

1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

新材料の探索を実現するためには、多様で複雑なナノ構造を取り扱う必要があり、その種類は数万にも及ぶ場合がある。また、第一原理計算をはじめとする原子スケールからのナノシミュレーションは、もはや実験と並ぶ必要不可欠な手段である。そのため、高精度な手法を高速に効率よく実行するための技術開発が必要である。ナノカーボンや電池材料などの次世代デバイスに向けた材料の電子状態を中心に解析し、対象材料、対象特性の拡張を実施する。

2) 利用意義（産業利用の観点から）

将来のビッグデータや人工知能技術の発展に伴い、その膨大な計算量を支えるためのコンピュータが必要となることは言うまでもない。半導体 LSI の微細化による性能向上は限界を迎えつつあり、画期的な低消費電力デバイスや新原理デバイスなどの次世代デバイス、またそれを実現するための新材料の探索が必要である。

3) スーパーコンピューターを利用する必要性

ナノスケールのデバイス・材料開発では、材料の形状やサイズ・界面がその特性に大きく影響するため、数 1000 原子におよぶ大規模な系を高精度な手法で扱うことが望ましい。このような系に対して第一原理計算手法によりデバイス特性として重要な電子状態計算を行うためには、数 100 ノードの計算機の利用が必要となる。次世代デバイス向け材料であるナノカーボン材料や電池材料の電子状態解析を中心に、主に自グループの計算機では実行困難な 100 から数 100 ノードを利用する計算を多数実行する。

2. 成果の概要

1) 本利用で得られた成果（成果が得られなかった場合はその理由）

※ 内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。

①. 計算科学、 2. コンピュータ・サイエンス、 3. プログラムチューニング、 4. その他)

カーボンナノチューブ、グラフェン、新規 2 次元材料と化学物質の吸着系について第一原理計算を行い、吸着エネルギーや電荷移動等の相互作用について調べた。これらにより、これらの材料の化学プロセスやナノデバイス、センサー応用に向けた知見を得た。

また、次世代電池向け新材料開発に向け、既存の電池材料の第一原理計算の結果と実験データを比較することにより、機械学習用データ取得のための電池材料の高速な特性予測技術を開発した。

関連成果発表

1. Mari Ohfuchi, "Ab Initio Study on Electronic Sorting of Single-Wall Carbon Nanotubes Using Sodium Dodecyl Sulfate", J. Phys. Chem. C, 122, 4691 (2018).
2. 實室秀幸、特許出願中

2) 社会・経済への波及効果の見通し

- ・新規デバイスの開発推進による低環境負荷社会への貢献
- ・シミュレーションによるデバイス研究開発の加速、および試作回数削減によるコスト・環境負荷低減
- ・産業界におけるシミュレーションおよび大規模並列計算利用の有用性を実証することによる、コンピュータビジネスの牽引、スパコン利用の促進

3) その他の成果