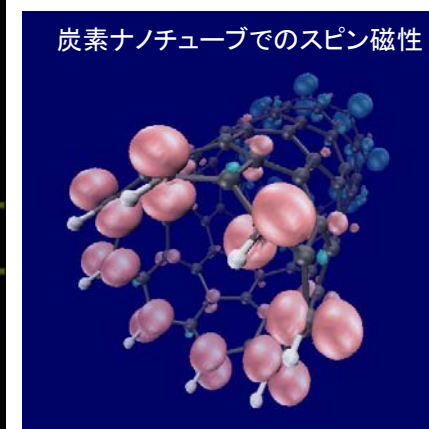
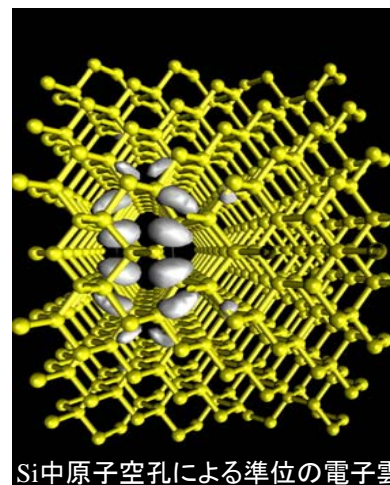


分野名: ナノ

実空間第一原理分子動力学計算

- プログラム名: RSDFT
- 開発
 - 筑波大学計算科学研究センター研究員 岩田潤一
- 概要
 - ナノスケールでの量子論的諸現象を、第一原理に立脚して解明し、新機能を有するナノ物質・構造を予測
 - 密度汎関数法の基本方程式を実空間差分法によって解き、構造安定性、電子構造、ダイナミクスを解明
 - 高いベクトル機実効性能(単一 CPU でピーク比70%以上)と超並列機へのフィーザビリティ
- アルゴリズム
 - 実空間高次差分法と時間軸 Verlet 法
 - 電子自由度、イオン自由度に対する再帰的エネルギー極小化
 - Fortran90
- 現状での計算規模
 - Si 1,728 原子高精度量子論的計算: 筑波大学 PACS-CS 並列機 64 ノード(ピーク性能 358 GFLOPS)で実効 235 GFLOPS、メモリ容量 96 GB
- 次世代スパコンでの計算規模
 - Si 46,656原子(10 nm³)量子論的計算: メモリ容量 27 TB



- どのようなことが期待されるか?
 - ポストスケールリング・Siテクノロジーでの材料探索を、本シミュレーション手法による量子的コンビナトリアル手法で促進
 - 次世代テクノロジーをブーストする新機能物質の探索
 - 量子論に立脚したものづくりの指導原理を確立
 - ナノおよびバイオ物質を共通の量子論的基盤で取り扱うことによる学際的学問分野を創出