

講演タイトル

「京」による第一原理計算とナノ物性物理への応用

講演要旨

ナノメートルサイズの領域には、たんぱく質や半導体デバイスなど、重要な物質が多数存在する。またナノの世界では量子力学的効果が顕著に現れるため、計算機シミュレーションを行うには量子力学の基礎原理に基づいて現象を記述することが本質的となる。量子力学の基礎原理のみに立脚した計算科学的アプローチを、我々は「第一原理計算」あるいは「第一原理シミュレーション」と呼んでいる。ナノ物質は、しかしながら量子力学的第一原理計算を実行するにはあまりにも巨大な系であった。

本講演では、我々が開発を行ってきた第一原理計算プログラム「**RSDF**T」をスーパーコンピュータ「京」上で実行することにより、十万原子規模の第一原理計算が可能となることを示す。この原子数は次世代トランジスタとほぼ同サイズであり、第一原理レベルからの半導体デバイス設計の可能性についても議論する。

プロフィール

岩田 潤一（いわた じゅんいち）

2002 年筑波大学大学院物理学研究科物理学専攻博士課程修了、産業技術総合研究所研究員、筑波大学助教を経て、現在東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻特任講師。専門は計算物性物理。

