

大規模第一原理手法開発とナノ材料への応用

Keyword : 密度汎関数法、第一原理計算、オーダーN法、ナノ構造材料

研究の背景

現実の材料・デバイスの物性は界面構造に強く依存します。界面構造を含んだ系やナノ構造材料、生体分子のような複雑巨大系に対しても信頼性の高い第一原理計算によって原子レベルで構造と物性を明らかにすることが求められていますが、通常的第一原理計算手法では計算で扱える系の大きさに限界があります。

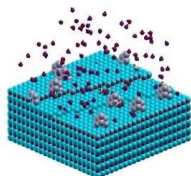
研究の狙い

数万、数十万原子以上を含む巨大系に対しても第一原理計算を可能とするオーダーN法の開発を行っています。ナノ構造材料や生体系、さらに複雑な界面に対しても第一原理計算による構造最適化や分子動力学によって、これら巨大系に対する構造と電子状態を明らかにします。

最先端研究トピックス

オーダーN法による大規模第一原理計算の対象

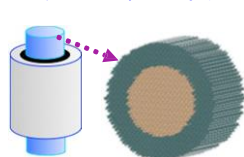
ナノ微粒子(触媒)



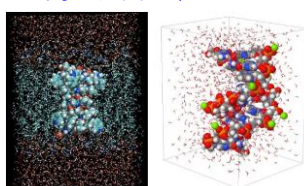
半導体表面ナノ構造



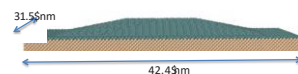
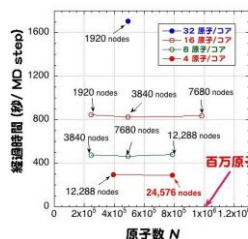
コア・シェルナノワイヤ



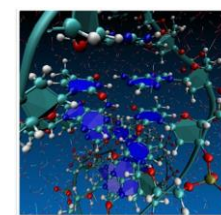
イオンチャネル、DNA



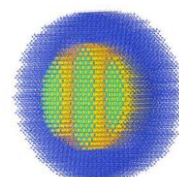
百万原子系に対する第一原理シミュレーション



構造最適化(20万原子系)



第一原理分子動力学



ナノワイヤの構造と波動関数

文献

- M. Arita, D. R. Bowler and T. Miyazaki, J. Chem. Theory Comput. 10 (2014) 5419.
- A. Nakata, D. R. Bowler and T. Miyazaki, Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 31427.
- D. R. Bowler and T. Miyazaki, Rep. Prog. Phys. 75 (2012) 036503.

まとめ

- オーダーN法DFT計算プログラムの開発
- プログラムの公開
- 全原子第一原理計算によるコアシェルナノワイヤの構造最適化と電子状態計算

実用化の目標

- 実材料における界面を含んだ系に対する構造と特性を大規模第一原理計算で明らかにする。
- 構造がナノスケールで制御された次世代デバイスの設計指針を与える理論研究



ナノセオリー分野 量子物性シミュレーショングループ

宮崎 剛

E-mail: MIYAZAKI.Tsuyoshi@nims.go.jp

URL: <http://www.nims.go.jp/cmsc/fps1>