

大規模第一原理DFT計算の開発と応用

Keywords: 密度汎関数(DFT)法, 電子状態計算, 金属ナノ粒子触媒

ナノセオリー分野 量子物性シミュレーショングループ

中田 彩子

NAKATA.Ayako@nims.go.jp | <http://www.nims.go.jp/cmssc/fps1/index.html>



研究の背景

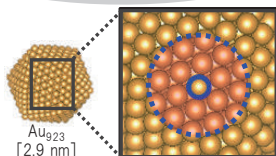
- 材料開発における計算機シミュレーションの重要性の高まり
- 計算コストの問題による高精度シミュレーションの限界
- 複雑な系を高精度にシミュレーションできる手法の必要性

研究の狙い

- スーパーコンピュータの利用に適した高精度・高効率な大規模DFT計算手法の開発
- 大規模計算の結果を効率的に解析する手法の開発
- 上記による実在系の高精度シミュレーション

最先端研究トピックス

分子軌道様の関数を用いて
高精度な大規模DFT計算を可能に！
(マルチサイト法の開発・整備)



大規模DFT計算手法の開発

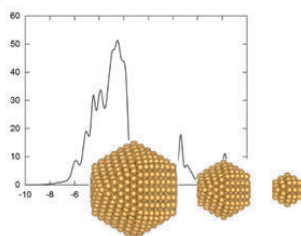


大規模表面・界面への応用

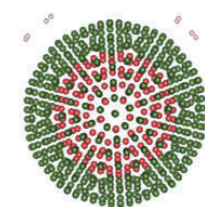
櫻井・杉浦法を用いた
大規模電子状態解析



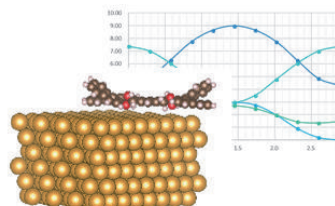
Si(001)表面上のGeクラスター(23,737原子)におけるFermiレベル近傍での電子分布



金属ナノ粒子の構造・
電子状態のサイズ・サイト依存性



コアシェル型ナノ粒子の
構造・電子状態解析



金属表面上の
分子の安定性評価

文献

- A. Nakata, Y. Futamura, T. Sakurai, D. R. Bowler and T. Miyazaki, J. Chem. Theory Comput. 13 (2017) 4146.
- A. Nakata, D. R. Bowler and T. Miyazaki, Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 31427.
- T. Tsuneda, R. K. Singh, and A. Nakata, J. Comput. Chem. 38 (2017) 2020.

まとめ

- 新しい高精度大規模計算手法の開発
- 大規模系の電子状態の高効率な解析
- 含金属材料の大規模電子状態計算

実用化への目標

- 開発した手法のスピン材料への拡張
- 複雑界面・表面の化学反応への応用
- 励起状態計算への拡張