

現在進行形の話

波束ダイナミクスを中核とした有機系への展開

星健夫、井町宏人(鳥取大), 多田朋史(東工大)

このスライドは、10/10に東工大(すずかけ台)で
開催した研究会のもの。

インフォーマル計算科学セミナー
~100ナノ有機物質量子シミュレーションにむけて~

世話人:多田朋史(東工大)&星健夫(鳥取大)

『京』での100ナノ電子状態計算と有機物質系

星健夫(鳥取大)

π 電子近似によるポリマー鎖の量子波束散乱シミュレーション

多田朋史(東工大)

ナノカーボン材料の熱電変換シミュレーション

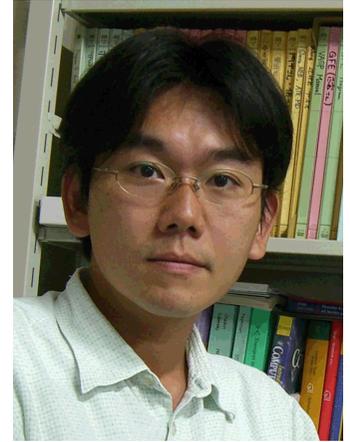
山本貴博(東京理科大)

電子状態計算を指向した行列計算アルゴリズム

山本有作(電通大)

→「京」利用プロジェクト(H27)

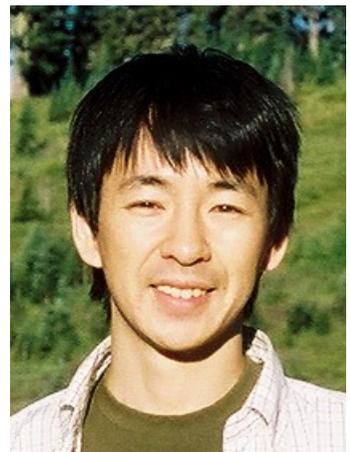
多田朋史(東工大)



山本貴博(東京理科大)



山本有作(電通大)



波束ダイナミクス計算:時間スケール

2種の時間ステップ

(a) 原子ダイナミクスの典型的時間刻み幅: $\tau = 1 \text{ fs}$

(b) 電子ダイナミクスの典型的時間刻み幅: $\tau' = 0.1 \text{ fs}$

(cf. (時間のatomic unit) $\doteq (1/40) \text{ fs}$)

$T=10\text{ps}$ のダイナミクスを行うための時間ステップ数

$(T/\tau') = 10\text{万ステップ}$

計算時間の見積もり

(1) 「1秒シミュレーション」=1時間ステップが1秒で終わる場合

→1時間に3600時間ステップ、3時間で約1万ステップ

→30時間で10万ステップ

(2) 「10秒シミュレーション」=1時間ステップが10秒で終わる場合

→300時間で10万ステップ

展望：有機エレクトロニクス材料へ

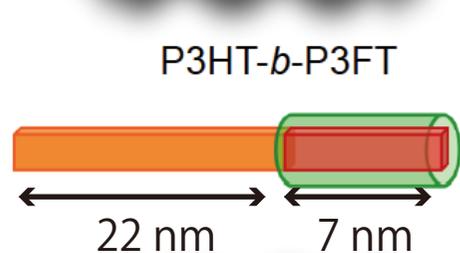
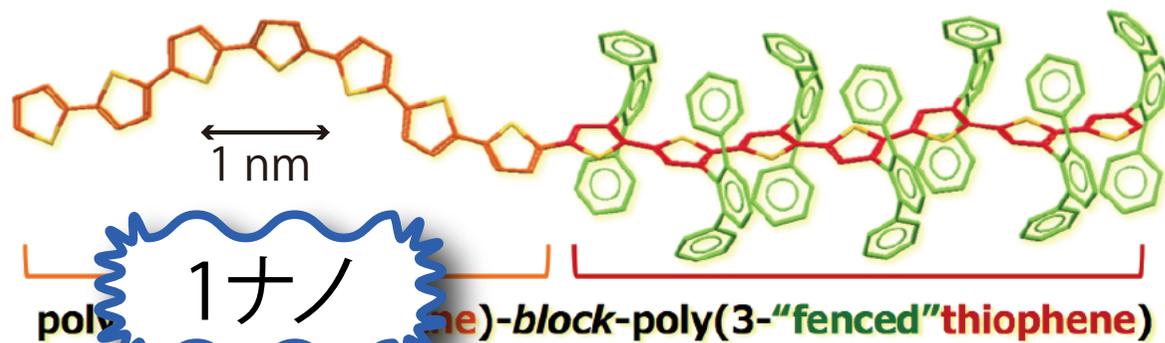
- エレクトロニクス・医療応用など、新産業への期待
- 複雑さ：原子・分子の性質 + 凝集体(100ナノ)の性質

→ 対応する数理モデルが必要
(計算機の高高速化だけでは無理)

→ 波束ダイナミクスにおける
(時空間アップスケーリング)

例：「Fence」型高分子による自己組織化

Pan et al., Angew. Chem. 53, 8870 (2014)



Self-assemble
via π - π stacking

