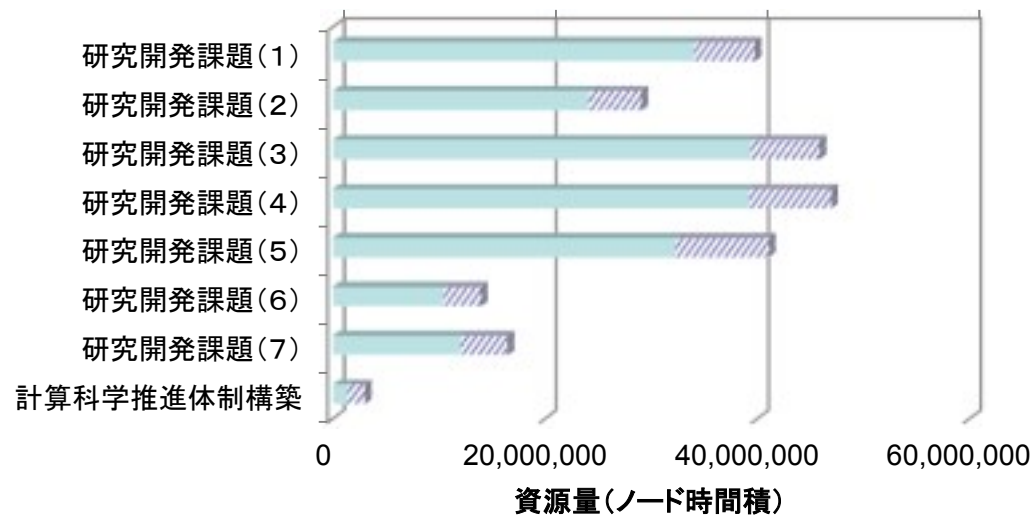
H25年度：利用率80.1%



H26年度：利用率93.9%



H27年度：利用率70.9%（1月末まで）



予算の推移-1

研究開発課題

(単位:千円)

項目	平成23年度	平成24年度	平成24年度 (補正)	平成25年度	平成26年度	平成27年度	備考 (主な用途)
第1部会 課題Ⅰ:新量子相 課題Ⅱ:分子理論	60,000	60,000		59,000	51,120	47,952	
第2部会 課題Ⅲ:電子機能予測	60,000	60,000		59,000	51,660	46,494	
第3部会 課題Ⅳ:ウイルス	60,000	60,000		59,000	52,380	42,583	
第4部会 課題Ⅴ:エネルギー変換 課題Ⅵ:メタンハイドレート	60,000	61,000		53,000	46,800	38,394	
課題Ⅶ:構造材料	0			11,000	16,560	14,904	
全課題共通			15,000				
小計	240,000	241,000	15,000	241,000	218,520	190,327	

予算の推移-2

計算科学推進体制の構築

(単位:千円)

項目	平成23年度	平成24年度	平成24年度 (補正)	平成25年度	平成26年度	平成27年度	備考 (主な用途)
計算資源の効率的マネジメント	20,000	10,000		10,000	7,000	6,300	スパコン借用費
「京」利用に際しての研究支援協力	81,000	81,000		81,000	73,710	70,871	人件費
人材育成	41,000	52,500	10,000	52,500	48,810	44,901	人件費
人的ネットワークの形成	11,000	11,000		11,000	10,080	8,910	イベント開催費
研究成果の普及	10,500	10,500	35,000	10,500	9,450	8,505	アプリ普及経費
分野を超えた取り組みの推進	32,000	39,000		39,000	35,770	30,330	人件費
プロジェクトの総合的推進	57,500	48,530		48,670	38,570	37,575	事務局運営経費、共通 イベント旅費
小計	253,000	252,530	45,000	252,670	223,390	207,392	-
総計	493,000	493,530	60,000	493,670	441,910	397,719	-

まとめ

課題Ⅰ：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

◎大幅に達成（強相関系の第一原理モデリング手法とシミュレーション手法を確立）

課題Ⅱ：電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開

◎大幅に達成（高並列・高精度量子化学計算手法(F12法)を確立）

課題Ⅲ：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

◎大幅に達成（半導体ナノ構造の第一原理計算を実現しゴードンベル賞受賞(RSDFT)。電磁場の時間変動と組み合わせた第一原理動力学計算を世界で初めて実現）

課題Ⅳ：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

◎大幅に達成（クーロン相互作用を高精度に取り入れた最速の分子動力学計算を実現し(Modylas)、他プロジェクトに波及。)

課題Ⅴ：エネルギー変換の界面科学

○着実に達成

課題Ⅵ：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

○着実に達成

課題Ⅶ：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

○着実に達成

課題Ⅷ：計算科学推進体制の構築

◎大幅に達成（物性、分子、材料のネットワーク型コミュニティ(CMSI)を構築し、遠隔講義や多数のイベントで人材育成、若手研究者の交流、実験連携を促進。「京」一般利用課題創出やアプリ普及にも貢献。）

參考資料

課題Ⅲ-2: RSPACE コードの高度化とSiC-MOS界面での伝導計算

概要

SiCパワーデバイスの普及には、Siデバイスに比べ極めて低いSiC-MOSのキャリア移動度を改善する必要がある。第一原理電子状態・伝導特性計算コードRSPACEを駆使し、SiCパワーデバイス用高機能界面をデザインするとともに、計算科学によるデバイスデザイン技術を構築する。

計算科学の取組

- ✓ RSPACEを「京」および「京」と同じアーキテクチャーのFX10用にチューニング
- ✓ 実験(主にSIPの実験グループ)と連携したSiC-MOS界面の欠陥電子状態計算、キャリア伝導特性解析、高機能界面原子構造探索の実施

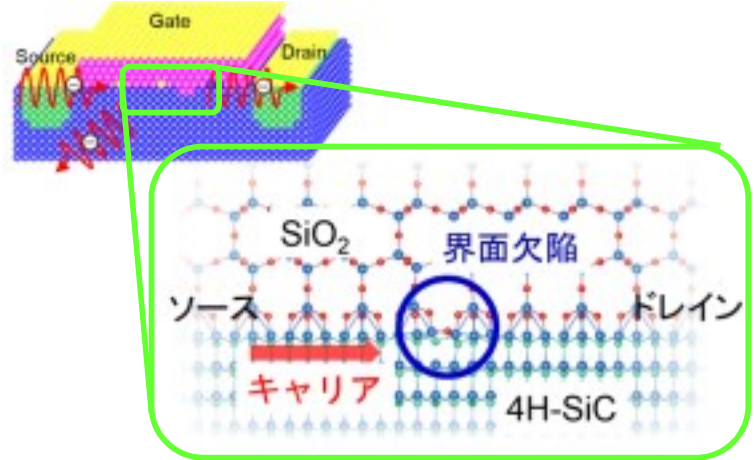
「京」以前

- ✓ グリーン関数の計算コストがボトルネック
- ✓ 伝導特性計算のモデルは、原子鎖や小分子鎖に限定



「京」でブレークスルーした計算技術

- ✓ 数理研究グループと協力してシフト共役勾配法を用いた高速グリーン関数計算法を開発することにより、伝導特性計算モデルを大規模化
- ✓ SiC-MOS界面でのキャリア伝導特性計算を実現し、実験グループとの議論に計算結果を活用



「京」で開発したアプリ・アルゴリズム等の普及

大学院生、企業人が参加するCMDワークショップで、開発した計算コードRSPACEを講義・配布する等の普及活動を実施

課題Ⅲ-3: CONQUESTコードの高速化と科学計算

概要

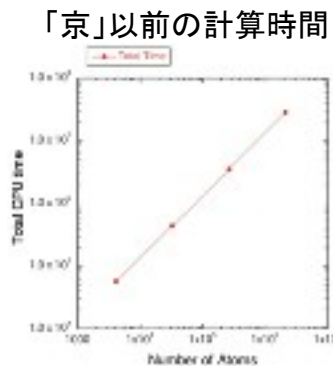
次世代のテクノロジーを支える半導体ナノ構造体に対して、オーダーN法を用いた超大規模第一原理計算を実現することにより、原子構造と電子物性・機能を解明・予測する。

計算科学の取組

密度行列最適化法を用いたオーダーN法第一原理計算において、疎行列の行列積を大規模並列計算で高速に行うことを実現し、計算時間を大幅に短縮。超大規模系に対する構造最適化計算が可能となり、ゲルマニウムの3次元ナノ構造やコアシェルナノワイヤの詳細な原子構造、電子状態を明らかにすることが可能となった。

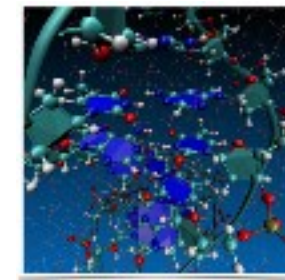
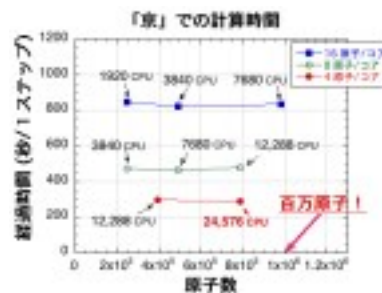
「京」以前

計算時間が原子数に比例するオーダーN法を用いることによって百万原子系の計算が可能。しかし、1ステップの計算時間が2時間程度かかる。



「京」でブレークスルーした計算技術

「京」によって数万から百万原子を含む巨大系に対しても第一原理計算による構造最適化や分子動力学による研究が可能となった。1ステップの計算時間が2時間から5分以内へ。



水溶媒中のDNAに対する第一原理分子動力学におけるスナップショット構造。

「京」で開発したアプリ・アルゴリズム等の普及

開発されたオーダーN法第一原理計算プログラムを一般に公開し、多くのユーザーに用いられることによって、多様な物質・材料に適用されていく。

課題Ⅲ-4: GCEEDコードによる光励起電子機能予測

概要

光と電子の動的相関をより厳密に考慮することによって、従前の光デバイスや電子デバイスとは異なる新奇光機能デバイス設計に繋がる。その基礎理論の開発は不十分であり、特に第一原理計算に基づいた研究はほぼ皆無である。

計算科学の取組

時間依存コーン・シャム方程式を、実空間グリッド上で差分法を用いて解く独自の計算プログラムGCEEDを開発。簡便なアルゴリズムに基づき、特別なライブラリも使用しないために超並列計算に適している。空間グリッド上の膨大なデータ転送がボトルネックとなるが、複数のコミュニケーターを定義し、「京」のアーキテクチャに沿ったプログラムの高速化を実現した。近接場光科学の実験Gと協力し、新奇光機能デバイス設計への展開を継続中。

「京」以前

全系のごく一部を切り出して計算することが限界。ナノメートルサイズでは、量子性が強く、単純なサイズスケールでは理解できない。

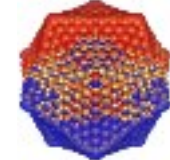


「京」でブレークスルーした計算技術

数～十数nmサイズの実在系ナノ構造体を扱うことが可能。1, 2 nm程度の部分系から外挿していた物性や光励起ダイナミクスを実証。数十～百原子程度が限界であった系が、2千原子程度まで拡大。既存の計算プログラムでは取り扱い不可能な、光・電子動的相関ダイナミクスを露わに記述することが可能となった。



C₆₀アレイの光物性



Au₁₄₁₄

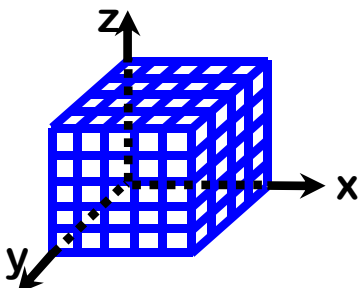
金クラスターLSPRのサイズ依存性解明

「京」で開発したアプリ・アルゴリズム等の普及

GCEEDは機種依存性が非常に低く、「京」以外の汎用大型計算機でも容易に実機稼働する。実験Gと協力し、近接場光励起ダイナミクスを利用した新奇デバイス設計の共同開発を開始済み。また、産業界におけるデバイス開発の時間短縮に寄与できると期待。

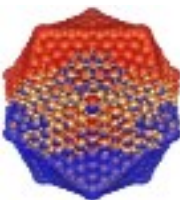
課題Ⅲ-4: GCEEDコードによる光励起電子機能予測

科学的成果



実空間グリッド上で、TDKS方程式を差分法に基づき直接解く。

- ・固有値対角化、FFTは使用しない。
- 超並列化容易
- ・孤立分子系、3D周期系、2D表面・界面問わず計算可能
- ・電場、磁場、電位差等の外場も任意に印加可能



光機能化に重要とされている金クラスターのLSPRのサイズ依存性を解明。モデル系又は小さなクラスターで議論されてきた励起過程を実証。実在系物質としては、世界最大規模。

Au₁₄₁₄

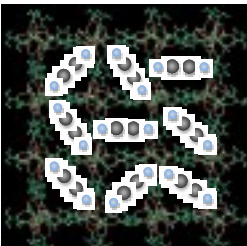
◆独創性・優位性

光と電子の動的相関を露わに取り込んだ光励起電子ダイナミクス法。世界的にも殆ど類似の方法論・計算法が存在しない。

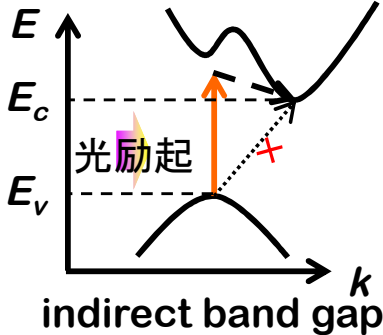
◆成果の活用・今後の展望

双極子近似に基づいて記述されてきた光と物質の相互作用の研究領域において、ナノ光応答理論を確立する。

実用的成果



近接場光を用いた二光子励起ダイナミクス: 高効率・広帯域光エネルギー変換物質設計の可能性



光吸収効率が極端に低い間接バンドギャップ型半導体を、近接場光で“直接的”に励起可能なことをモデル系で実証

◆独創性・優位性

近接場光が持つ二次の高調波電場成分、桁違いに大きな波数成分を利用した光励起電子ダイナミクスとそれに基づく物質の光高機能化。

◆成果の活用・今後の展望

より厳密に光と物質の相互作用の取り扱いが可能。新奇光・電子機能を持ったデバイス設計。例) 二光子励起を利用した高効率・広帯域光エネルギー変換デバイス、間接バンドギャップ半導体(Si、ダイヤモンド)の光高機能化

課題Ⅲ-5: ARTEDコードによるレーザー加工の量子論

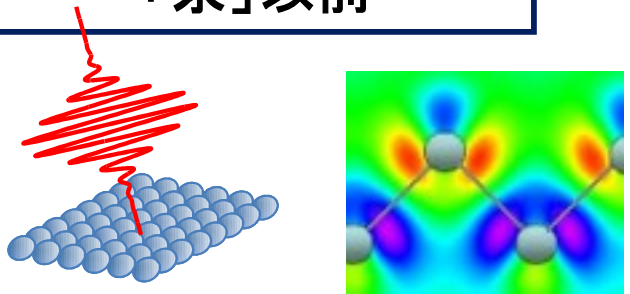
概要

アト秒科学の創出や非熱レーザー加工技術など、光科学技術の先端課題である高強度超短パルス光と物質の相互作用に対して、量子論の第一原理計算による計算科学の取り組みを推進した。

計算科学の取組

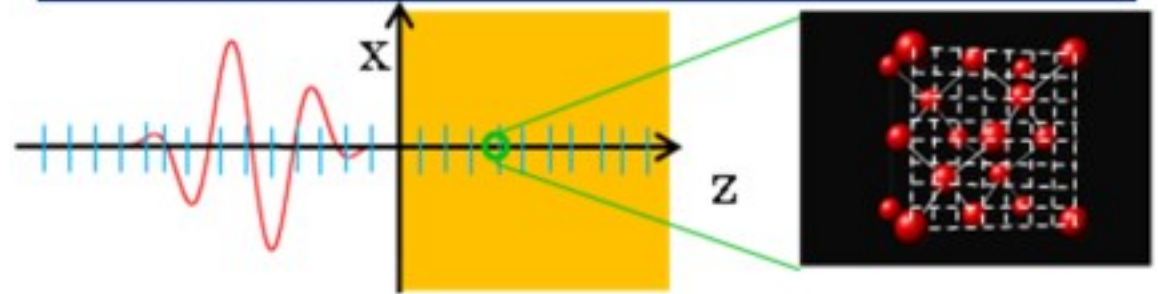
電子ダイナミクスを実時間・実空間で記述する時間依存コーン・シャム方程式と、光電磁場の時間領域差分法(FDTD法)とマルチスケール結合することにより、量子論の第一原理計算から出発して、光と誘電体・半導体の相互作用を記述することに成功した。

「京」以前



「京」以前は、光電磁場の時空間解析と電子ダイナミクス計算は、異なる計算科学の分野であった。

「京」でブレークスルーした計算技術



「京」を用いることで、光が物質中を伝播する様子を、電子に対する量子論の第一原理計算から記述することが可能になり、アト秒科学やレーザー加工への応用が展開した。

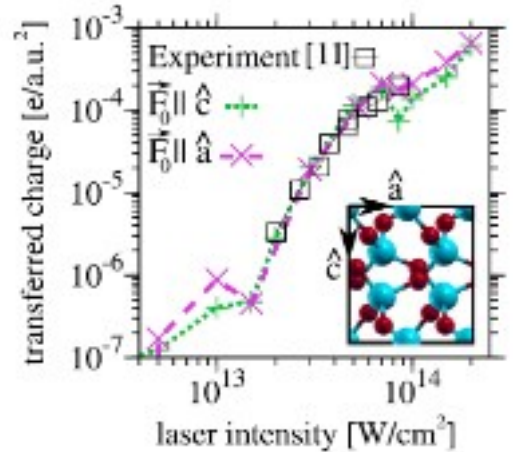
「京」で開発したアプリ・アルゴリズム等の普及

本研究で開発した計算コードARTED (Ab-initio Real Time Electron Dynamics simulator) を今後公開し、実験・企業研究者を含む多様な研究者が利用可能となるよう整備を進める予定である。

課題Ⅲ-5: ARTEDによるレーザー加工の量子論

科学的成果

高強度パルス光をガラスの表面に照射することにより生じる超高速電流の生成メカニズムを第一原理計算により解明。



G. Wachter et.al, PRL113, 087401 (2014).

◆独創性・優位性

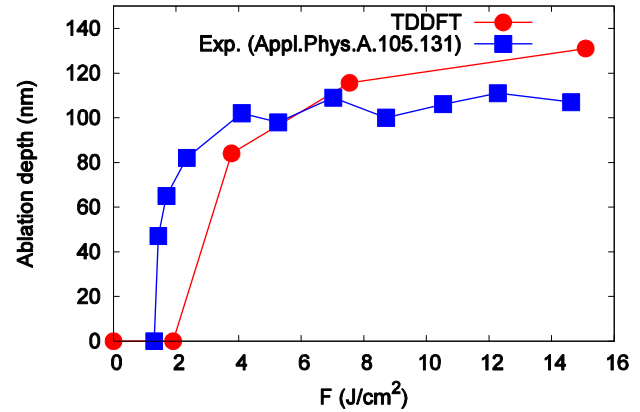
結晶にパルス光電場を印加することにより生じる電子ダイナミクスの第一原理計算コードの開発は、本グループが世界初である。

◆成果の活用・今後の展望

高強度なパルス光と固体の相互作用は、実験研究が活発に展開しており、本計算コードを様々な非線形光学現象へ応用していく。

実用的成果

フェムト秒レーザーパルスの照射によりガラス表面に生じる加工痕(クレーター)の解析に成功。



S.A. Sato et.al, PRB92, 205413 (2015).

◆独創性・優位性

レーザーパルスの電磁界解析と量子論に基づく電子ダイナミクスの第一原理計算をマルチスケール手法により結合することにより、広範な非線形光応答の記述が可能に。このような計算コードは、世界で唯一。

◆成果の活用・今後の展望

フェムト秒レーザーパルスを用いた非熱レーザー加工技術の計算機シミュレーションに応用が期待できる。

第1部会:アウトカム

◆実験・産業界へ波及めざす研究成果・アプリ

◆MACE(階層的強相関電子状態計算法)の普及

- ・制限乱雑位相近似法による第一原理有効模型導出スキーム
- ・種々の有効模型ソルバー

の整備公開、普及。公開ソフト4種。実験研究者、産業界の利用を促進へ
フォーラムでの普及推進

- ・ポスト「京」プロジェクトによる公開・普及へと継承。

◆成果をもとにした実験・産業界との連携

- ・実験研究者とのフォーラム形成、国際連携による実験・計算サイクル形成
- ・解明された超伝導機構をもとにした薄膜、界面機能提案、実証されたトポロジカル新機能
- ・新概念のさらなる展開へと連鎖
- ・産業界とのフォーラム形成(「新機能デバイス・高性能材料のための産官学連携フォーラム」)日立、NEC、東芝など
- ・ポスト「京」超伝導新機能材料研究の中心テーマとして採用され推進

第2部会:アウトカム

◆ 汎用第一原理計算コードRSDFTの公開

- ◆ DFTに基づく第一原理計算コードは物質科学の広範な分野において重要な道具となっている
- ◆ よく利用されるコードの殆どは平面波基底を用いた実装であるが、これは高速フーリエ変換に大いに頼る手法となるため、超並列計算機には不向きであるが、RSDFTは実空間法を採用しているため、「京」全ノードを高い効率で使い切ることができる
- ◆ post-Kにおけるターゲットアプリとして性能評価基準の一つとなっている
- ◆ ソフトウェアとしての2次利用が容易なAPACHE2.0ライセンスでの公開 (ほとんどのフリーな第一原理計算コードはGPL)

◆ 他プロジェクトの実験グループと連携したデバイス機能予測計算

戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)の実験グループ(筑波大・矢野G、産総研・原田G、阪大・渡部G、東大・喜多G)と協力・連携したSiCパワーデバイス用の界面原子構造の探索と高移動度界面のデザイン

第3部会：アウトカム

◆産業界へのアプリの波及

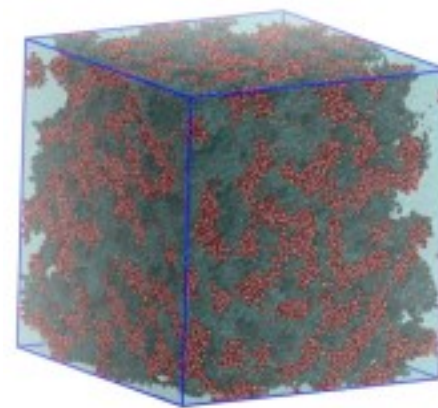
- ・ウイルスの感染経路をシミュレーション
⇒抗ウイルス剤開発の効率化に寄与



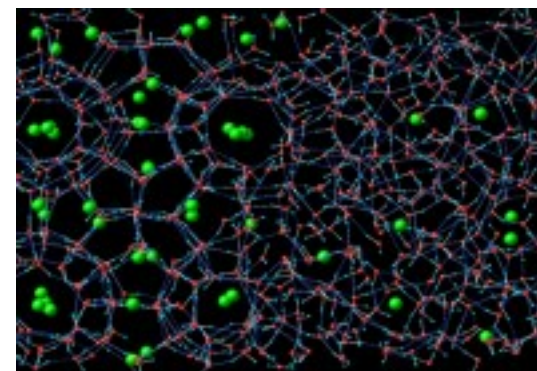
薬の導入

“MODYLAS”“FMO”が最先端研究を牽引
～「京」で公開し産学で活用！～

燃料電池用高分子電解質膜



メタンハイドレートの融解過程



■MODYLASの主な利用先

 大日本住友製薬株式会社：「京」産業利用枠

- 日東電工株式会社：「京」産業利用枠
- 岡山大学大学院自然科学研究科：「京」戦略課題
- ImPACT 東レ、旭硝子、住友化学、ブリヂストン、三菱樹脂 共同研究
- AMED 名古屋市立大学医学部 共同研究

■FMOの主な利用先と利用マシン

 東洋紡株式会社：「京」産業利用枠

その他製薬メーカー（H26年度FMOコンソーシアム発足）

第4部会:アウトカムー1

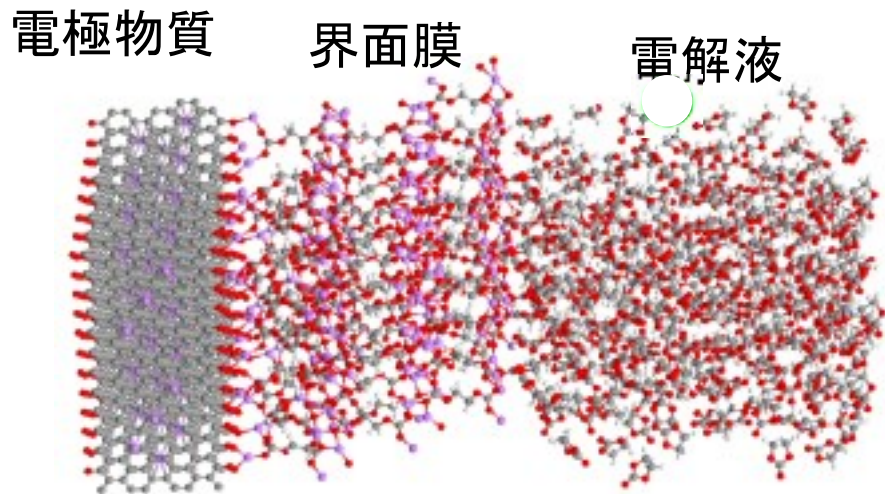
◆産業界への成果の波及

AISTに電気化学界面SIM
コンソーシアム発足(27.4)

研究開発してきた手法を
産業界に展開(H28.3時点19社)
代表 産総研 大谷

企業研究者も参加して推進し、
製品開発を検討中

1. 溶媒と添加剤が界面被膜を形成する
メカニズムを解明



～リチウムイオン電池～

Pj連携

ALCA

触媒・電
池元素戦
略ユニット

CREST
エネルギー
高効率利
用のため
の相界面
科学

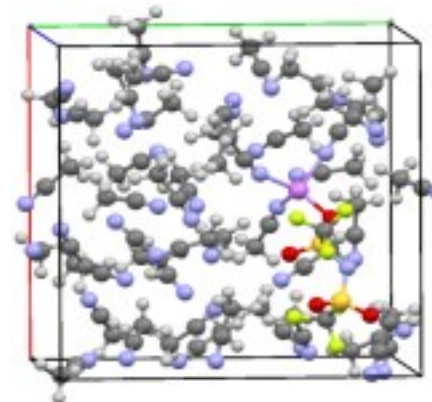
さきが
けエネル
ギー高効
率利用
と相界
面領域

館山、袖山、大谷

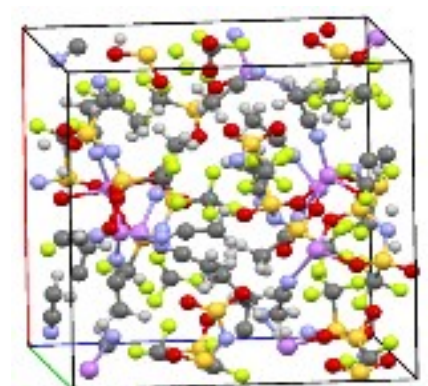
館山

2. 電解液の高濃度化による
イオン伝導度の向上

従来濃度の電解液



高濃度電解液



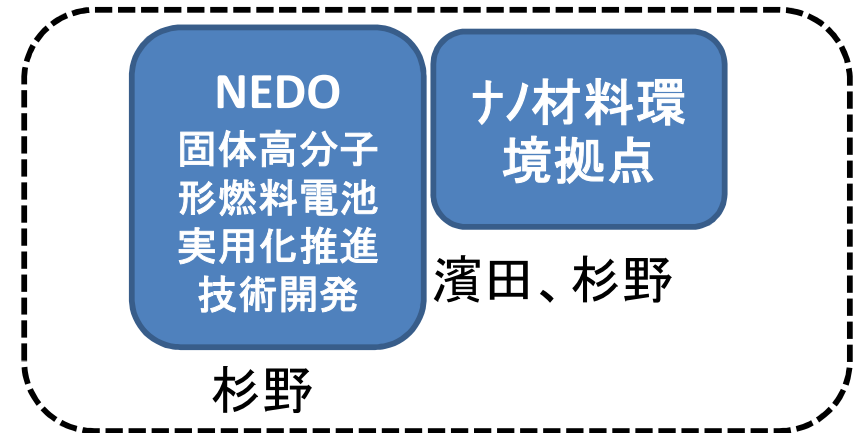
第4部会:アウトカムー2

◆産業界への成果の波及

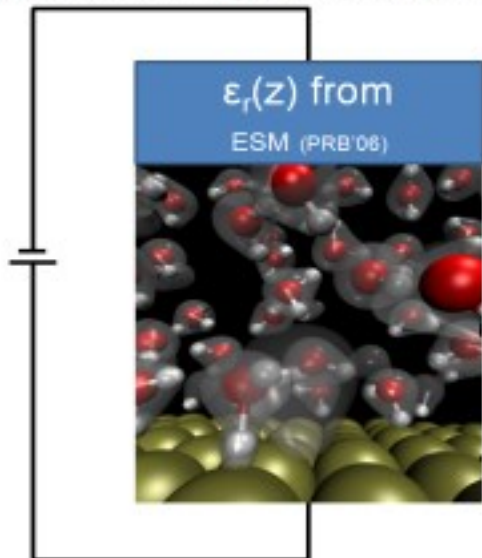
白金触媒での燃料電池反応を計算
⇒反応経路や反応律速段階を解明
⇒燃料電池の高効率化、白金低減化を図る
指針獲得に向けた研究が加速する。
(NEDOメンバー:パナソニック・東京ガス)

⇒平成27年度より実験連携新Pj発足

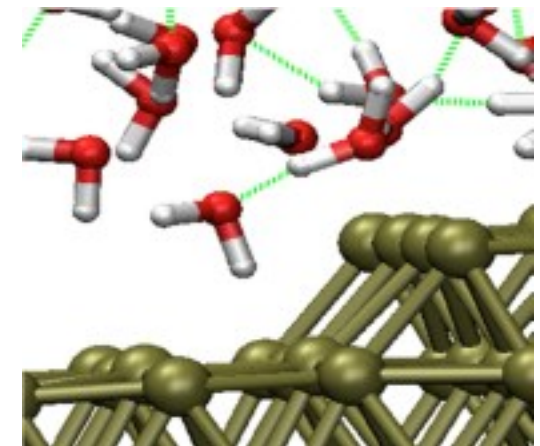
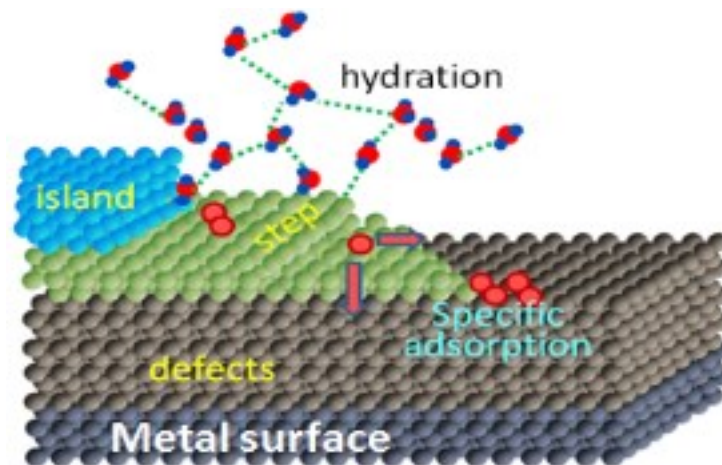
～燃料電池～



ESM (effective screening medium) model (2006)



活性点白金(322面)の水和構造
特異的安定性を発見。活性化の原因を示唆



第5部会：アウトカム

◆産業界へのアプリの波及

第一原理計算ソフトOpenMX

企業・実験研究者・元素戦略PJ等との共同研究により、多方面で活用

◆昭和電工：カーボンナノチューブ：「京」一般利用

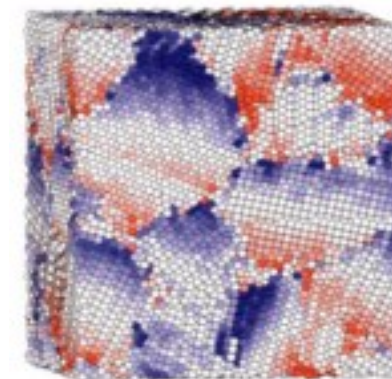
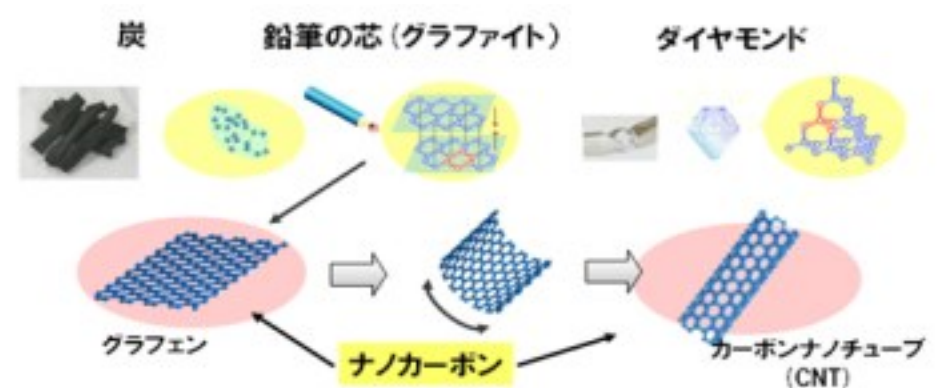
◆富士通：ナノデバイスシミュレーター：FX10

◆新日鉄住金（第5部会）：鉄鋼材料：「京」
（元素戦略構造材料拠点）

◆元素戦略磁性材料拠点：磁石材料：「京」

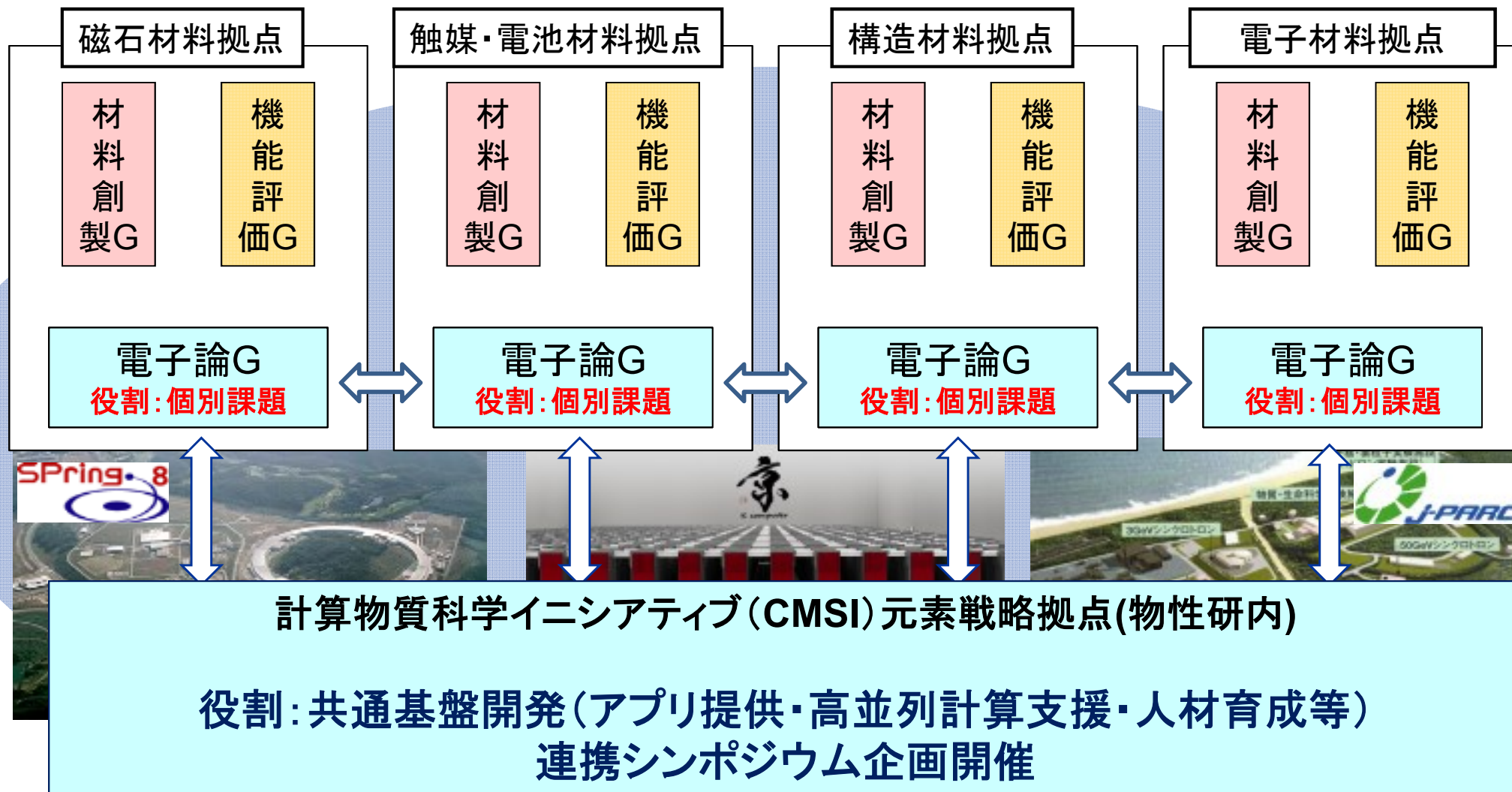
◆日産（アーク）：リチウムイオン電池：「京」
（第4部会）

：その他、「京」一般利用として、コベルコ科研等が利用している。

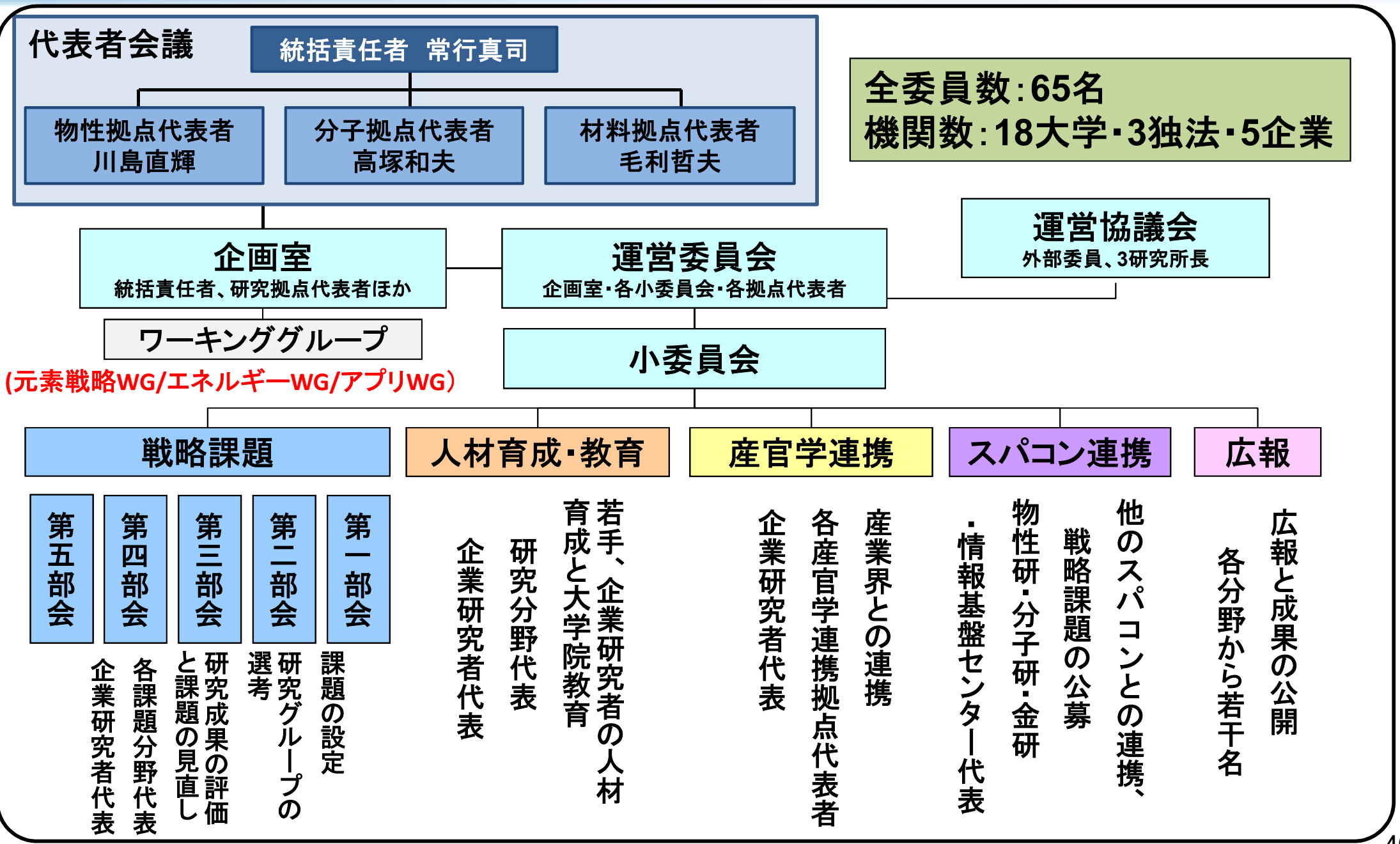


アウトカム(CMSI全体) - 3

元素戦略Pj で物質計算共通基盤開発(H24-33)



課題Ⅷ：研究開発体制



計算資源効率的マネジメント

- ◆ 階層的な計算資源の提供で効果的に分野振興
- ◆ 並列化に応じて計算資源を使い分け、効率的に利用可能

最先端
超並列

「京」

- * 戦略課題が利用
- * 体制構築枠
(一般利用申請準備用)

CMSI神戸

- プレ/ポスト処理システム
- * アプリ講習会にも利用

CMSI(借用)

- 東大情報基盤センターFX10借用資源(256ノード)
- * 京利用準備・超高並列計算

金研

- 金研スパコン20%

分子研

- 分子研スパコン20%

物性研

- 物性研スパコン20%

CMSI・各戦略機関

- ハイブリッド並列計算用PCクラスタ
- 新アーキテクチャトリアル機

各重点課題

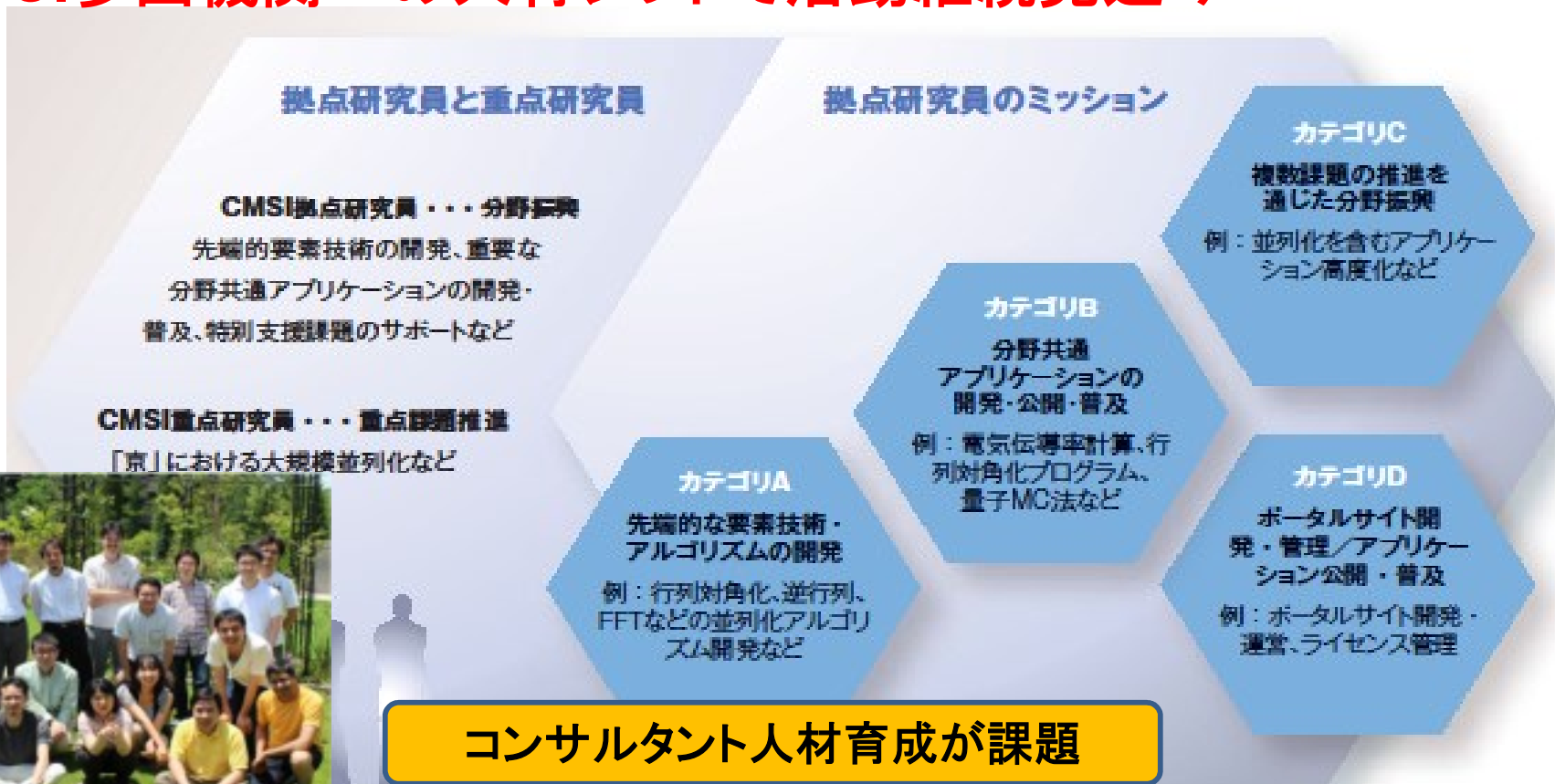
- PCクラスタ
- * テスト計算

高並列テスト・入門

高並列計算研究支援(1)

- ◆課題: 分野として継続的な支援活動必要
- ◆取組: 拠点研究員制度導入⇒振興活動を業務として実施
「京」一般利用支援、アプリ講習会、MateriApps活動

研究所で新規支援人材雇用、ポスト「京」Pj、RISTやHPCI参画機関への人材シフトで活動継続見込み



若手技術交流会でノウハウ共有し高度化スキルをUP



人材育成

配信講義「計算科学技術特論C」実施中。録画ビデオアクセスも好評

【日時】平成27年10月～木曜13:00-14:30

【場所】配信元：大阪大学豊中基礎工G217

回数	講義題目
第1回	ALPS と量子多体問題①
第2回	ALPS と量子多体問題②
第3回	OpenMX とDFT①
第4回	OpenMX とDFT②
第5回	xTAPP をはじめとしたDFT コードとユーザーインターフェース
第6回	可読性と性能の両立を目指して
第7回	ライセンスについて
第8回	アウトソーシングによるシミュレータの共同開発
第9回	feram と強誘電体①
第10回	feram と強誘電体②
第11回	SMASH と量子化学
第12回	MODYLAS と古典MD①
第13回	ソフトウェア工学の視点から(前編)
第14回	MODYLAS と古典MD②
第15回	ソフトウェア工学の視点から(後編)

受講場所

- ◆9大学+AICS+AISTの計15か所に配信
- ◆企業の方にもオープン
- ◆ビデオとテキストはWebにUP
⇒3万件以上のアクセス有！



●平成28年度以降の継続も検討中

◆特論Bは181名（企業11名）参加！

◆多地点配信好評。