

平成24年度成果：研究開発課題（分野2）

資料3

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**」

固体の電子エネルギーを階層的に取り扱うことで高精度計算する手法を開発し、超伝導体等のわずかな構造変化が大きな物性変化をもたらすことを示した。これにより今まで難しかった定量的な物性予測が可能となり、高温超伝導体など新物質・新材料の開発に貢献。

◆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**」

フラレン等の分子間に働く弱い引力を、電子論から精密に超並列計算する手法を開発した。これにより分子集合体の構造を高い信頼性で予測することが可能となり、有機半導体等の新機能分子開発に貢献。

第2部会「次世代先端デバイス科学」

◆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**」(優先課題)

数万原子からなるシリコンナノワイヤーの電子状態を世界で初めてまるごと計算した。これにより、ワイヤー中電流分布の断面形状や結晶方位依存性を解明し、次世代半導体デバイスの性能向上に貢献。

第3部会「分子機能と物質変換」

◆課題4「**全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開**」(優先課題)

1000万原子系を高速にシミュレーションできる高効率の並列分子動力学法プログラムを開発し、電解質溶液中のウィルスカプシド(たんぱく質でできた殻)の丸ごと計算を実現した。これにより、感染の最初の過程であるウィルスとレセプターの結合に際して両者の間に働く力の計算が可能となり、創薬への応用の可能性が高まった。

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」

電池性能向上のボトルネックである電極反応解明のため、実験と同じ電位一定の条件で電極反応を計算する手法を開発した。これにより電流が流れる条件での電極反応シミュレーションが可能になり、白金代替を主目的とした実験との連携開発が加速。

◆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」

分子動力学法を用いてメタンハイドレートの分解の様子を調べた。その結果、出来始めた気泡がハイドレート分解過程に影響を与えることがわかり、海底から気体で効率よく採掘する際の情報として貢献。

◆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」

鉄とチタンカーバイト粒子の界面エネルギーを厳密に計算した。その結果、粒子サイズと界面原子配列や歪量の変化の相関がわかり、鉄の強度や靱性を向上させるための粒子サイズの指針が得られた。

平成25年度計画：研究開発課題（分野2）

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**」

目標：量子多体系の基礎物理を解明し、電子デバイス等の新しい動作原理に結び付ける。

手法：制限RPA法、多変数変分モンテカルロ法、動的密度行列繰込群法、量子モンテカルロ法。

計画：スピン軌道相互作用に基づく新量子相(Ir化合物、マヨラナスピン液体、トポロジカル絶縁体)、超伝導(鉄系、銅酸化物)、量子スピン液体(有機導体)、脱閉じ込め臨界現象、ナノ伝導系の非平衡ダイナミクス、ポンププローブ分光、光誘起相転移、高励起実験の解析

指摘対応：強相関効果系の構造変化を扱う手法について検討を進める。

◆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**」

目標：分子の精密計算と非平衡ダイナミクスの解明により、新機能性分子材料の開発に貢献する。

手法：分子求積MP2法、MP2-F12法。

計画：高次非線形分光法、MC-MOZ法、励起状態計算手法の開発、有機伝導体として期待されるフレンやポルフィリン結晶の微視的構造、希土類クラスター電子状態の解明

指摘対応：研究項目(電子状態精密計算、電子ダイナミクス、揺らぎ)を統合し関係強化を進める。実験や他部会との連携を強化する。

第2部会「次世代先端デバイス科学」

◆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**」

目標：ナノ構造体の量子論に基づいた機能予測で次世代半導体デバイスの設計に指針を与える。

手法：実空間密度汎関数法(RSDFT, RS-CPMD, RSPACE)、オーダ-N第一原理計算CONQUEST。

計画：RSDFTとNEGF(非平衡グリーン関数法)の統合、界面・接合系の科学とその応用(SiC酸化膜、Si/Geコアシェル構造ナノワイヤー等)

指摘対応：実験家や産業界との連携を強化し、デバイステクノロジーとして優先して検討すべき課題の絞り込みを行う。CMSIとしてそのための仕組みづくりを行う。

第3部会「分子機能と物質変換」

◆課題4「**全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開**」

目標:1000万超系の分子動力学計算により、ウイルス感染初期過程の解明を行う。

手法:高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトmodylas、高速量子化学計算ソフトMP2-FMO。

計画:ウイルスカプシドの構造安定性のダイナミクス、ウイルス感染初期過程の分子機構の解明、インフルエンザウイルスタンパク質の阻害剤設計

指摘対応:最終目標の具体化、達成時期の明確化に努める。

第4部会「エネルギー変換」

◆課題5「**エネルギー変換の界面科学**」(課題名変更)

目標:二次電池、燃料電池の界面化学反応の基礎科学を分野連携で解明し、材料設計に活かす。

手法:第一原理分子動力学計算コード RSDFT, RS-CPMD(実空間差分法)、STATE(平面波基底)

計画:燃料電池電極反応の大規模シミュレーションとモデル触媒実験結果との比較、Li二次電池のLiイオンの有機溶媒和、脱溶媒和シミュレーション、元素戦略電池・触媒材料拠点連携

指摘対応:エネルギーWGを立ち上げ、エネルギー問題の俯瞰的把握と対応を強化する。

◆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**」

目標:ハイドレートの相図と生成融解機構を解明し、資源の有効活用と安全な貯蔵に貢献する。

手法:高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトmodylasの熱浴の一部を改変して利用。

計画:大規模系での気泡生成シミュレーション、self-preservation effect(ハイドレート表面の氷の膜による分解抑制)の機構解明

指摘対応:ハイドレート採掘プロジェクトやマクロなシミュレーションとの連携を明確化する。

第5部会「マルチスケール材料科学」(部会新設)

◆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**」

目標:材料特性と微細構造・組織の関連を解明し社会基盤を支える高強度構造材料開発に活かす。

手法:第一原理計算OpenMX、平面波基底PAW法QMAS、混合基底法TOMBO、Phase Field法。

計画:Fe/炭化物界面、界面での水素挙動、転位と添加元素の相互作用、元素戦略構造材料拠点連携

指摘対応:複雑な材料界面のシミュレーションに向けて、マルチスケール計算の戦略を検討する。

平成25年度分野配分枠計算資源量配分（分野2）

	総ノード時間積(ノード数時)	分野内の分野配分枠全体に対する割合(%)	使用最大ノード数(ノード数/job)	最大計算時間(時/job)	最大メモリ量(TB/job)	総ディスク容量(TB)
課題1	10,540,000	20.29	24,577	24	192	650
課題2	5,490,000	10.57	10,000	10	240	20
課題3	7,751,088	14.92	20,000	100	280	360
課題4	10,510,000	20.23	16,384	24	262	221
課題5	8,880,000	17.09	10,000	24	4	61
課題6	3,506,176	6.75	8,192	4	25	100
課題7	4,118,000	7.93	1,000	20	32	40
体制構築	1,160,000	2.23	4,000	10	1	20
合計	51,955,264	100.00	24,577	100	280	1,472

平成25年度重点課題追加配分枠申請資源量 (分野2)

	総ノード時間 積(ノード数 時)	重点課題 追加配分 枠での割 合(%)	使用最大 ノード数 (ノード数 /job)	最大計 算時間 (時 /job)	最大メモ リ量 (TB/job)	総ディス ク容量 (TB)
課題1	11,670,000	16.85	24,577	24	144	650
課題4	10,000,000	14.44	16,384	24	262	221
課題5	14,952,960	21.58	10,000	24	4	60
合計	36,622,960	52.87	24,577	24	262	931

平成25年度計画：推進体制構築（分野2）

主な事柄

- ◆ CMSIの人材育成・教育活動、産官学連携活動と、アプリ普及発展を目的とした「アプリcafé」や広報活動を関連付け、計算物質科学推進体制を総合的に構築する。
- ◆ 物性研(CCMS)、分子研(TCCI)、金研(CMRI)におけるスパコン戦略枠を利用した研究活動と、CMSI神戸における「京」、「FX10」を中心とするアプリ高度化支援機能を連携させ、HPCI利活用者全体のレベルアップを図る。
- ◆ 教育推進機関9大学で実施される教育活動をビデオ配信事業として束ね、計算物質科学教育として定着するシステムを構築する。
- ◆ CMSIの研究活動やアプリ開発状況を「アプリcafé」を通して元素戦略プロジェクトメンバー全体に紹介し、ニーズの吸い上げと課題の抽出を行って、基盤的計算機シミュレーション手法の検討を加速する。
- ◆ 将来スパコン調査研究の活動を通し、物性、分子、材料の計算科学発展のためのハードウェア、ソフトウェアのあるべき姿を検し、分野を超えた計算手法の共有と協働を促進して融合研究の活性化につなげる。