

新奇ナノ炭素物質創製のための 大規模並列探索シミュレーション

牧野 浩二*1, 手島 正吾*1, 南 一生*1, 中村 壽*1, 大澤 映二 *2

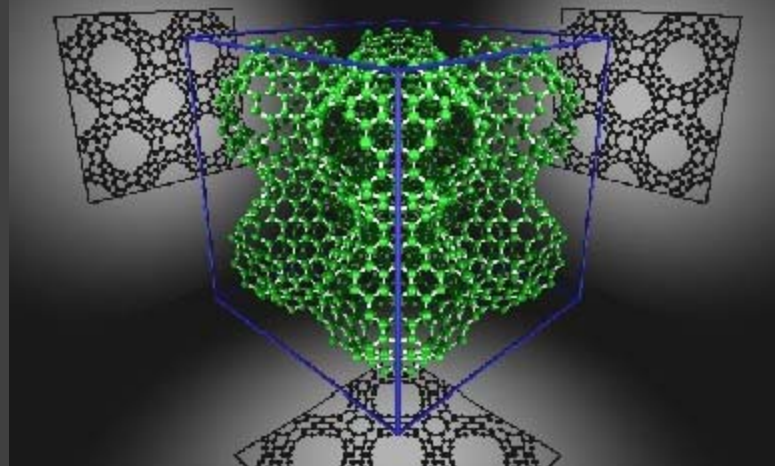
*1高度情報科学技術研究機構

*2豊橋科学技術大学 名誉教授, 株式会社 ナノ炭素研究所

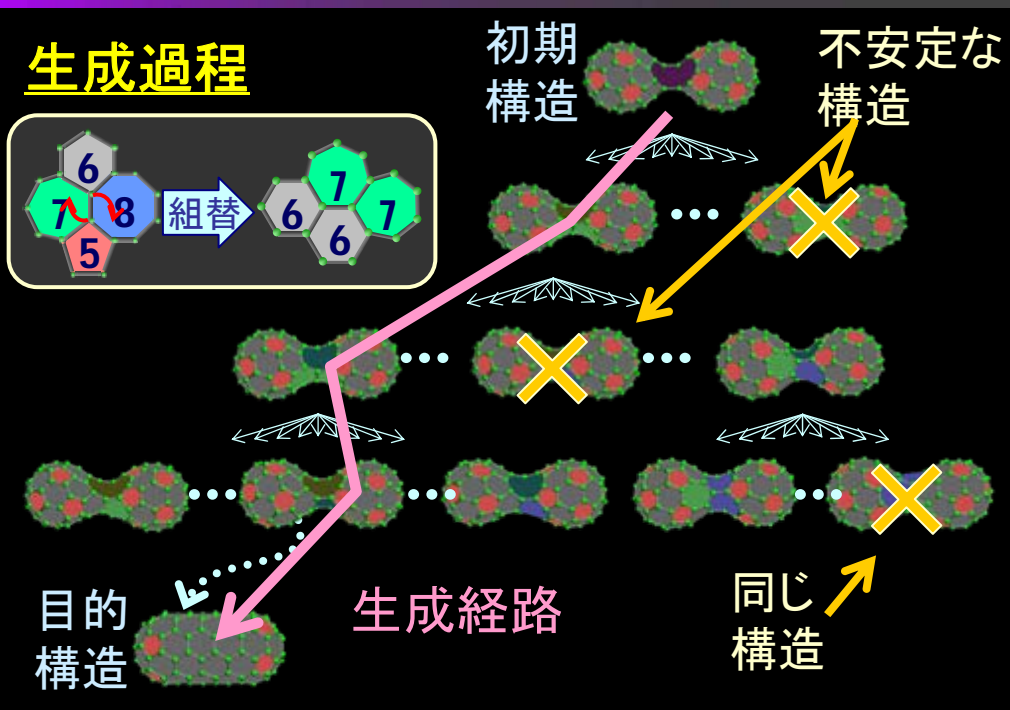
目的 新物質の生成経路を探索

- 方法**
- 炭素原子の組み換え
 - 軌道エネルギーを判断基準
 - 大規模並列シミュレーション
 - 32億回の固有値計算
 - 1700万個の探索

マッカイ構造：高硬度、超軽量な新物質



生成過程



成果 ● 高速・並列シミュレーションを実現(ES)

- 並列化率: 99.9987% (4096CPUs)
- ピーク性能: 27.4% (8.96TFlops)
- ベクトル化率: 97.6%

● マッカイ構造の生成経路を発見
(カーボンナノチューブから)

● 実験家への示唆

