

February 2013

NO. 7

Torrent

10¹⁶が創り出す
新マテリアル

特集：CMSIの研究課題

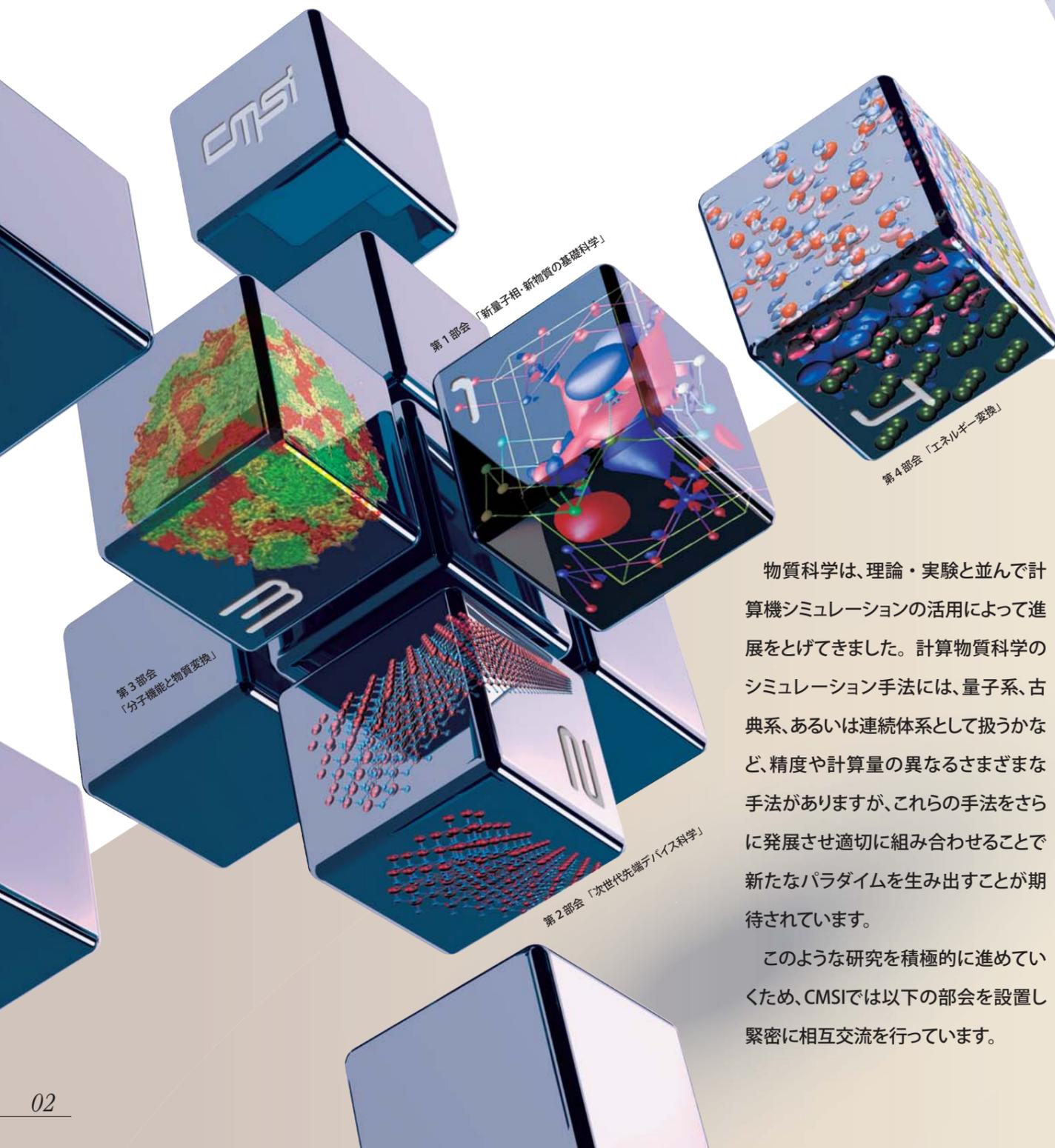
重点課題代表者・特別支援課題代表者に聞く
重点研究員のアプローチ

第3回CMSIポスター賞

特集
Special

CMSIの研究課題

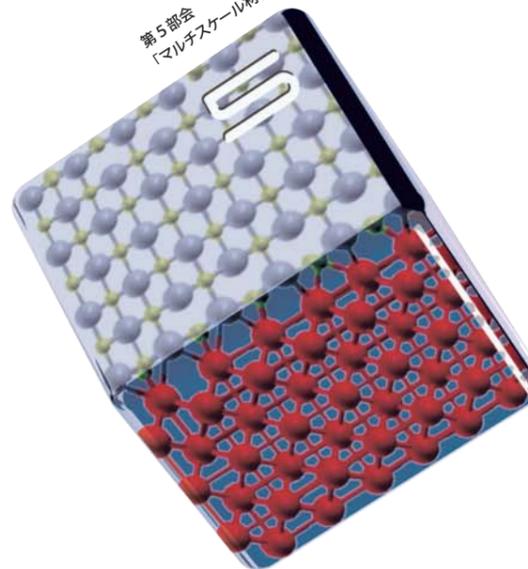
スーパーコンピュータ「京」で切り拓く新たなパラダイム



物質科学は、理論・実験と並んで計算機シミュレーションの活用によって進展をとげてきました。計算物質科学のシミュレーション手法には、量子系、古典系、あるいは連続体系として扱うかなど、精度や計算量の異なるさまざまな手法がありますが、これらの手法をさらに発展させ適切に組み合わせることで新たなパラダイムを生み出すことが期待されています。

このような研究を積極的に進めたいくため、CMSIでは以下の部会を設置し緊密に相互交流を行っています。

第5部会
「マルチスケール材料科学」



第1部会「新量子相・新物質の基礎科学」

近年、鉄や銅の酸化物による高温超伝導体（電気抵抗がゼロになる物質）、トポジカル絶縁体（表面のみが強固な金属となる絶縁体）、フラーレンに代表されるナノ炭素材料など、新奇な性質をもつ物質が発見されています。物質科学の源流におけるこれら新物質の機構解明に取り組むとともに、より高精度な計算手法（モンテカルロ法、MP2-F12法など）の改良・整備に努めています。

第2部会「次世代先端デバイス科学」

今日の電子機器の性能を左右する半導体の細線技術はほぼ限界にきています。次世代の技術として注目されている光デバイス（電気信号の代わりに光を用いた部品）やシリコンナノワイヤ（シリコンでできた直径が数ナノメートルの細線）の実用化をめざし、挙動の解明を行います。

第3部会「分子機能と物質変換」

生体分子を物質としてとらえ、ウイルスの増殖、感染、免疫の機構を分子レベルで解き明かします。これらの知見をもとに、ウイルスを構成するタンパク質と薬剤候補となる物質とのドッキングシミュレーションを通じて、創薬に役立てます。

第4部会「エネルギー変換」

電気自動車等に利用される燃料電池やリチウムイオン電池の大容量化、高寿命化を実現する材料を探索するには、電極の化学反応の理解が不可欠です。また、エコなエネルギー源として注目されているメタンハイドレート（メタンが水分子に取り囲まれた化合物）から効率的にメタンを取り出すには、メタンハイドレートの生成・融解過程を明らかにする必要があります。これらの化学反応過程を計算機シミュレーションにより解明しようと試みています。

第5部会「マルチスケール材料科学」

鉄鋼材料を強靱化するためには、ミクロスケールにおける電子・原子の挙動のみならず、メソスケールにおける内部組織の知見が

不可欠です。また、凝固過程での組織形成が製品のマクロな性質に影響を与えるために、結晶成長の制御も不可欠です。さまざまなスケール域をスムーズに連結できるシミュレーションをめざしています。

CMSIでは、計算物質科学において緊急性の高い「重点課題」と、次の重点課題の候補として位置づけられる「特別支援課題」を設定しています。スーパーコンピュータ「京」の利用に際して、重点課題はCMSIに割り当てられた計算資源を使い、特別支援課題は自ら「京」の一般利用に応募し獲得した計算資源を用いています。これらの課題は、「京」に対して達成した並列化効率、科学的な重要性を考慮して、年度ごとの審査により新規採用、入れ替えを行う予定です。

次ページ以降では、CMSIの重点課題7課題、および特別支援課題のうち「京」の一般利用に採用された2課題を、各課題の代表者に拠点研究員が取材して紹介しています。また、各重点課題で活躍している重点研究員にもご登場いただきました（CMSIに特有の拠点研究員・重点研究員の制度については、Torrent No.3をご参照ください）。

（坂下達哉：東京大学物性研究所 CMSI物性科学拠点研究員）

「京」を用いてシミュレーションを進めているCMSIの研究課題

研究課題	掲載ページ
第1部会：新量子相・新物質の基礎科学	重点課題：相関の強い量子系の新量子相探索とダイナミクスの解明 重点課題：電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子論の新展開 p. 4 p. 6
第2部会：次世代先端デバイス科学	重点課題：密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測 特別支援課題：ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発 p. 8 p. 18
第3部会：分子機能と物質変換	重点課題：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 p. 10
第4部会：エネルギー変換	重点課題：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 重点課題：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 特別支援課題：高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究 p. 12 p. 14 p. 18
第5部会：マルチスケール材料科学	重点課題：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 p. 16

重点課題代表者に聞く

相関の強い量子系の新量子相探索とダイナミックスの解明

話し手： **今田正俊** いまだ まさとし
 東京大学大学院工学系研究科 教授

聞き手： **大久保 毅** おおくほ つよし
 東京大学物性研究所 CMSI物性科学拠点研究員

この重点課題では、どのような内容の研究を行っていますか？

物質の性質は、かなりの部分が電子の挙動によって決まることが多く、その挙動を明らかにする電子状態の計算が、この半世紀でかなり発展してきました。その中で、特に電子間の相互作用が弱い、半導体と呼ばれる系に関しては密度汎関数法を中心に定量的な物性予測がある程度までできるようになってきています。ですが、電子間の相互作用が強い系に関しては、通常密度汎関数法の手法ではうまくいかないことが知られている一方、1980年くらいから、例えば、銅酸化物の高温超伝導体を含む遷移金属化合物、分子性結晶からなる有機導体の系、あるいはf電子系と呼ばれる重い電子の系で、電子間の相互作用が強いことを原因とする興味深い現象がたくさん見つかってきています。

これらの現象は、前世紀に大変な発展をとげた半導体産業と異なる新たな応用の可能性を秘めていると同時に、典型的な量子多体問題として新しい考え方や概念を生み出す可能性があることが注目されています。これを、大規模な数値計算手法を使って、スーパーコンピュータで解明していこうというのが、この重点課題の目標です。

具体的には、新しいタイプの量子相、現実にある未解明の量子相を解明することが目標になっています。新しい量子相の中には例えば、新しいメカニズムに基づく転移温度が高い超伝導であるとか、あるいは量子スピン液体を含む種々の量子液体相があります。さらに

は、相転移という観点から、通常のランダウの相転移の理論の枠組みに従わないような相転移の探索も行っています。また、光誘起相転移であるとか、光電子分光によるポンププローブ法という実験手法の発展により、非平衡の現象も非常に注目を集めていて、これらの平衡から遠く離れた系で起きる現象に関しての基礎学理を明らかにすることも進めています。

この課題には大規模数値計算がどのように生かされているのでしょうか？

われわれが本当に知りたいのは、アボガドロ数くらい多くの粒子からなる系、熱力学極限での挙動ですが、実際の計算はそこまでとどろくことができないため、できるだけ大きな粒子数で計算を行って熱力学極限に収束することを見極めることが、計算の信頼度の確保に必要です。加えて、量子系を扱っていますので、どれくらい低温を扱えるかも大きな問題です。さらに、非平衡の問題であれば、どれだけ長い時間計算できるかも重要な課題になってきます。また、現実の物質の複雑さをシミュレートしようとする、さらに計算の負荷が増えます。より現実に近く、大きなサイズで、低い温度で、長い時間で、計算しようとする、4つの項目すべてが、単独であっても「京」に匹敵するくらいの資源が必要な計算量になっていて、それらを工夫しながら研究を進めることが大事になっています。

現状では、原子数については数百から数十万原子まで、時間ではピコ秒程度までの計

算が行えるようになってきています。電子相関の強い現実の物質の物性を定量的に予測する手法が確立してきたのは、ここ10年ほどのことで、本当に現実の物質に即した予測が可能になってきたという点で、今は、歴史的に重要な時期にさしかかっています。

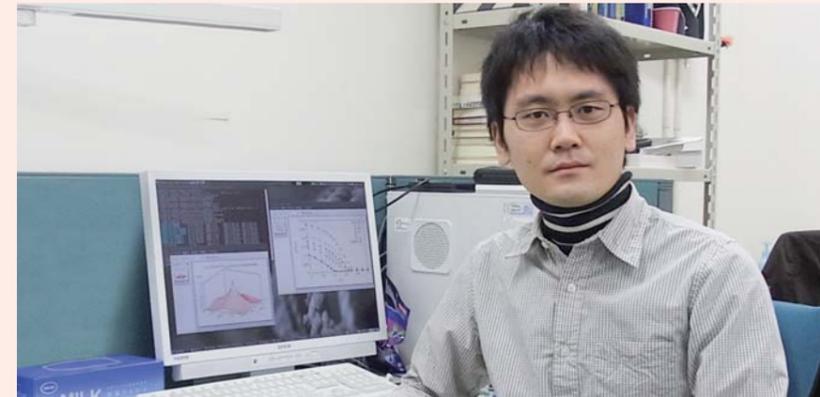
例えば超伝導を例にとると、今、「京」で取り扱えるくらいの大規模な計算で、はじめて現実の物質の超伝導の安定性の議論ができるくらいになってきました。最近のわれわれの研究では、4年ほど前に発見された鉄系超伝導体の物性について、第一原理的な手法でこの物質群の磁性を計算することで、物質によって電子相関の大きさが系統的に変わっていて、鉄系超伝導体の物性の多様さの原因が、主として電子間の電子相関の強さの違いによるということを実証することができました。

この重点課題の成果が社会に及ぼすインパクトは何でしょうか？

この課題の成果としては、高温超伝導体の転移温度の定量的予測、および、未解明の超伝導機構の解明や、新奇の量子液体の機構の解明、量子相転移の新しい理論的基礎を通じて、新機能物質を探索・開拓すること等を期待しています。また、非平衡ダイナミックスの研究から、スイッチング素子等を例とするような、量子効果を活用した新機能デバイスの設計指針も提案したいと考えています。

電子状態を計算し、物質設計、物性予測に役立てていくというのは、説明の必要がないくらいに社会的に影響のある問題で、半導

変分モンテカルロ法による量子スピン液体状態の解明



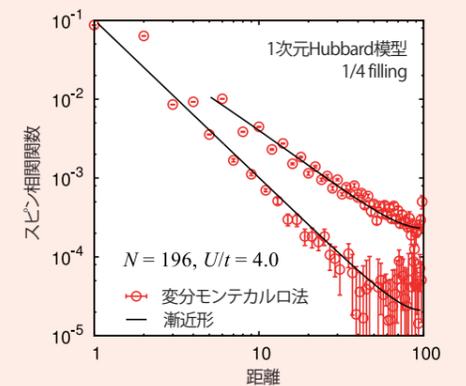
森田悟史 もりた さとし
 東京大学大学院工学系研究科

体の素子、デバイスの問題は言うに及ばず、20世紀以降の産業革命の多くが、マイクロな物質の性質の理解なしには発展させられないものになってきています。新しい産業を生み出していくうえでの理論的なサポートをするという点で、この重点課題の成果は、超伝導を含むエネルギー問題、微細素子のデバイス等の今後の産業にとって、重要な役割を果たしていくでしょう。

また、新しい量子相や新現象を知ること、今まで知られていなかった自然の構造や法則が明らかになります。歴史を振り返ってみると、素粒子物理、生物、化学等の他の分野に物性物理の新奇概念が与えてきた影響は大きく、そのような新奇概念がスーパーコンピュータを中心とした大規模計算によって、これから明らかになってくる可能性は高いと期待しています。さらに、直接隣接する学問分野だけではなく、概念上の新しい発見、解明は、人類の資産としての文化的な価値があるという点で、社会への大きな貢献と言えるかもしれません。

強相関電子系は、固体中の電子がクーロン斥力によって強く相互作用を及ぼしあっている系である。強相関電子系では、超伝導や量子スピン液体といった非常に多彩な現象が発見されており、基礎物理学的な研究対象としてだけでなく、新現象・新機能を利用した次世代デバイスへの応用の可能性が注目を集めている。強相関電子系のシミュレーション手法として、厳密対角化、量子モンテカルロ法、密度行列繰り込み群などが提案されているが、われわれはより大きく多様な系を取り扱って、高精度な計算が可能変分モンテカルロ法に着目し、その開発と応用を進めている。

私はCMSI重点研究者として、スーパーコンピュータ「京」における多変数変分モンテカルロ法プログラムの最適化と、これを用いた量子スピン



1次元Hubbard模型におけるスピン相関関数の計算例。数値計算の結果が、1次元特有の量子揺らぎが大きい液体(朝永ラッティンジャー液体)の理論に従う曲線とよく一致していることがわかる。

重点研究員のアプローチ

液体の研究に携わってきた。プログラム
 の計算アルゴリズムを全面的に見直し、
 最終的に約60倍の計算速度改善、約2万
 ノードで90%以上の並列化効率を実現し
 た。この高速化と並列化により、量子ス
 ピン液体などの複雑な計算が現実的な
 実行時間で可能になりつつある。精度に
 関しても、1次元系において厳密な理論と
 一致する結果が得られることを確認した。

量子スピン液体は、競合する相互作用
 (幾何学的フラストレーション)と量子揺
 らぎの効果により絶対零度でも磁気秩序
 せず、液体のようにスピンの揺らいで
 いる状態である。わずかな外力で状態の
 制御が可能のため、新たな磁気素子への
 応用の可能性を秘めている。正方格子
 上の J_1 - J_2 Heisenberg模型は、この量子ス
 ピン液体状態が実現すると考えられて
 いる典型的な系である。波動関数を一般
 化し、対称性から基底状態に期待される
 量子数への射影を入れることで、スピン
 ギャップの開いたスピン液体状態が再現
 可能であることを、われわれは明らかに
 した。今後の課題として、現実物質の第
 一原理有効模型における量子スピン液
 体状態の解明をめざしている。

電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子論の新展開

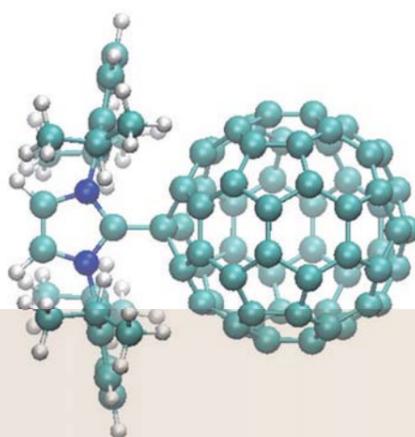
話し手：天能精一郎 てんのう せいいちろう
神戸大学大学院システム情報学研究所 教授

聞き手：米原丈博 よねはら たけひろ
東京大学大学院総合文化研究科 CMSI分子科学拠点研究員

重点課題の概要

米原 現実の化学現象を予測、理解し、その制御につなげることをめざす理論分子科学の研究では、(1) 現実的なサイズの分子系・物質系への適用が可能で、(2) 簡便性と高精度な予測性を備えた計算手法の開発はきわめて重要です。実験に対し理論側が信頼性のあるレファレンスデータを提供するという大きな意義もっています。電子状態を主体とする理論物質科学においては、電子相関と呼ばれる電子同士の多体相関の記述が量子予測の鍵になります。まず、重点課題についてのご紹介をお願いします。

天能 重点課題の目的は、「京」コンピュータでなければ解けない問題にチャレンジし、社会的にも意義の大きな研究成果をあげることです。ガウス型基底関数を使う分子の電子状態計算のコードは非常に複雑で、「京」を使いこなすだけでもさまざまな技術が必要です。現在、F12理論が超並列実装され、ナノ炭素材料などのプロダクションランが行われていますが、ミッションの後半にかけては、有機ELや人工光合成での励起状態を含む材料設計や、希土類の代替物探索を可能にすることによって、他部会への学問の流れをつくるのが重要だと考えています。



IDipp-C₆₀のF12計算。福井謙一記念センターの永瀬茂教授との共同研究。

米原 重点課題のテーマを掲げられた経緯について教えてください。

天能 物質設計などの応用分野で主に用いられてきたのは密度汎関数法ですが、物理的に欠けているところがたくさんあります。分子科学分野で発展してきた摂動論や結合クラスター理論を「京」コンピュータで走らせることにより、これまでとは本質的に異なる物質科学をめざせないかというのが動機です。

成果と今後の展望

米原 最近の具体的成果について、ご紹介いただけないでしょうか。

天能 F12法で用いている分子求積法は超並列計算に向いており、これまでハイブリッド

並列化を進めてきました。これにより、数十万CPUコアでも非常に高い実行効率を引き出すことができるようになりました。また、分子軌道計算に不可欠な積分の実行効率が問題でしたが、これも求積法を用いたコードのSIMD化を行い、有用な計算手法に発展させています。

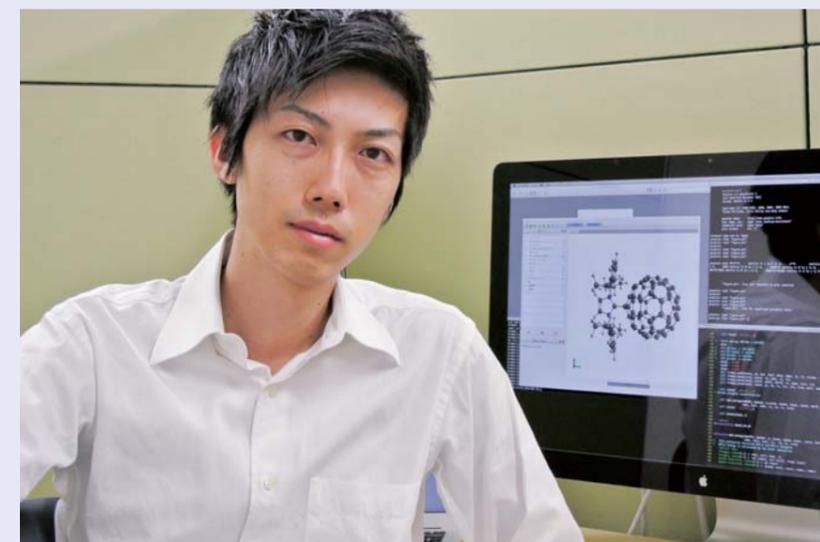
米原 化学においては、電子状態を含む分子構造に関する正確な知見に加え、しばしば、反応動力学の微視的情報も求められます。ご自身の研究技法を反応動力学に適用していくことの可能性、その際の課題、解決のイメージ等について、お聞かせ願えないでしょうか。

天能 低励起状態に関しては、ポテンシャル面と非断熱結合の行列要素を注意深く計算することにより、何が起きているかを知ることがおおよそ可能です。それを「見てきたかのように」定量化するためには反応動力学が必要ですが、一般に興味深い現象は多自由度ダイナミクスであるので、電子状態計算とは分離することができないと考えられます。動力学の技術が電子状態理論に取り入れられる発展が望ましいと思います。

計算物質科学の魅力

米原 若い世代(大学生や大学院生)に向

有機伝導体の結晶構造と分子間相互作用を大規模計算で求める



大西裕也 おおにし ゆうや
神戸大学大学院システム情報学研究所

け、分子科学や計算物質科学の魅力、科学における計算機の有用性に関するアピールをお願いいたします。

天能 現実の物質科学を理論計算で予測できること、それに向かってボトムアップでチャレンジする研究分野であるということが魅力です。長い間、大型計算機を使うよりも基礎理論の発展のほうが大きなブレークスルーをもたらすと考えてきました。しかしながら、近年の超並列計算環境のスケールを考えると、スパコン利用は科学技術計算では大きな優位性になってきていると思います。分子科学で発展してきた高精度な量子化学理論と「京」コンピュータを組み合わせることで、物質科学においてこれまでは見えなかった本質が今後明らかになっていくはずですよ。

重点研究員のアプローチ

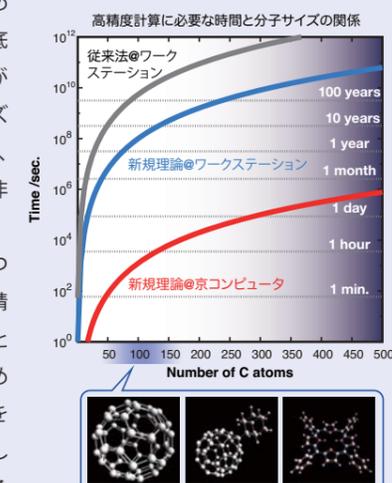
法)である。図に示したように、この新規理論と大規模並列実装によって、フラレンなどの巨大な分子の高精度な計算が可能となった。

私は現在、さらなる高精度化をめざして高次の摂動項を取り込んだ露わに相関した電子状態理論の開発を行うと同時に、すでに実装されているMP2-F12法を用いて、有機伝導体として有望なフラレン誘導体やポルフィリンからなる分子性結晶の微視的構造とその決定因子を解明する研究を行っている。

有機伝導体は分子の特性と同様に結晶構造の制御によっても効率が向上することが明らかになっているが、結晶構造と密接に関係する分子間相互作用を実験で正確に求めることは困難なため、これを大規模計算によって正確に見積もることで、より高性能な分子の設計に有用な知見を与えたい。

原子や分子に関わる化学現象の理論的解明を目的とした計算化学は、高精度化と大規模化をめざして発展を続けており、ごく小さな分子ならば、精緻な実験と同等の精度で計算できるようになった。分子軌道法に基づいて高精度な計算を達成するためには、高精度な理論と同時に大きな基底関数を用意する必要がある。しかしながら、高精度な理論では基底関数のサイズの5乗以上で計算コストが増大するため、数十原子からなる分子の高精度計算は非常に難しい。

この問題を解決するアプローチは2つある。1つは、より少ない基底関数で高精度な計算を可能とする理論を開発することである。もう1つは、超並列計算機のための並列実装を行い、大規模分子の計算を可能とすることである。この両者を達成したものが、本課題で開発されているGELLANプログラムに並列実装された露わに相関した2次の摂動論(MP2-F12



新規理論の超並列実装により、有機伝導体分子の高精度計算が可能になった。

重点課題代表者に聞く

密度汎関数法による ナノ構造の電子機能予測

話し手： 押山 淳 おしやま あつし
東京大学大学院工学系研究科 教授

聞き手： 吉澤香奈子 よしざわ かなこ
東京大学物性研究所 CMSI物性科学拠点研究員

課題の内容・目標

この重点課題の目標は、「数万から数十万原子群から構成されるナノ構造体に対する密度汎関数理論による第一原理計算を、最先端のスーパーコンピュータで実行可能にする高速計算技法を確立し、それによりナノ構造体の原子・電子構造とデバイス特性、さらには構造体生成の機構を明らかにすること」です。より基礎的な問題に挑戦するCMSI第1部会と連携しつつ、基礎科学の知識を実際のテクノロジーに適用するのがCMSI第2部会の中のこの重点課題の役割です。つまり、第一原理計算を量子シミュレーションやデバイスシミュレーションなどのTCAD (Technology Computer Aided Design) に役立てる課題ということです。

具体的な計算手法としては、実空間密度汎関数法RSDFTやオーダー N 法第一原理プログラムCONQUESTを2本の柱として研究開発を行っています。RSDFTは、実空間に格子を導入し、各電子軌道、電子密度、ポテンシャルなどの諸量を格子点上で計算し、Kohn-Sham方程式を解くため、平面波基底を用いた密度汎関数法と比べ、すべてのCPU間の通信が必要になる高速フーリエ変換(FFT)が不要です。また、波動関数に対して非周期系・周期系などの任意の境界条件を設定することができます。

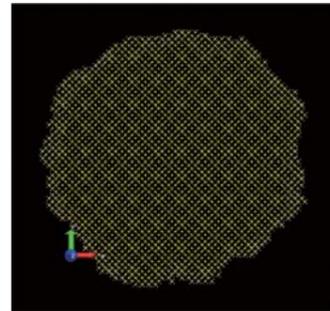
CONQUESTは、Kohn-Sham方程式の固有波動関数を求める代わりに、一体の密度行列を求めます。通常の計算方法では、原子数 N に

対して必要な演算量は N^3 に比例しますが、 N に比例するオーダー N 法を用いることにより、数万、数十万原子以上を含む超大規模系に対する第一原理計算が可能になるのです。

現状

RSDFTを超並列マルチコア・アーキテクチャのコンピュータに対して最適化し、スーパーコンピュータ「京」上で全体のリソースの70%を用いて行ったシリコン・ナノワイヤの10万原子計算において、実効性能3.08ペタフロップス(実行効率43.6%)というパフォーマンスを達成しました。これにより、ハイ・パフォーマンス・コンピューティングに関する国際会議SC11において、ゴードン・ベル賞(実効性能部門最高性能賞)が授与されました。ただし、「京」の70%を占有しないと数十万原子に対するシミュレーションは難しいことから、現時点ではRSDFTは数万原子の計算に適していると言えます。また、他の手法だと多大な計算時間を必要とする数千原子の計算の系も、RSDFTの高効率並列計算により、比較的容易に扱えます。

RSDFTにより、数万、数十万原子サイズのシリコン・ナノドットにおける電荷注入エネルギー、シリコン・ナノワイヤの電子状態、炭素ナノチューブとシリコン界面の相互作用、薄膜上のシリコン版グラフェンである「シリセン」

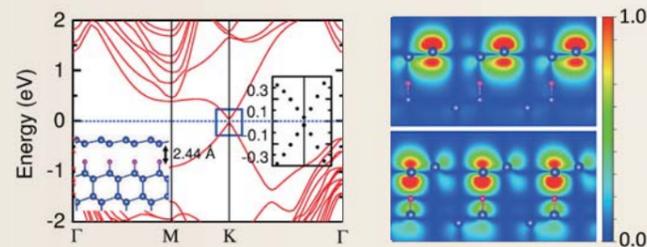


直径10nmのシリコン(Si)ナノワイヤの断面図。ワイヤ作成プロセスで生じる側面の原子スケールのごぼこをモデル化した。全体で1万4336原子系の電子状態計算が行われた。

の構造などが明らかとなりました。また、大規模な第一原理密度汎関数計算を可能にするだけでなく、汎関数の改良にも取り組み、ハイブリッド交換相関エネルギーを導入し、バンドギャップ問題などを改善しました。

期待される成果

半導体デバイスの微細化が限界に近づいている一方で、量子効果を利用したナノスケールのデバイスの研究が進められています。第一原理計算手法を可能な限り高速化

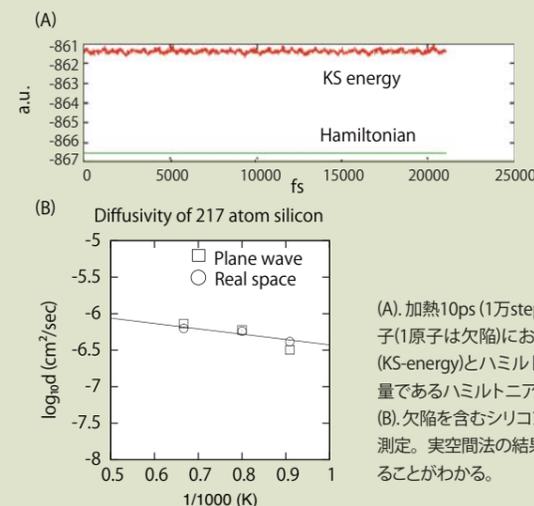


蜂の巣構造をもつシリコン単原子層(シリセン)のバンド構造とフェルミ準位付近の軌道の密度分布。Si(111)面上の水素処理により、安定なシリセン膜が形成され、フェルミ準位付近にディラック・コーンが出現することが、RSDFT計算で示された。

し、ナノ現象を支配する量子シミュレーションができれば、新しいデバイスの設計と指針が得られます。具体的には、次世代デバイスの起爆剤となるナノドット・ワイヤの構造的安定性と電子機能予測、次世代デバイス・ナノ接合部の電子、熱、原子輸送の量子論構築とデバイス特性の解明、ポストスケール時代のデバイス・シミュレーター基盤技術の構築、などの成果が期待できます。

社会に及ぼすインパクト・貢献

日本の半導体産業を活性化させるためにも、第一原理計算を半導体シミュレーションに役立て、デバイス物質機能の予測、新機能材料、新ナノ構造の検索と提唱へと展開することが重要です。また、RSDFTやCONQUESTのスパコン上での高速化は、スパコンを利用するためのソフトウェアの開発につながります。ただ、ハードだけが進化しても、それを有効に利用できるソフトがなければ高速演算を行うことができません。スパコンの進化とともにソフトも進化する必要があり、本課題は日本のスパコン技術の進歩、伝承に貢献するものと期待されています。



(A). 加熱10ps (1万step)、平衡化20ps、測定20psのシリコン217原子(1原子は欠陥)におけるシミュレーションのエネルギー汎関数(KS-energy)とハミルトニアン振の舞い。温度は1250K。保存量であるハミルトニアンは一定。
(B). 欠陥を含むシリコン結晶の拡散係数。1100K、1250K、1500Kで測定。実空間法の結果は、平面波基底での計算結果を良く再現することがわかる。

重点研究員のアプローチ

実空間密度汎関数法に基づいたCar-Parrinello分子 動力学法の開発



小泉健一 こいずみ けんいち
東京大学大学院工学系研究科

Car-Parrinello (CP)分子動力学は1985年、物理分野を母体として誕生し、以来、その有効性を化学、生物分野まで広げながら発展してきた。この方法は量子論に基づいているため、化学結合の組み替えを必要とするシミュレーションを可能にする。し

かし、計算時間の問題から現実的なモデルを用いた計算は難しい。固体表面の状態を精度良く再現するには1000~1万原子のシミュレーションを行う必要があり、これには超並列コンピュータの利用が必須になる。このような

環境によく対応した実空間密度汎関数法(RSDFT)コードをベースにしたCP法を開発することにより、計算効率の飛躍的な向上をめざしている。

その第一段階として、安定した時間発展が可能なプログラムを作成することができた。現在、216原子サイズのシリコンを用いた50万ステップに及ぶ計算が安定して作動することを確認している。さらに、機能を付加し実際の物理量を算出することが可能となった。例えば、シリコンの拡散係数の値については、高温状態で平面波基底の結果をうまく再現できた。低温状態の精度についても確認中である。

東京大学物性研のスパコン上では、1000原子の測定で並列化効率が48%を超えている。しかしながら、高速化はまだ十分といえず、特に「京」での最適化が遅れている。分子動力学に用いられているルーチンの多くは並列化が十分ではなく、ここは未開拓の部分である。これから高速化を行ってきたい。

重点課題代表者に聞く

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

話し手： **岡崎 進** おかざき すずむ
名古屋大学大学院工学研究科 教授

聞き手： **榮 慶丈** さかえ よしたけ
名古屋大学大学院理学研究科 CMSI分子科学拠点研究員

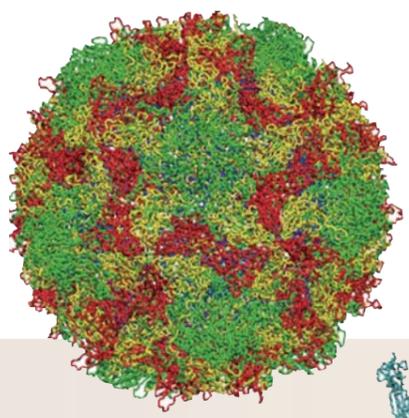
なぜ京コンピュータを用いてウイルスのシミュレーションを行うのでしょうか？

これまで分子科学の分野でよく行われてきたタンパク質のシミュレーションは、単一のタンパク質やそれにリガンドを加えたもの、もしくはせいぜい数個のタンパク質複合体を対象としたシミュレーションでした。そうではなくて、われわれはもっと多くのタンパク質が集まってはじめて生命活動としての機能をもつような巨大な系に挑戦したかったのです。そして、そのような巨大な系のうち、われわれはウイルスカプシドを選択しました。

ウイルスカプシドはウイルスの基本構成単位であり、水分子を含めた全原子モデルで表すと約1000万原子となります。この1000万原子系のシミュレーションを行うためには、京コンピュータのような高い計算能力をもつスーパーコンピュータが必要不可欠なのです。

京コンピュータを使うため、どのような工夫等が行われてきたのでしょうか？

タンパク質を対象としたシミュレーションでは、長距離力を厳密に求めることはとても重要です。長距離力を厳密に求める代表的な手法としてエwald法があります。この手法は高速フーリエ変換(FFT)を必要としますので、並列可能なノード数は200からせいぜい500と



小児マヒウイルスとCD155レセプタのD1、D2ドメイン。溶媒である水分子は図から除いている。1気圧、37℃。

限られ、これにより系の適用範囲は原子数十万程度です。そこでわれわれは、2つの工夫を行いました。

1つは、並列計算に適したアルゴリズムの導入です。これは高速多重極展開法(FMM)と呼ばれ、8万ノードをこえる京コンピュータクラスの並列度でも、効率の良い並列化が可能です。

もう1つは、京コンピュータのハードウェアに合わせたプログラムのチューニングです。特に大規模な並列処理を行うデータの簡便化、3次元トラスに合わせた通信処理、メモリとのデータのやり取りを減らす工夫(オンキャッシュ化)、SIMD化などに取り組みました。

これらのチューニング作業は、理研や富士通の計算機科学に精通した方々との密な交流によってはじめて可能となりました。その結果として、われわれのプログラム(Modylas)は

実用の汎用プログラムであるにもかかわらず理論ピーク性能の41.1%、実際の計算所要時間は、MD計算1ステップあたり5ミリ秒を実現しています。現在は引き続きチューニング作業も行いつつ、自由エネルギーなどの熱力学量を見積もるために必要な機能の拡張などに取り組んでいます。

本研究課題の成果は、分子シミュレーションの分野やウイルス学の分野、さらに一般社会などに、どのような波及効果が期待されますか？

ウイルス学の分野からみたわれわれの研究は、抗ウイルス剤などの創薬につながるかと考えています。細胞膜内のレセプタとウイルスの親和性をシミュレーションにより解析し、その原理を示すことで、阻害剤として働く新規分子の提案などを行っていく予定です。そのほか、ウイルスと抗体との親和性、人工ワクチンなどさまざまな研究テーマを考えています。これらの研究テーマは、一般社会からみれば直接人々の健康に関わってくる重要なテーマと言えます。

一方で、分子シミュレーション分野としては100万原子をこえるような大規模なシミュレーションが普通にできるようになるでしょう。そして、それによって得られる膨大なデータを取り扱う手法や熱力学量の解析方法などがより発展していくのではないかと思います。大規

重点研究員のアプローチ

分子動力学計算を用いた自由エネルギー計算



藤本和士 ふじもと かずし
名古屋大学大学院工学研究科

模系は、生命科学だけでなく化学や材料の分野にも豊富な研究課題があります。例えば、新しい材料開発で期待されている高分子の研究などです。これまで計算化学の分野ではターゲットにできなかったさまざまな高分子の研究が今後行われていくでしょう。

最後に、今後の展望について聞かせてください。

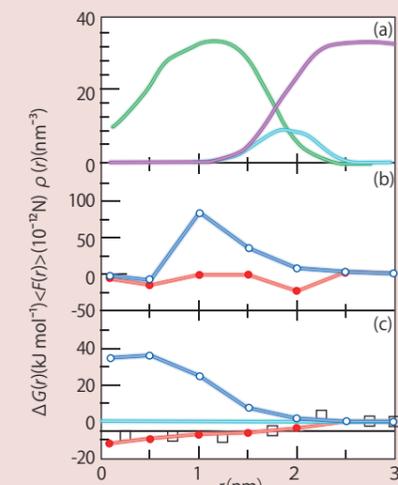
1つは、われわれのプログラムの普及です。今後、大規模系のシミュレーションを望む人たちへプログラムを提供する準備を現在行っています。もう1つは、より厳密な大規模系の分子論の研究です。ウイルスをはじめとした生命科学、化学、材料などの分野での大規模系のシミュレーションを行っていきます。われわれはこれらの現象について、物質を支配する原理により厳密に説明していくことをめざしています。

フィールドを計算した。その結果を図に示す。図(b)のメタンの平均力を見ると、 $r=2$ nm付近において大きな引力が働いており、この力によって、メタンがミセル内に取り込まれることがわかった。一方で、水分子は $0.5 < r < 2$ nmの範囲において、斥力が働いており、ミセル内に取り込まれない。平均力を積分した自由エネルギープロフィール図(c)を見ると、メタンはミセル中に障壁なく取り込まれ、局在化することなく動き回っている。また、水分子はミセル内において不安定であるため、水分子のミセル内への取り込みは行われなことがわかる。

このように、自由エネルギープロフィールを求めることにより、結合の位置、その強さを解明することができる。今後、ウイルス/レセプタ系に適用し、ウイルス-レセプタの結合自由エネルギーを計算することにより、その分子論を明らかにしていきたい。

界面活性剤の凝集体であるミセル水溶液における可溶化、物質の細胞膜透過、ウイルスカプシドとレセプタとの結合等は、それぞれの分子の分子間相互作用により引き起こされる。このような物質の透過や結合を物理化学的に理解する上で、その自由エネルギーを計算することは大変に有効な手段である。

われわれはウイルスカプシドとレセプタとの結合を分子論的に明らかにするために、分子動力学計算を用いて、ウイルスカプシド-レセプタ間の自由エネルギープロフィールを計算することをめざしており、そのためのプログラムを開発している。このプログラムを用いて、実際にドデシル硫酸ナトリウム(SDS)ミセルへのメタン分子と水分子の自由エネルギープロ



(a) SDSミセルの数密度プロフィール。— 疎水基、— 親水基、— 水。(b) メタン(●)および水(○)にかかる平均力。(c) メタン(●)および水(○)の自由エネルギープロフィール。— は以前のわれわれの結果、□は松林らの計算結果。

重点課題代表者に聞く

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

話し手： 杉野 修 すぎの おさむ
東京大学物性研究所 准教授

聞き手： 城野亮太 じょうの りょうた
東京大学大学院工学系研究科 CMSI分子科学拠点研究員

燃料電池分野の現状と課題

城野 スーパーコンピュータ「京」は約8万3000ノードからなる超並列計算機ですので、より現実に近い環境を扱うことができるようになりますが、その一方で、今までのモデル計算では見えなかった問題が浮上するということもあるかと思えます。燃料電池の分野では、方法論についてどのような問題があるのでしょうか。

杉野 大規模系を直接計算することができるようになったおかげで、電極界面を露わに取り扱うことができるようになりました。ここで重要なことは、電極界面での化学反応をシミュレートする際は、通常の溶液中の反応と異なり、電圧が印加されたことによる電場の効果を考慮する必要があります。しかし、これまで分子が置かれている現実的な環境の構築についてはあまり注意が払われてきませんでした。とくに電極界面における電圧一定のシミュレーション技法は、実デバイスの界面で起きている現象の解明には欠くことができません。

われわれのグループでは電圧を一定に保ったシミュレーションを行うESM (Effective Screening Medium)法を開発し、これまでに多くのシミュレーションパッケージに組み込んできました。統計量を計算するための他の技法との組み合わせにより、電圧印加時の電極界面のさまざまな物理量を計算することが可能となっています。

城野 ESM法によって、はじめて電極界面を正しく表現できるようになるということですね。

燃料電池で用いられている電極界面に関して、今どのような解決すべき問題があるのでしょうか。

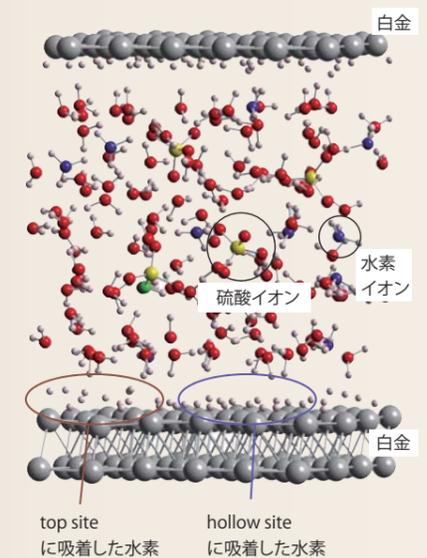
杉野 ひとことでは、白金代替の元素戦略です。しかし、これを実現するのは簡単ではなく、実際に起きている現象を計算によって再現し、反応機構を理解したのち、代替金属を提案するというプロセスを経なくてはなりません。水素分解を行う白金電極表面の反応は、電気化学実験によって詳しく調べられており、われわれの計算の精度を検証するのに最適です。予備計算から、水分子を白金表面から1ナノメートル程度まで配置することによってバルクと表面近傍の両方の水の性質を再現できること、100ピコ秒以上のシミュレーションを行うことによって水素結合の組み替を観測できることを確認してきました。これらの知見をもとに「京」を用いた計算から、これまでに開発してきた方法論によって電極界面のさまざまな物理量が計算可能であり、かつ精度よく再現することを示そうと考えています。

実験科学者との連携

城野 「京」を使うことによってどのような物理量が計算可能になるのか、という視点は、燃料電池に限らずさまざまな分野で重要です。5年後、10年後に「京」を多くの研究者が身近に使えるようになったとき、新たに方法論の開発から始めるのではなく、いきなりサイエンス・テクノロジー指向の研究が開始できる

ように体制を整えるというのは、実験科学者自身が計算を始めるようになった現在、環境整備として重要な仕事だと思います。白金代替は元素戦略プロジェクトの中でも重要な研究課題ですが、CMSIでの連携体制はどのようになっているのでしょうか。

杉野 計算によって実験現象を精度よく再現できることを示すには、実験科学者とのコミュニケーションが欠かせません。また、白金代替へのアイデアは、CMSI内だけで考えるよりも、さまざまな意見をもとに設計するほうが効率的だと考えています。今後は、企業の研究者との交流や元素戦略プロジェクトとの連携を定期的に行うことで意見交換をしていく予定です。



白金電極表面における水素分解反応シミュレーションのスナップショット。ESM法によって電圧を印加した環境でのシミュレーションが実現し、これによってはじめて現実的な水素分解反応を再現することができる。

水と金属電極界面での反応を 大規模計算で解明



木崎栄年 きざき ひでとし
大阪大学大学院工学研究科

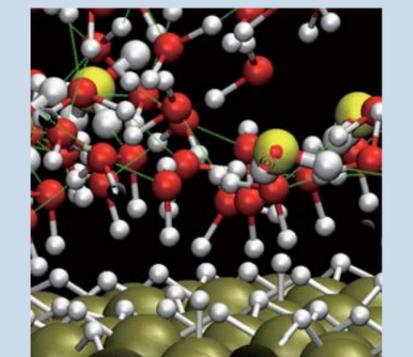
城野 最後に、今後の展望について聞かせてください。

杉野 界面系は今後、放射光・レーザー・中性子などによる大型実験や、界面に敏感な測定が次々に行われ、静的な原子構造や動的過程が詳しく明らかになろうとしています。その結果、例えば微視的電気化学という分野が発展し、それが新しい融合科学領域を生み出し、さらに予想もつかなかったような応用につながっていくと思っています。理論も、励起・非平衡・超高精度な領域に踏み込まなければ、実験を説明できなくなるのではないのでしょうか。計算理論やコンピュータの発展・アルゴリズム開発が、さらに重要になります。

重点研究員のアプローチ

あり、複雑な水の構造と電極界面の影響を取り入れた反応シミュレーションが行われてきた。これにより、ヒドロニウムイオン H_3O^+ から白金電極に電荷が移動して水素原子として白金上に吸着する過程（水素発生反応の第1段階であるVolmer過程）が再現され、 H_3O^+ と金属表面間の相互作用や、水の挙動、電位がそれに与える影響を解明し、水素発生反応メカニズムを解明する重要な手がかりを与えている。

しかしながら、従来の電極界面のシミュレーションでは、計算資源の制限から周期境界条件によるスーパーセル依存性が残っている。また、無数に存在する準安定な水の配置を統計的に十分サンプリングし、多数の反応経路について電極電位や電極金属依存性を調べるためには、膨大な計算が必要となってくる。そのため、どうしても大規模高速並列計算が必須となる。そこで、われわれは「京」を用いて、より現実的なモデルを構築し、燃料電池電極反応の全容解明をめざしている。



水/Pt(111)電極界面モデル。Pt(111)表面 $3 \times 2 \times 3$ ユニットセルを用いて32分子の水を含んでいる。プロトンが1つ水和している。

量子力学に基づく第一原理シミュレーションは、近年その手法の飛躍的な進歩によって、基礎物質科学の分野におけるさまざまな現象の解明に大きな役割を果たしてきた。最近では、電気化学反応過程に対する第一原理シミュレーション手法も急速に進歩している。従来の電気化学反応の実験研究では反応素過程を直接目で見るができなかったため、反応物と生成物について反応速度論的な考察を行うことで反応機構が議論されてきた。しかし、第一原理シミュレーションの急速な進歩により、反応の素過程を原子レベルではじめて直接調べることが可能になり、電極界面での反応の素過程の追跡、それらの電極電位依存性や電極金属依存性についても調べられるようになった。

例えば、水と金属電極との界面での反応は燃料電池の研究分野で非常に重要で

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

話し手：田中秀樹 たなか ひでき
岡山大学大学院自然科学研究科 教授

聞き手：河津 励 かわつ つとむ
金沢大学大学院自然科学研究科 CMSI分子科学拠点研究員

水素ハイドレートとメタンハイドレートとはどんなものですか？

ハイドレートというのは、高圧環境などで水分子と他の気体分子が合わさって構造をつくったものです。水素ハイドレートは氷の中に水素が入ったものですが、温度や圧力によって籠状のクラスレートハイドレートという構造をとったり、普通の氷のすき間に水素が入るような構造をとったりします。中に入る水素の量も条件によってさまざまです。

メタンハイドレートは最近よくTVなどで耳にしますが、メタンのクラスレートハイドレートです。水分子の籠にメタンが入っているような

構造をしています。実際にはメタンがないと水だけでは籠構造はできません。

今はどのくらい研究が進んでいるのですか？

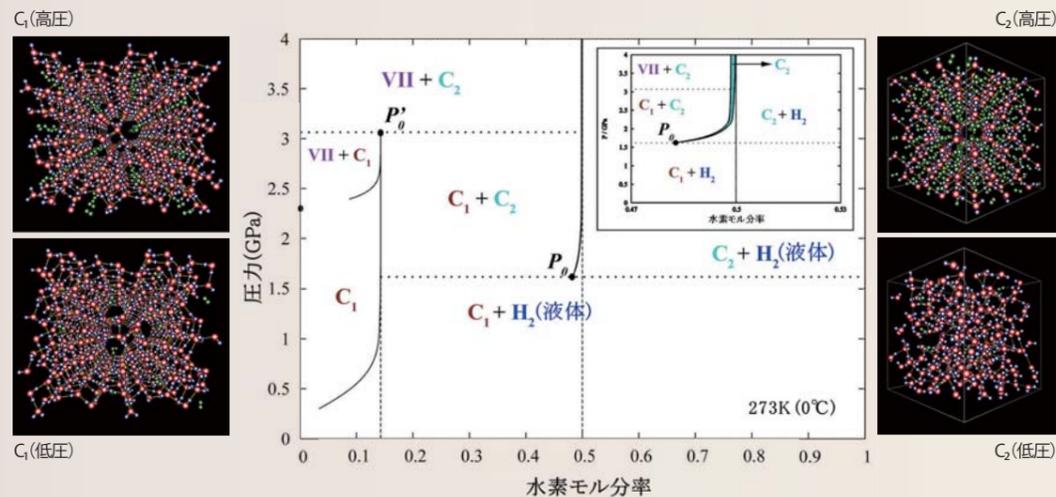
ハイドレートについては、20年くらい研究していて蓄積がありました。比較的計算負荷の低い方法で統計量を計算して、構造の相図(下の図)を描くと、かなり実験と計算の結果が合うことがわかってきています。水素ハイドレートに圧力をかけると、水の質量の9分の1くらいまでなら氷に水素を入れてためることができるのですが、それには2万気圧くらい必要

で、車に積んで運ぶことはとてもできません。ただ、別の物資を添加することで圧力を下げることができるので、応用も期待されています。

そこで現在は、京コンピュータで分子動力学ソフトウェアModylasを使った大規模なメタンハイドレートの融解のシミュレーションを行っています。

メタンハイドレートの融け方を調べているのはなぜですか？

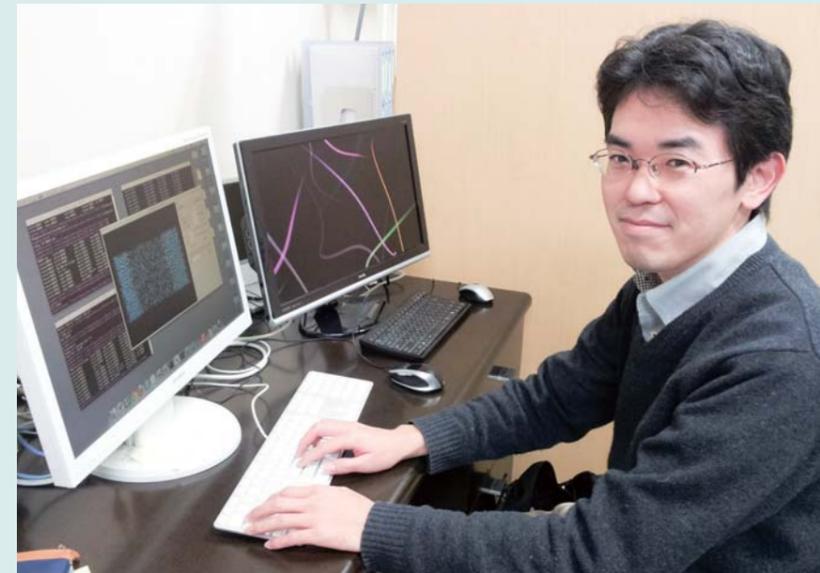
メタンハイドレートは他の化石燃料の2倍くらいの埋蔵量があるとも言われていて、産業への利用が期待されています。でも、メタンハイドレートは海底にあり、その質量の87%以上は水です。固体として掘り出すのは採算がとれません。掘る前に溶かして、気体のメタンだけ集めてしまう方法が必要です。熱力学的には入っているメタンの10~20%くらいを燃やす熱量で融かすことができるのですが、実際に融かすにはいろいろな条件が必要になります。それらの条件をシミュレーションで調べています。



シミュレーションで求めた水素ハイドレートの相図：温度0°Cで、いろいろな圧力と水素の濃度のときに、どんな水素ハイドレートができるかを表している。C₁とC₂が水素ハイドレートの種類で、それぞれ、Ice Iというダイヤモンド様立方晶の氷とIce IIという斜方晶の氷に水素が詰まった構造をしている。VIIは別の構造の立方晶の氷、H₂は水素が氷の中でなく外で液体水素になっている領域で、足し算で書かれているところは、2つの構造が混ざっている領域を表す。左右の画像がそれぞれC₁とC₂の構造で、赤と青の水分子の格子の中に緑色の水素分子が詰まっている。高圧のときはどちらも水素がたくさん詰まっているが、低圧では少ししか詰まっていない。また、C₂は低圧では氷の結晶の構造が壊れてしまっている。

重点研究員のアプローチ

メタンハイドレート分解過程の微視的機構



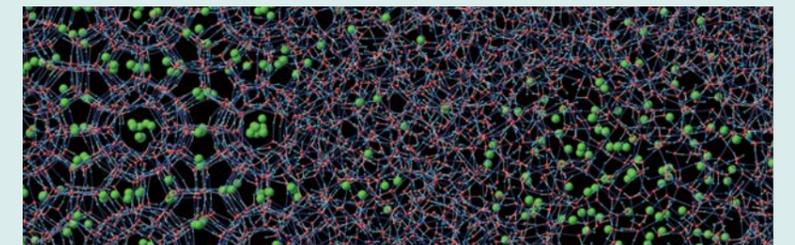
矢ヶ崎 琢磨 やがさき たくま
岡山大学大学院自然科学研究科

研究でもそれがあった。通常、固体の融点は粒子間の結合の強さでおおよそ決まり、その固体の周囲の状況にはよらない。例えば大気圧下の氷は、水中でも空気中でも0°Cで分解する。ところが、われわれが分子動力学計算したところ、大気圧下のメタンハイドレートでは、固体全体が水に取り囲まれている場合のほうがメタンの気相と接している場合よりもはるかに分解温度が高いことが明らかになった。

ハイドレートが水に囲まれている場合、分解して生じるメタンは水に溶けた状態になる。ところが、メタンは水に非常に溶けにくいので、分解過程の進行は抑えられてしまう。これが水中での高い分解温度の原因であり、1成分の固体では起こりえない現象である。この分解過程では、分解中にメタンの気泡が生じることで分解速度が上昇することになる。その後の計算で、これも確かめることができた。

水中のメタンハイドレートの分解機構では、気泡が生じるとその周囲だけが速く分解するという不均一な分解過程が予想されるが、これは小さな系の計算では調べられない。また、熱勾配やメタンの濃度勾配、さらには気泡の移動などの影響の解析にも大きな系が必要である。

研究をしていて最も楽しい瞬間の1つは、予想外の結果が出たときである。この問題を明らかにしていく予定である。



水中のメタンハイドレートの分解過程のスナップショット。ハイドレートの分解により、水中に溶出した気泡をつくっている。この気泡がハイドレートのさらなる分解を促す。

今後の研究計画は？

水素ハイドレートについては、今あるモデルと理論を改善して計算精度を上げる方法を開発しています。メタンハイドレートについては、より大規模なシミュレーションを行って、メタンの気泡の近くと遠くでハイドレートの融け方にどのような違いがあるのか調べることを計画しています。現在のシミュレーションでは、水の中の気泡が生成して成長するまでの過程を追跡することができません。

ほかにも、外から力を加えてハイドレートを融かすようなことができないか、シミュレーションで確かめる計画も立てています。

重点課題代表者に聞く

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

話し手：香山正憲 こうやま まさのり
産業技術総合研究所関西センター
ユビキタスエネルギー研究部門 上席研究員

聞き手：志田和人 しだ かずひと
東北大学金属材料研究所 CMSI材料科学拠点研究員

この重点課題の目標

鉄鋼など金属系構造材料の機械的性質を原子・電子レベルから解明し、設計することを目標としています。金属の強度は転位（線状欠陥）の動きやすさで決まります。そのため金属材料は単結晶でなく多結晶（結晶粒集合体）で、化合物を析出させた「微細組織」をつくっています。微細組織では、粒界（結晶粒間界面）や析出物、固溶原子、欠陥集合体等で転位の動きを妨げて高強度を実現しているのです。

このような金属の単純な欠陥や界面の第一原理計算は可能ですが、析出物／金属の非整合（部分整合）界面では格子ミスフィットのため数千～数万原子のきわめて大きなスーパーセルが必要になり、第一原理計算は困難です。本課題では、「京」と最新計算手法を駆使して、異相界面、粒界、転位などの大規模第一原理計算を実現し、微細組織の詳細な原子間結合やエネルギー、力学挙動、さらに合金成分・添加元素の効果を解明します。

計算手法

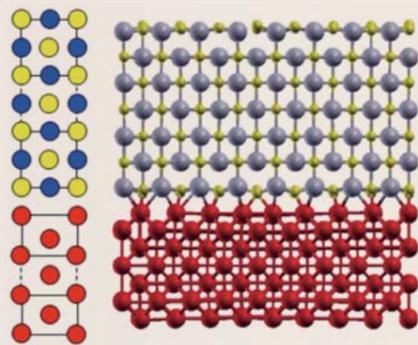
本課題では、大規模第一原理計算コードOpenMXが使われています。OpenMXは、密度汎関数理論に基づき局在原子軌道基底で電子構造を計算するもので、原子ごとに一定範囲内のクラスタで密度行列を求め、自

己無撞着に電子構造、全エネルギー、原子に働く力を計算します。電子構造を局所的に解くので、トータルの演算時間が原子数に比例するオーダー N 計算が可能です。「京」による大規模並列化が期待され、最適化が進められています。

一方、平面波基底PAW法コードQMASも使用します。大きな系は扱えませんが、局所応力・局所エネルギー計算が可能で、界面・粒界、転位の周りの応力やエネルギーの分布を高精度に求めることができます。

異相界面の第一原理計算

チタンカーバイト(TiC)／鉄界面の計算からスタートしています。鉄鋼では、TiC、ニオブカーバイト(NbC)、炭化バナジウム(VC)などを析出させて機械的性質を向上させます。固溶した遷移金属原子と炭素(C)原子が化合物相として析出するもので、初期には鉄



化合物／鉄の整合界面(左)と部分整合界面(右)のモデル。NbC(100)／Fe(100)界面の例(新日鐵住金・澤田英明氏作成)。

(Fe) (100)／TiC(100)、Fe[100]／TiC[110]の関係で、Fe原子とC原子が1対1にそろった配置の「整合界面」が形成されます。格子ミスフィットのため、軟らかい鉄のほうが界面に平行方向に少し伸びて整合界面になります。整合界面そのものは安定です。しかし、析出物が成長していくと鉄側の歪エネルギーが増え、全体として整合界面形成による利得を上回るため、整合性を犠牲にしても歪みが小さい「部分整合界面」に変化すると予想されます(図参照)。

整合界面、部分整合界面の両者を第一原理計算で扱うこと、析出物周囲の歪エネルギーを良好に見積もることが必要となります。部分整合界面の第一原理計算は、セル内の原子数が数千～数万個と大きく、「京」とOpenMXの組み合わせでしか実行できません。現在、部分整合界面の安定原子配列やエネルギーの計算結果が着々と得られてきています。一方、界面近傍の応力では、QMAS計算で界面Fe原子の電子構造に由来する新しいタイプの応力が見いだされており、学術的に注目されます。

鉄鋼では、固溶している水素が脆性破壊を招くため、析出物／鉄界面に水素を捕獲させることで脆性破壊を抑える効果が期待されています。今後、整合界面、部分整合界面の構造を求めることで、水素捕獲についての具体的な検討を進めます。さらに、転位や粒界についても、OpenMXによる大規模計算が望まれます。転位の場合、固溶して

重点研究員のアプローチ

鉄／炭化物(窒化物)界面の第一原理計算： 局所エネルギー、局所応力による分析



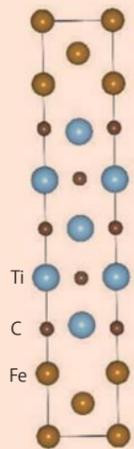
Vikas Sharma

産業技術総合研究所関西センター
ユビキタスエネルギー研究部門

いる添加元素との相互作用の解明が注目されます。

社会へ及ぼす効果

優れた強度・靱性、耐熱性をもつ構造材料の開発は、各種発電装置や内燃機関における高効率エネルギー変換、輸送車両軽量化による省エネルギー化を可能にし、また高信頼性の大型構造物など、安全・安心の社会基盤を築くために不可欠な技術です。構造材料では、希少元素が添加元素、合金成分に用いられる場合も多く、本課題における微視的な解明は、希少元素代替技術開発にも大きく貢献するものです。



Fe(100)/TiC(100) coherent interface model (5-layer/5-layer supercell)

Development of high-performance metallic materials for structural and thermal applications is crucial to attain more efficient use of energy in the society. In order to improve the mechanical performance, strength and toughness, of iron or steel, precipitates such as transition-metal carbides or nitrides are generated inside it by thermal processes. The size of precipitates, the structure and nature of iron/precipitate interfaces and the stress around the interfaces are crucial to control the mechanical performance. The presence of lattice misfit between the precipitate and iron is an essential issue, which induces the misfit stress at the interface, affecting the size of precipitates and the bulk mechanical properties. In our project, large-scale first-principles calculations of semi-coherent iron/carbide (nitride) interfaces without misfit strains are performed by order- N scheme. On the other hand, it

is important to make basic analysis of local stress and local energy at the coherent iron/carbide (nitride) interfaces based on the behavior of electrons. I basically deal with this subject. We use the projector augmented wave (PAW) method with plane-wave basis based on the density-functional theory with the help of the QMAS (Quantum Materials Simulator) code developed in AIST. By this code, we can obtain local energy and local stress in each local region inside the supercell of iron/precipitate interfaces, via the energy-density and stress-density calculations combined with proper integration techniques to settle the gauge-dependent problem. We have started with a Fe(001)/TiC(001) coherent interface, where we have found the interface stresses caused by the lattice origin and the electronic origin.

特別支援課題代表者に聞く

ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発

話し手： **信定克幸** のぶさだ かつゆき
自然科学研究機構分子科学研究所 准教授

聞き手： **野田真史** のだ まさし
自然科学研究機構分子科学研究所 CMSI分子科学拠点研究員

この特別支援課題ではどのような研究を行っていますか。

電子デバイスは電子の動きを利用したものです。電子の機能性だけではなく光の機能性も利用し、より小さく、より省電力化、より高速

化、外的な影響により強い光・電子機能性量子デバイスを基礎理学的な観点から理論的に設計することを目標として研究を進めています。次世代電磁場エネルギー伝播デバイス（導波路）や量子データ転送デバイス、また、太

陽光のエネルギーを効率よく電気や化学的なエネルギーに変換する太陽電池や光触媒などの開発に貢献できる設計指針を計算科学の立場から提案することが最重要課題です。

なぜ「京」コンピュータを使って理論設計しなければいけないのですか？

われわれが対象とする光・電子次世代量子デバイスの機能性は、数～十数ナノメートルサイズのきわめて小さな領域で起こる電子と光の複雑な絡み合いや運動によって支配されています。デバイス設計に向けた実験・開発研究と相補的に、理論計算に基づくデバイス設計を行い、得られた結果を実験・開発の現場にフィードバックし、理論・実験の両面からデバイス開発を進展させることが非常に

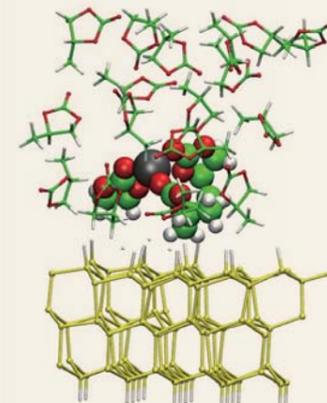
重要になります。

ナノメートルサイズのデバイスで起こると予想される光と電子の振る舞いは、量子力学に基づく方程式で記述できます。この方程式を実在のデバイスを想定して解くためには、非常に大規模な計算が必要です。われわれのグループでは「京」コンピュータの約3分の1の資源である約20万コアを使って効率的に光と電子の振る舞いを記述するためのプログラムを完成させました。

今後の展望をお聞かせ下さい。

次世代デバイスの開発は、基礎研究から応用開発に至るまでその研究領域は多岐にわたっており、それ故に、解決すべき課題を明確にすることはきわめて重要です。われわれは、「京」コンピュータを最大限に利用して基礎学術的な観点からデバイス動作メカニズムの解明や新奇機能性発現の理論予測等を行い、デバイス設計の指導原理となりうるナノ光応答理論の確立をめざしています。

promising results, we are now conducting simulations containing up to 4000 atoms, which will allow us to assess the critical effect of ppm concentrations of chemical additives and/or traces of water on the Li-ion insertion process and SEI formation mechanism.



Snapshot from MD simulation of the electrode/electrolyte interface of a lithium-ion battery: desolvation of the lithium ion (in black) from propylene carbonate in the vicinity of the electrode.

第3回CMSI研究会レポート 超並列計算が拓く新しい計算物質科学

第3回CMSI研究会は、2012年12月3日～5日、自然科学研究機構・岡崎コンファレンスセンターで開催され、100名をこえる研究者が集まりました。

例年通り、この1年間の成果が各研究課題の代表者から報告されたほか、今回は一般投稿の中から発表課題を募りました。これは、研究者の発掘と育成をめざすCMSIの活動を一歩前進させたもので、運営面でも16名の拠点研究員が座長を務めて進行を担うなど、若手研究者を積極的に登用しています。

招待講演では、理研・計算科学研究機構(AICS)の黒田明義氏が、「超並列でFFTは高速に動かせるか?」と題して、平面波基底密度汎関数法において、多軸の並列化により「京」全系で20%以上のピーク性能比が達成できたことを紹介し、3次元分割のFFTライブラリを利用することでさらなる性能向上が期待できると、今後の展望を説明しました。

京都大学の田中功教授は、「第一原理計算に基づいたマテリアルズ・インフォマティクス」と題して、マテリアルズ・インフォマティクスが新材料の開発につながる手法として重要性を増していること、研究者が海外と比較してきわめて少なく、研究・人材両面での育成が急務で

あると、熱く訴えました(写真右)。

また、HPCIコンソーシアムとの共催で、「将来のスパコンのありかた検討会」が開かれました。パネリストは、京都大学・中島浩教授、理研AICS・南一生氏、物性研・川島直輝教授、京大・田中功教授、分子研・信定克幸准教授、物性研・藤堂眞治特任教授。初日のプログラム終了後の開催であったにもかかわらず、会場の参加者と活発な議論が展開されました。

ポスターセッションでは、35歳以下の若手研究者を対象に優れた研究に贈られる「ポスター賞」もいまや定番となり、若手研究者はそれぞれ工夫を凝らして発表を行い、ポスターの前で真剣に議論している姿が随所で見受けられました。

今回から、受賞対象をポスターだけでなく講演まで広げ、新たに「若手奨励賞」と「ビジュアル賞」が設けられました。受賞者と研究課題はP20で紹介しています。



高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究

話し手： **大谷 実** おおたに みのる
産業技術総合研究所ナノシステム研究部門 研究グループ付

聞き手： **Nicéphore Bonnet**
東京大学物性研究所 CMSI重点研究員

The challenge of finding our way to sustainable energies is putting an increasing demand on computational studies. In our group, we are using the K computer with the objective to shed light on a key mechanism that takes place in lithium-ion batteries.

The emergence of a sustainable, non CO₂-emitting, energy economy depends heavily on the development of autonomous power systems for application in smart-grid energy storage and transportation. In this regard, Li-ion batteries are a leading technology whose performance—measured in terms of energy density, power density, recharging time, durability, cost, and safety—depends critically on the

structure and composition of the electrodes and electrolyte. In particular, the properties of the solid-electrolyte interface (SEI)—the specific phase that results from the chemical decomposition of the organic solvent on the surface of the anode—are known to be very sensitive to the insertion of small quantities of chemical additives into the electrolyte. Because, in addition, the SEI is known to simultaneously control the electrode resistance against corrosion and the Li-ion insertion-extraction rate, a detailed knowledge of the SEI structure is essential in trying to reduce the degradation of the battery discharge capacity upon successive charge-discharge cycles.

In practice however, the SEI is hard to characterize experimentally, implying a strong interest in directly simulating the SEI formation mechanism in the computer. Recently, we have used the first-principles code OpenMX+ESM on the K computer to run 500-atom simulations in which the anode is represented by a slab made of silicon—that has higher Li insertion capacity than carbon—and the electrolyte is composed of one molecule of LiPF₆ salt dissolved in propylene carbonate. When putting the system under bias, we have been able to directly observe the progressive migration, desolvation, and adsorption of the Li ion on the surface of the electrode. Following these

CMSI カレンダー

詳細は CMSI ホームページ
<http://cms-initiative.jp> をご覧ください。

- 第1回 計算物質科学「見える化」シンポジウム (豊橋技術科学大学との共催)
日程：2013年3月5日(火)
場所：秋葉原UDX NEXT-3 およびシアター
- 第2回CMSI神戸ハンズオン: ALPSチュートリアル
日程：3月6日(水)
場所：CMSI神戸拠点(理研AICS R501)
- 産官学連続研究会
日程：3月12日(火)
場所：秋葉原ダイビル コンファレンスセンター
- 「京」利用者中間報告会
日程：3月14日(木)・15日(金)
場所：理研AICS

- 日本化学会第93春季年会
シンポジウム「超巨大計算機時代の化学」
日程：2013年3月25日(月)
場所：立命館大学びわこ・くさつキャンパス
- 日本物理学会第68回年次大会
シンポジウム「エクサスケールに向けて歩み出す計算物理学」
日程：2013年3月27日(水) 午後
場所：広島大学
- 第23回CMDワークショップ
日程：9月2日(月)～5日(木)
場所：大阪ナノサイエンスデザインセンター
- CMSI International Workshop
日程：10月17日(木)～19日(土)
場所：東京大学(本郷)、名古屋大学、理研AICS
- CMSI International Symposium
日程：10月21日(月)・22日(火)
場所：東京大学伊藤国際学術研究センター

第3回CMSIポスター賞

第3回CMSIポスター賞受賞者とその研究内容を紹介します。

CMSI ポスター賞

金子隆威 かねこりゅうい

東京大学大学院工学系
研究科

研究課題：多変数変分
モンテカルロ法を用いた
 J_1 - J_2 ハイゼンベルグ
モデルの解析

反強磁性 J_1 - J_2 ハイゼンベルグモデルの基底状態を多変数変分モンテカルロ法により高精度に計算し、ネール反強磁性相とストライプ反強磁性相にはさまれた領域にスピングャップの開いたスピン液体相を見いだした。



CMSI若手奨励賞

森田悟史 もりたさとし

東京大学大学院工学系研究科
研究課題：多変数変分モンテ
カルロ法の最適化

多変数変分モンテカルロ法プログラムの最適化、大規模並列化を行った。Pfaffian高速更新アルゴリズムの一般化、ハイブリッド並列化、データ構造の見直しなどにより、約60倍の高速化、90%以上の並列化効率を達成した（詳細はp5に掲載）。

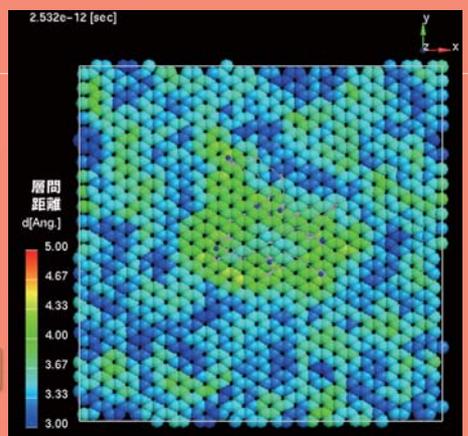
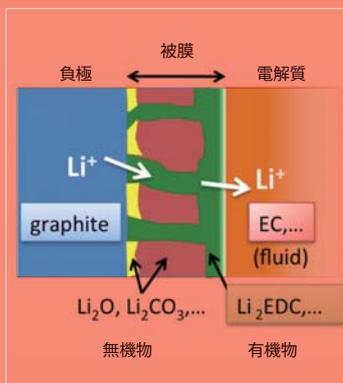
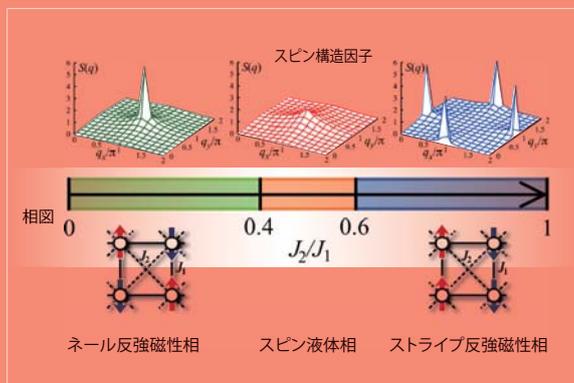
CMSI ビジュアル賞

大庭伸子 おおばのぶこ

豊田中央研究所

研究課題：分割統治型DFT
コードを用いたハイブリッド
量子古典シミュレーション

分割統治型実空間密度汎関数(DC-RGDFT)コードを用いた、リチウム(Li)イオン二次電池のグラファイト(負極)中Liの拡散過程解析。リチウムの移動領域が限られていることを明らかにした。計算データの可視化には「viewer」(CMSI河野貴久氏作)を使用。



Torrent No.7 Feb. 2013

- | | | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>2 特集：CMSIの研究課題
スーパーコンピュータ「京」で切り拓く
新たなパラダイム
坂下達哉</p> <p>4 重点課題代表者・特別支援課題代表者に聞く
相関の強い量子系の新量子相探索と
ダイナミックスの解明
今田正俊×大久保毅</p> <p>6 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と
分子論の新展開
天能精一郎×米原文博</p> <p>8 密度汎関数法によるナノ構造の電子
機能予測
押山 淳×吉澤香奈子</p> | <p>10 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
岡崎 進×榮 慶丈</p> <p>12 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
杉野 修×城野亮太</p> <p>14 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
田中秀樹×河津 励</p> <p>16 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
香山正憲×志田和人</p> | <p>18 ナノ構造体における光誘起電子ダイ
ナミクスと光・電子機能性量子デバイ
スの開発
信定克幸×野田真史</p> <p>18 高性能リチウムイオン電池の開発に
向けた基礎的研究
大谷 実×Nicéphore Bonnet</p> <p>重点研究員のアプローチ
5 森田悟史 7 大西裕也 9 小泉健一
11 藤本和士 13 木崎栄年 15 矢ヶ崎琢磨
17 Vikas Shrama</p> <p>19 第3回CMSI研究会／CMSIカレンダー</p> <p>20 第3回CMSIポスター賞</p> |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

表紙：色とりどりの鉛筆が広がりました。
色が重ねられ、CMSIの多彩な研究が描きだされていきます。

計算物質科学イニシアティブ広報誌 **Torrent** No.7, Feb. 2013

© Computational Materials Science Initiative, 2013 All rights reserved
CMSI(計算物質科学イニシアティブ)は、文部科学省「HPCI戦略プログラム(SPIRE)」
分野2<新物質・エネルギー創成>を推進する研究ネットワークです。

発行 計算物質科学イニシアティブ

編集 CMSI 広報小委員会

事務局 東京大学 物性研究所内 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

tel. 04-7136-3279 fax. 04-7136-3441 http://cms-initiative.jp ISSN 2185-7091

制作協力：サイテック・コミュニケーションズ デザイン：高田事務所



Computational Materials Science Initiative