研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 計算量子科学によるナノアーキテクチャ構築

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名 (研究機関名・職名は研究参加期間終了時点):

研究代表者

押山 淳 (東京大学大学院工学系研究科 教授)

主たる共同研究者

岩田 潤一 (筑波大学計算科学研究センター 助教)

宮本 良之 (日本電気(株)グリーンイノベーション研究所 主任研究員)

Parrinello Michele (スイス連邦工科大学 教授)

重田 育照 (大阪大学大学院基礎工学研究科 准教授) (平成 20 年 4 月～)

Boero Mauro (ルイ・パスツール大学 教授)

3. 研究実施概要

ナノスケールの自然現象では量子性が顕著となり、ナノ形状が電子状態に大きな影響を及ぼし、それにより新物性、新機能が出現している。本研究課題の目的は、計算物質科学および生命科学における量子論的シミュレーション手法を質的に革新し、コンピュータ・サイエンスとの共同により、それを飛躍的に高速化し、1万～数万原子群のナノ・バイオ物質に対する量子論的シミュレーション技法を確立すること、それによりナノ・バイオ物質におけるナノアーキテクチャ(現象における微視的機構の解明と予測・デザイン)の構築を目指すことである。

計算手法開発の側面では、(1) 実空間密度汎関数理論 (Real Space Density Functional Theory: RSDFT) 計算手法の高速化・高度化、(2) Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD)法の高速化・高度化とメタ・ダイナミクス (Meta Dynamics: MeD) 法との結合、(3) 時間依存密度汎関数理論 (Time Dependent DFT: TDDFT) に基づく、第一原理電子イオンダイナミクス (First Principles Simulation tool for Electron Ion Dynamics: FPSEID) コードの高度化、を3つの柱とした。(1) は数ナノメートル規模の構造体、物質を量子論的に扱う手法の開発であり、高精度空間マルチスケール・シミュレーションの基盤となる手法とみなせる。(2) はサブフェムト秒の電子遷移とナノ秒の原子移動を統合的に扱う量子論的ダイナミクス解明手法の開発であり、高精度時間マルチスケール・シミュレーションの基礎を形作る。(3) は電子励起状態を用いた物質デザイン手法のひとつであり、より広範な現象でのナノアーキテクチャ探索が期待できる。また(1)、(2)の開発の進捗状況に鑑み、当初は予定していなかった、RSDFT と CPMD-MeD の統合手法開発も平成 20 年度から開始した。

RSDFT の高速化、とくに並列アーキテクチャ・マシンでの高速化は、計算物質科学分野とコンピュータ・サイエンス分野の共同で行われた。並列機に適したグラム・シュミット直交化計算のアルゴリズム採用、分割統治法による固有値計算処理などを導入し、通信・演算の最適バランス設定、BLAS3 レベルでのライブラリ使用等により、サイズ N の三乗に比例する演算量の最も重い部分は、1000CPU 使用で理論性能の 80% の実効性能を得ている。また全体としても 10-20% の実効性能となっている。CPMD+MeD も並列アーキテクチャ・マシン上での性能向上がはかられた。しかし主要演算として FFT (Fast Fourier Transform) が含まれるため、RSDFT ほどの性能は達成されていない。また RSDFT の高機能化の一つとして、スピン自由度に対応した部分が完成されている。RSDFT と CPMD-MeD の統合については、本年度第1バージョンが完成し、現在実証計算が進んでいる。

以上の三手法に加え、平面波基底 DFT 手法、DFT+GW 手法、DFT+U 手法、キャパシタンス計算手法などを用いて、以下の6つのトピックスでの物質科学計算が実行され、物質科学への貢献が成された。主な成果を箇条書きにする(詳細は§4を参照されたい)。

1-1 シリコン・ナノメートル構造の量子論的計算

RSDFT を用いた世界最大規模の DFT 計算により、様々なサイズ(最大 10,000 原子)のシリコン・ナノドット

トにおける電荷注入エネルギーの定量的計算とバンドギャップ問題の定量的解析、様々な直径と断面形状を有するシリコン・ナノワイヤー(最大 15,000 原子)での電子状態解明とトランジスター性能予測。

1-2 半導体ナノ表面・界面での原子構造、物質創成、電子機能の解明・予測

歪 Ge 薄膜での転位芯構造の同定、半導体デバイス構造におけるショットキー障壁およびオーミック接触機構の新しいモデルの提唱、MONOS 型メモリーでのデバイス劣化の微視的機構解明、歪んだ Ge チャンネルでのホールキャリアの起源解明、低次元ナノ構造での電子トンネル現象の解明。

1-3 新物質相の予測

体心正方晶系を有する Si、Ge 結晶の安定性解明と、共有結合結晶でありながら、金属的となることの予測。光デバイスの基幹材料である窒化物半導体においては、カチオン空孔周辺で電子スピンの偏極化、固有の磁性材料としての可能性があることの予測。

1-4 炭素ナノ物質の原子構造と電子機能

配線材料として有望な多重壁炭素ナノチューブ(CNT)のキャパシタンスは、波動関数の浸み出しによるキャパシタンスの増大と有限状態密度によるバイアス電圧依存性が顕著であることの解明。CNT での原子空孔は、チューブ形状そのものに影響を与え、細化、磁性発現などの新機能出現を促すことの予測。蜂の巣構造に配置された π 電子系特有な豊かな現象の解明。

1-5 炭素ナノチューブと異種物質のハイブリッド構造における原子構造と電子状態

炭素ナノチューブのシリコン表面での整列の可能性予測。酸化シリコン上での安定吸着構造の決定。炭素ナノチューブ内での新しいアイス構造の予測。

1-6 タンパク質内イオン輸送のマイクロ機構解明

生体内エネルギー変換反応を担うシトクローム酸化酵素(Cytochrome *c* Oxidase: CcO)におけるプロトン輸送反応の世界初の量子論的計算と、ペプチド鎖を介した輸送機構の提唱、及び反応の自由エネルギーの算出。CcO 内ヘム近傍での、電子捕獲によるボンドの弱化とプロトン輸送経路の広がり解明。

4. 事後評価結果

4-1. 研究の達成状況及び得られた研究成果(論文・口頭発表等の外部発表、特許の取得状況等を含む)

本研究は、ナノ物質の機能解明や材料開発のための計算量子科学分野を世界的にリードする研究である。RSDFT、CPMD+MeD及びFPSEIDなどのアプリケーションを開発・改良し、それぞれにおいて、アプリの有効性を実証し、更に数々の重要且つ新たな知見を得たことについて、高く評価するものである。

特に、実空間密度汎関数プログラム(RSDFT)の並列化において、計算機科学者との共同のもとに最大 15,000 原子群の量子力学計算を達成したことは大いに評価できる。一方、もうひとつの謳い文句であるバイオ系での Meta Dynamics という面では、溶液系の取り扱いが連続体レベルであり、見るべき成果はない。(ちなみに、生物物理の分野では、量子化学と連続体モデルや MD や MM を組み合わせた蛋白質の電子状態計算はほとんどルーチンになっており、あまり大きな成果は上がっていない。)この部分が「マルチスケール・マルチフィジックス」という本プログラムの趣旨に対応した部分だが、その意味では物足りない。

上記世界最大のDFT計算もさることながら、重要なのは、Siナノドット計算で幾つかの新たな重要な知見が得られたこと、ナノワイヤー計算の電子状態計算により最適なナノ構造を探索していること、レーザー照射によるグラフェン生成の可能性を示したこと、兵庫県立大の吉川チームが実験で明らかにしたシトクローム酸化酵素のプロトン輸送の遅い反応を追跡する世界初の量子論的計算など、極めて有用な成果を挙げている点である。

一方、本事業の目的が、個々の研究成果よりもむしろマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションの展開として、どれだけ汎用性・応用性のあるアルゴリズムが開発できたかにあると考えると、個々の優秀な研究者の集まりという感が強く、量子論計算研究の統合的な方向性に貢献するという点では少し物足りない感じがする。

新たな展開の一つは、RSDFTのペタコンに向けた超並列化である。これについては、計算機科学の研究者とも連携を図り、十分に成果を挙げている。

もう一つの新たな展開は、実空間CPMD+MeDの開発である。これについては、実際の成果はこれからで

ある。しかし、元々の計画であったQM/EQM/MM手法の開発を中止し、より発展的、かつ将来の超並列コンピュータに適合した手法として、この手法を開発するものであり適切な判断であったと思われる。本手法は将来の発展が大いに期待できるものである。

外部発表に関しては、44件もの国際会議招待講演はすばらしい。原著論文88報、総説5報も良い。論文発表について、特に著名国際誌への発表が多いことは評価できる。一方、プレス発表がローカル紙1件とはさびしい。一般社会への分かりやすいPR、広報がもっと必要である。

特許の取得状況について、本研究は、アプリの開発のみならず、新材料開発の可能性を探ることも含まれるので、その成果として3件の特許申請をしていることは高く評価できる。

4-2. 研究成果の科学技術や社会へのインパクト、戦略目標への貢献

本研究のいずれのテーマも世界最先端の分野に関するものであり、且つその分野を先導する世界的成果を挙げている。特に、いずれのアプリケーションも実証にとどまらず、科学的にきわめて重要な知見を得たり、或いはグラフェンの新しい製造法のような産業応用としても重要な知見を得たりしていることは特筆できる。特に、シトクローム酸化酵素のプロトン輸送のシミュレーションの成功は、この種の反応ダイナミクスへの将来の応用性をさらに見える形にすることによって、その科学技術的成果はさらに大きなインパクトとなりうる。この成果は、国際的に見てもレベルは高いと考えられる。他の成果もレベルは相対的に高いと判断できる。

本研究領域の具体的な達成目標である「世界最先端レベルの超高速・大容量計算機環境と精緻なモデル化・統合化によって、複数の現象が相互に影響しあうようなマルチスケール・マルチフィジックス現象の高精度且つ高分解能の解を求めることを研究の対象」とするという観点から、本研究は手法の開発及びそれによる成果創出と言う点で、既に戦略目標を達成しているとともに、社会的にもインパクトを与えつつあるところである。

既に世界的にも新しい手法(実空間CPMD-MeD)の開発にも着手しているところであり、引き続き、この分野での大きな貢献が期待できる。京コンピュータの利用に向けたチューニングもかなり出来つつあり、京による大規模シミュレーションによって、更に新しい知見が得られる可能性が極めて高い。新しい知見や新しい技術的な発見により、新材料の開発・新物質の発見に結びつくことが大いに期待される。

このように、一つ一つの研究成果としては大いに展開が期待できるが、先に述べたように、本来のマルチのシミュレーション技法の開発という点では、的を絞って全員で位相を揃えて挑戦したならば、本事業としてもっと大きな成果が得られたであろうと思われる。

本研究の成果を継続的に発展させることを目的に、物質科学と計算機科学の融合による「コンピューティクス」と呼ぶ新たな学術分野を確立し、新たな展開を図っていることは特筆に値する。

4-3. 総合的評価

本研究は、ナノ物質の機能解明や材料開発のための計算量子科学手法の開発、開発した手法の実証、手法を使った新しい知見の創出、それらのすべてにおいて世界を先導するものであり、極めて優れた成果が得られていると評価する。

特に、実空間密度汎関数法の開発による大規模量子論計算を可能にしたという点では大いに本事業の趣旨を満たすことに貢献したと言える。反面、それぞれのグループが単独行動をしている観があり、全体のベクトルを揃えてより量子論計算研究の統合的な方向性に貢献するという点では少し物足りない感じがする。

今後についても、本研究の成果を継続的に発展させることを目的に、物質科学と計算機科学の融合による「コンピューティクス」と呼ぶ新たな学術分野を確立し、新たな展開を図っていることは特筆に値することである。

更に、京コンピュータの戦略的利用分野の一つである「新物質・エネルギー創成」にも参画する予定であり、本研究の成果が更に発展することを大いに期待するものである。