

分野名: ナノ

平面波展開第一原理分子動力学解析

■ プログラム名: PHASE

■ 開発

- 革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発
- 独立行政法人物質・材料研究機構 計算科学センター センター長 大野隆央

■ 概要

- 第一原理に基づき物質の電子状態を求める。
- 電子論に基づき物質の構造と物性を解析する。

■ アルゴリズム

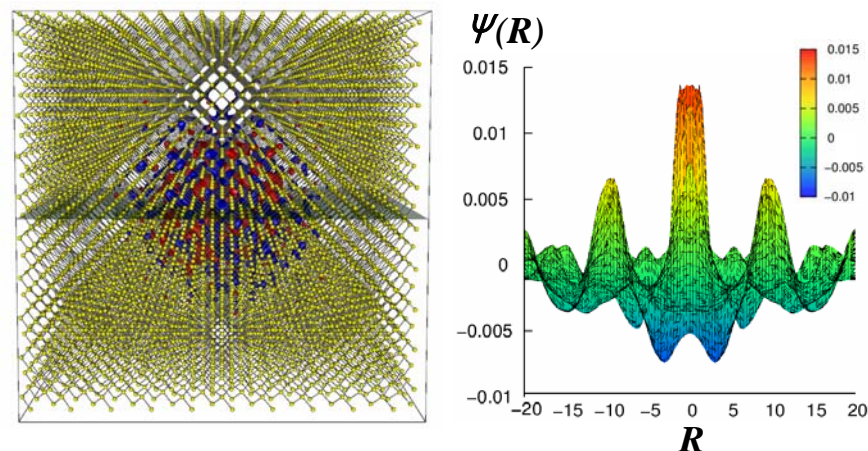
- 密度汎関数法
- 平面波基底関数系
- 第一原理擬ポテンシャル法
- Fortran90 と C言語
- MPIを用いた並列計算

■ 現状での計算規模

- 5832 原子スーパーセルによるシリコン中 As ドナー準位の解析
- 地球シミュレータ 384 ノードで実効 13.6 TFLOPS
- 使用メモリ容量 3.1 TB、ディスク容量 0.2 TB

■ 次世代スパコンでの計算規模

- 5 万原子程度
- メモリ容量 50 TB、ディスク容量 2 TB



Si中のAsドナーの基底状態の波動関数

■ どのようなことが期待されるか？

- ポスト 35 nm世代ナノデバイスの量子論に基づく動作解析により、スケーリング限界を破る非シリコン系デバイスの探索を行う。
- 垂直磁気記録の第一原理解析により、1Tbit/inch²を越える高密度磁気記録を達成する。
- 酵素と DNA、RNA の反応解析により、複製、損傷修復のメカニズムを明らかにし、遺伝子レベルでの治療に寄与する。