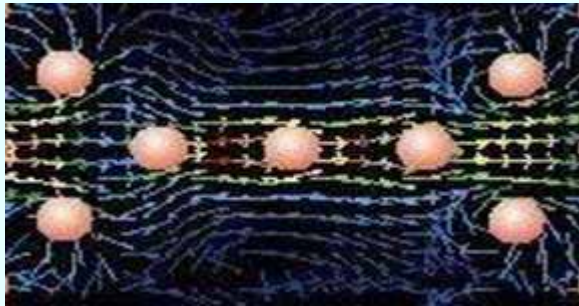


# 科学界からの期待：ナノテクノロジー（４）

## 強相関ナノ物質の輸送現象シミュレーション

### ナノ物質中の量子的流れの高精度な解明

#### 現状



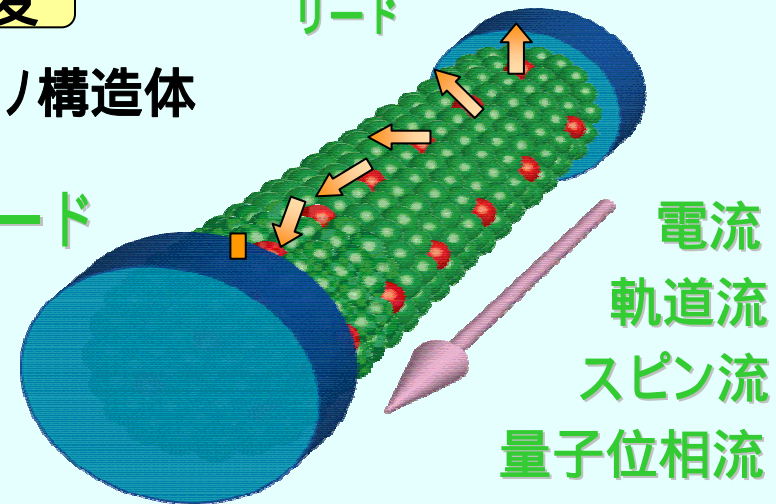
クラスタ(10原子)のシミュレーションで  
数日(逐次処理計算機: 0.15テラFLOPS)

#### 今後

ナノ構造体

リード

リード



約1,000倍の精度

ナノ構造体(数百原子)のシミュレーション  
数日(逐次処理計算機: 0.2ペタFLOPS)

従来、10原子(ピコ秒)程度であったものが、数百原子程度(ナノ秒)の高精度シミュレーションの実現により、量子現象などが解明でき、量子暗号・量子計算などの実装が可能となる。

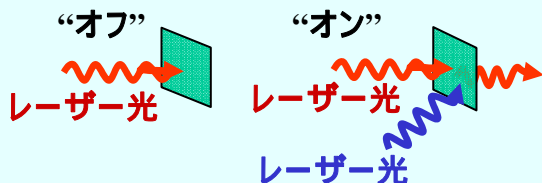
#### 期待される成果

**量子計算、量子暗号処理の実現、スピントロニクス研究**を進展させる。例えば、量子暗号処理の実現によって、情報処理システムでの完全なセキュリティを実現することで、安心・安全な情報化社会の構築に資する。

# 科学界からの期待：ナノテクノロジー（5）

## 強相関電子の特性を利用した超高速光スイッチ開発のための 光励起状態緩和過程シミュレーション

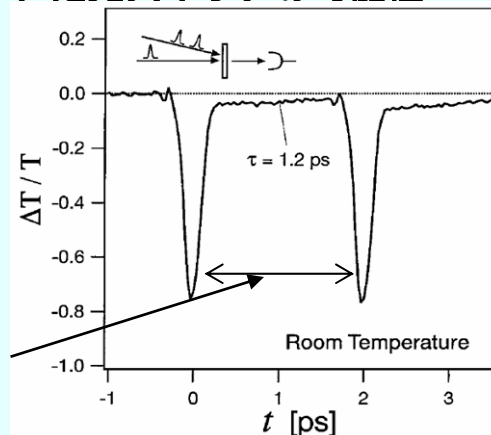
### 光スイッチの概念図



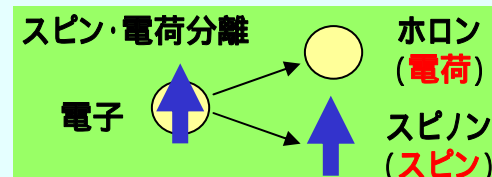
光励起状態の緩和時間がスイッチ時間を決定

2ピコ秒 = 0.5テラヘルツでの繰り返し可能

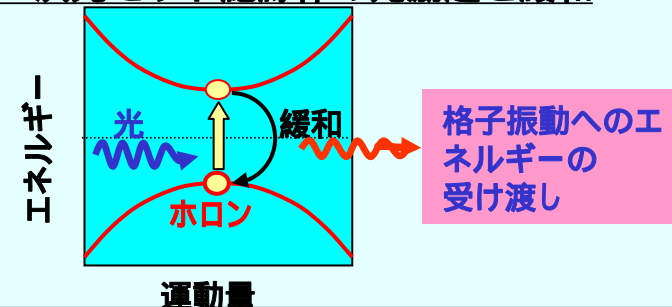
### 一次元強相関モット絶縁体を用いた光スイッチの可能性



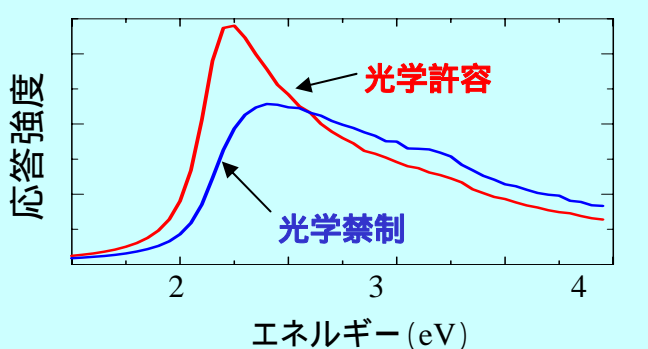
### 電子の内部自由度の分離



### 一次元モット絶縁体の光励起と緩和



一次元強相関モット絶縁体の光励起状態の動的密度行列繰り込み群法による計算例：64原子



### 光励起状態の緩和過程シミュレーションの規模と性能

緩和過程計算には格子振動の効果が必要

例：100原子の場合

性能	1 テラFLOPSF	1 ペタFLOPS
1日での計算規模	格子振動は取り込めない	原子当たり16個までの格子振動
緩和過程	計算不可能	計算可能

### 期待される成果

強相関効果と格子振動効果を同時に取り入れたシミュレーションにより、世界に先駆けてスピン・電荷分離に基づく超高速光スイッチの設計指針を構築する。

# 科学界からの期待：ナノバイオ（1）

## バイオマス<sup>(1)</sup> - 化学エネルギー転換技術の確立 (3次元RISM<sup>(2)</sup>/FM0シミュレーション)



1再生可能な、生物由来の有機性資源で化石資源を除いたもの(廃棄物や端材、飼料作物など)。石油・石炭に比べて有害物質が少ない。  
2分子研 平田教授らが開発した統計分子力学的理論

従来、**全く不可能だった酵素反応解析**が科学理論の開発と**10ペタFLOPS級の計算性能**で実現可能

### 期待される成果

- ・**高性能触媒や酵素の開発により、バイオマス - 化学エネルギーの転換技術が確立し、コスト性能比が優れかつ低公害を実現し、エネルギー問題を解決する。**