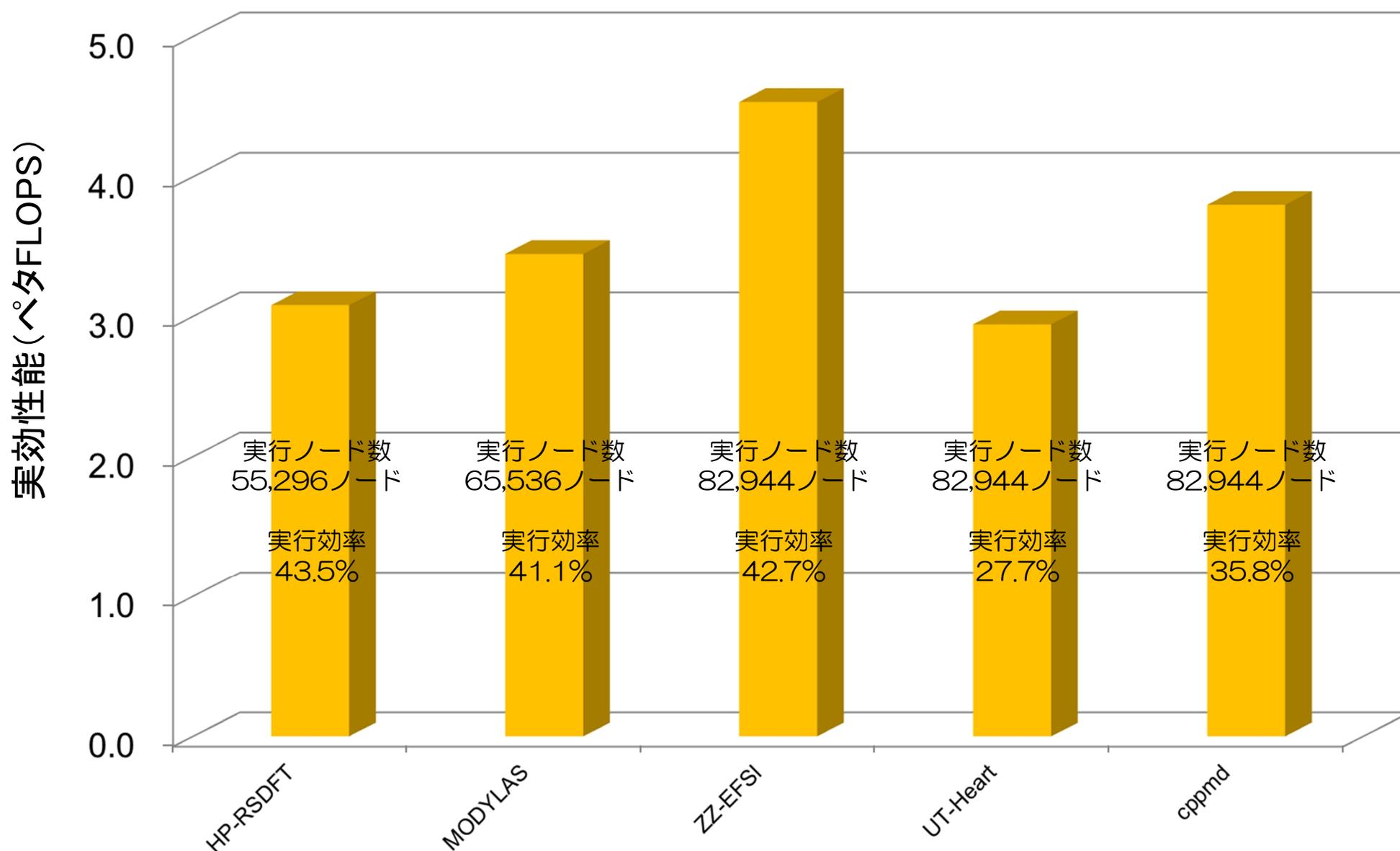


(2)-4 グランドチャレンジアプリケーションで達成した高実効性能

5本のアプリが実効性能でペタFLOPS超えを達成！



(2)-5 グランドチャレンジアプリケーションを活用した成果例

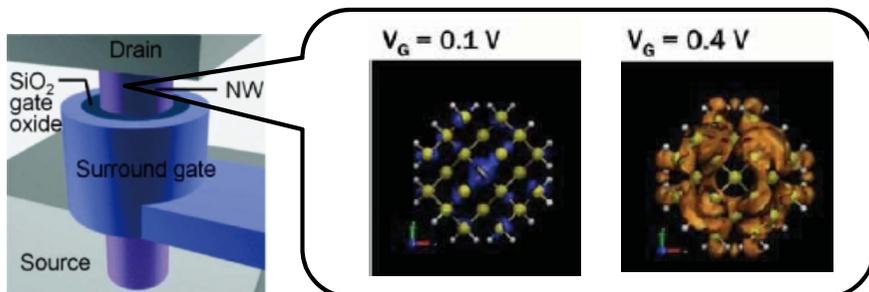
● シリコンナノワイヤーの電子機能予測シミュレーション (研究代表者: 東京大学・押山淳、岩田潤一)

ナノレベルの精密な電子状態シミュレーションにより、次世代半導体として期待されているシリコンナノワイヤーに流れる電子分布を世界で初めて解明することに成功。

ポストスケール時代を迎えた半導体テクノロジーにおいては、ワイヤー、チューブなどの新奇ナノ構造、ナノ物質を起爆剤とするテクノロジーの新たな展開が望まれており、シリコンナノワイヤーは、微細化限界を打破する次世代半導体として期待されている。

今回、数万個のシリコン原子からなる径1~20nmのワイヤーの電子状態計算を、実空間第一原理ナノ物質シミュレータHP-RSDFTを用いたシミュレーションで世界で初めて実現した。その結果、電圧や断面形状により流れる電子の密度分布が異なる等の特性が分かり、量子論を考慮したナノサイズの最適なデバイス構造を設計できることがわかった。また、同様の計算手法でシリコン上ゲルマニウムナノドット自己形成過程の実験結果を再現できることも明らかとなった。

今回開発した計算手法を活用し、ナノ構造デバイスのものづくりを演繹知に基づくものにシフトさせ、研究開発の競争力強化につなげる。



径1~20nm
Siナノワイヤー(NW)

Siナノワイヤー断面の電流密度分布。
電圧により流れ方が異なる。

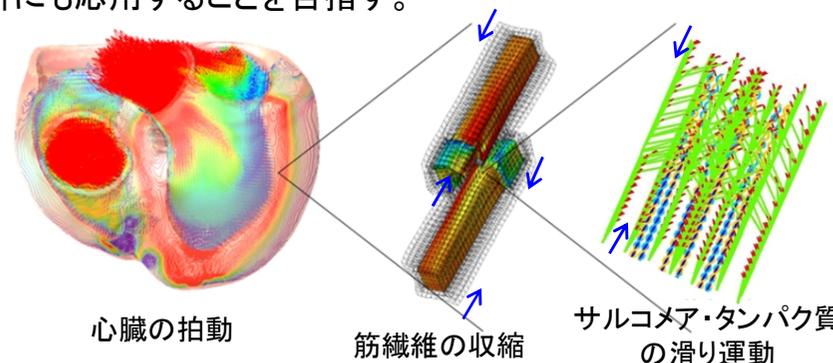
● 心疾患のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション (研究代表者: 東京大学・久田俊明)

心臓の難病の一つである肥大型心筋症の病態を、サルコメア・タンパク質という分子レベルの変異から細胞、心臓の動きまでを計算して解析することに成功。

突然死・心不全などを引き起こす肥大型心筋症は遺伝子の連鎖解析によりミオシンを中心としたサルコメア・タンパク質の変異が原因であると特定されたが、その後の遺伝子改変動物を使用した検討によっても病態のメカニズムには不明な点が多く残されている。

ヒトの臓器(心臓)内の特定の分子の性質を自由に改変し、その挙動を拍動する心臓の中で測定できるというマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータUT-Heartの特性を活用し、肥大型心筋症に認められる変異ミオシンの機能異常と多彩な臨床病態との関係についての検討を行い、変異ミオシンが拡張不全や錯綜配列などの特有な病態を引き起こす過程を明らかにすることができた。

今後はサルコメアモデルを更に精密化することで、実験では分析が困難である心臓の巧妙なポンプ機能の本質解明に関わる新知見を得ると共に、ミオシン以外のタンパクの機能異常が引き起こす疾患の解析にも応用することを目指す。



心臓の拍動

筋繊維の収縮

サルコメア・タンパク質の滑り運動