

平成18年度顕在化ステージ 事後評価報告書

シーズ顕在化プロデューサー所属機関名：みずほ情報総研株式会社

研究リーダー所属機関名：東京大学

課題名：100nm スケール材料の量子力学的分子動力学法シミュレータの開発

1. 顕在化ステージの目的

ナノテク・材料分野の研究開発分野の発展に伴い、ナノスケールに特有な原子構造と電子状態の強い相互作用、局所電荷移動など、100nmスケールの大規模な電子構造計算によらなくては解決できない問題が多い。このようなシミュレーションのニーズに対して、東京大学の藤原グループ(東大)で開発した、オーダーN法大規模電子構造計算プログラムが適用できる可能性がある。本研究は、東大の研究シーズをもとに産業界でのニーズをスケール・機能・物質の多様性・構造などの諸側面で検討し、シミュレータをどのような方向で拡充・発展させることで産業界における研究開発現場のユーザの利用に応えることができるかを、調査することを目的とする。

2. 成果の概要

大学の研究成果

オーダーN法ソフトウェアの優位性の検証として、高速性、汎用性、頑強性の点から、国内外のオーダーNソフトウェアとの比較を行った。ELSESプログラムパッケージの優位性としては、大規模な原子系を高速に計算できる点にあることが明確になった。頑健性の面からも、適当な数理手法の選択により計算速度を損なわずに、目的の精度を保証することが可能であることが分かった。一方、汎用性の点では、今後、多元系汎用ハミルトニアンの開発、自己無撞着に電荷の決定を行う、などにより適用系を拡張するなどの方策が課題として明確になった。また産業の開発現場における機能(計算可能物性値)などの要求も明らかになった。

企業の研究成果

パラメータDBから入手したパラメータをELSESプログラムパッケージで利用可能とするために、DBから取得したパラメータをELSESプログラムパッケージの形式に変換するツールの作成を行った。様々なユーザのニーズへの対応として、入出力インターフェースに対する検討を行い、適当なインターフェースのフォーマットとしてXML形式を選定した。デバイス・プロセスの課題として、カーボンナノチューブの選択的な成長過程への応用などを抽出した。また、ELSESプログラムパッケージを大規模電子構造計算分野の標準ソフトウェアとすべく、その中長期的な育成、普及を目的として研究会を設立した。今後、研究会活動を通じて、手法の研究、ソフトウェアの開発、実証等を進めていく予定である。

3. 総合所見

大規模科学計算ソフトウェアの拡充発展と、産業界のポテンシャルユーザのニーズ発掘・開拓という顕在化構想はかなりの部分達成されたと評価できる。今後の具体的な研究開発計画が構想されており、また研究会を組織するなどして研究開発の発展と産業への波及に向けた手だてが講じられている。

基礎的な理学の、しかも理論の研究活動が主体的に産学連携を実現していく形態として注目に値する。半導体産業や研究組合などとのさらなる連携が期待される。