

現状：電子励起によるグラファイトからダイヤモンドの創製法の第一原理デザイン
●内殻励起および価電子励起によりグラファイトを不安定化し、常温常圧下でダイヤモンドを創成する方法をデザインし、実証した。

将来展望：励起状態を利用したナノファブリケーション法やナノダイナミックスによる新機能ナノデバイスのデザインと創製が可能になる。
●電子励起によるナノ超構造のデザインとナノダイナミックスのデザインにより新機能ナノデバイスのデザインと実証が可能になる。

Jan. 2 Appl. Phys. Vol. 41 (2007) pp. L817-L819
 Part 2, No. 7B, 15 July 2002
 ©2002 The Japan Society of Applied Physics

Express Letter

Ab initio Design on the Diamond Synthesis Method by Core Excitation
 Hiroyuki NAKAYAMA¹ and Hiroshi KATAYAMA-YOSHIDA^{1,2}

¹Department of Condensed Matter Physics, The Institute of Scientific and Industrial Research (ISIR), Osaka University, 8-1 Mihogaoka, Ibaraki, Osaka 567-0047, Japan
²Department of Computational Nanomaterials Design, Nanoscience and Nanotechnology Center, The Institute of Scientific and Industrial Research (ISIR), Osaka University, 8-1 Mihogaoka, Ibaraki, Osaka 567-0047, Japan
 (Received June 3, 2002; accepted for publication June 14, 2002)

INSTITUTE OF PHYSICS PUBLISHING JOURNAL OF PHYSICS: CONDENSED MATTER
 J. Phys.: Condens. Matter 15 (2003) R1077-R1091 PII: S0953-8984(03)39616-X

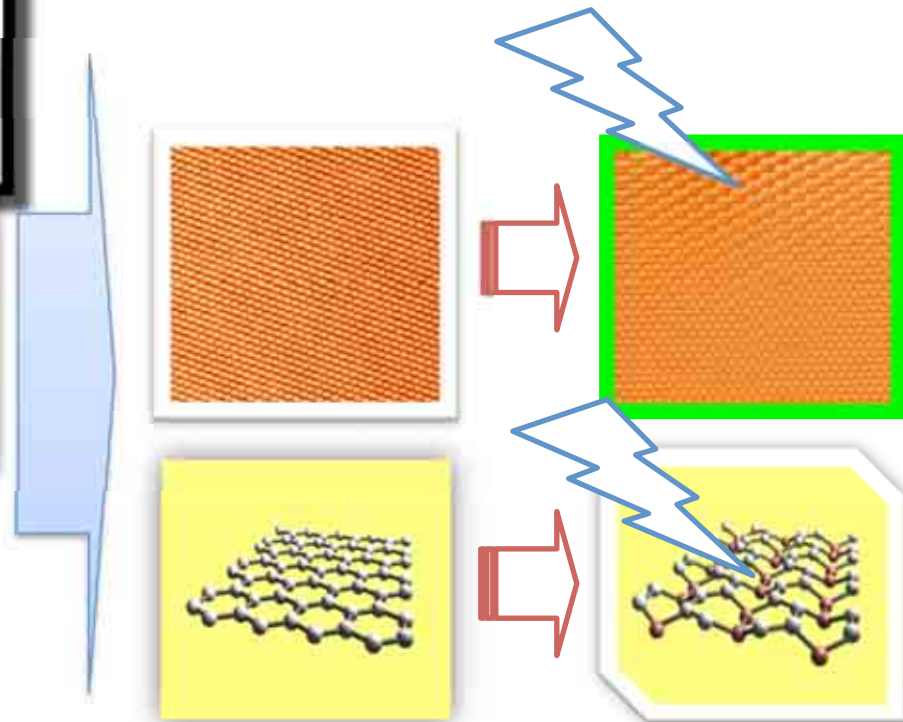
TOPICAL REVIEW

Direct conversion of graphite into diamond through electronic excited states

Hiroyuki Nakayama¹ and Hiroshi Katayama-Yoshida^{1,2}

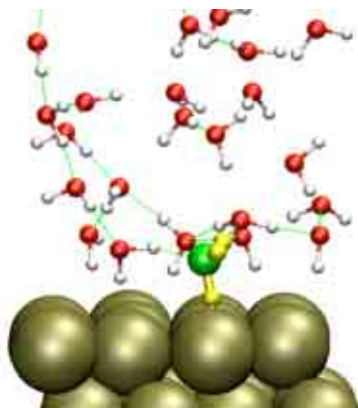
¹ Department of Condensed Matter Physics, The Institute of Scientific and Industrial Research (ISIR), Osaka University, 8-1 Mihogaoka, Ibaraki, Osaka 567-0047, Japan
² Department of Computational Nanomaterials Design, Nanoscience and Nanotechnology Center, The Institute of Scientific and Industrial Research (ISIR), Osaka University, 8-1 Mihogaoka, Ibaraki, Osaka 567-0047, Japan

Japanese Patent : 3232470
US Patent : US5891241
Germany Patent : DE69604976T2
EU Patent : EP1522530 A1,
EP0752487B1
China Patent : ZL03812329.0
Taiwan Patent : 92114330

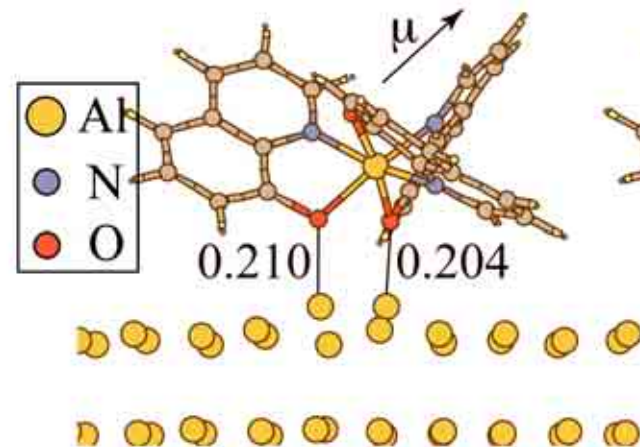


界面反応の第一原理シミュレーション

従来成果



Pt電極表面上での水素発生過程
(阪大、東大、産総研、NECの共同)



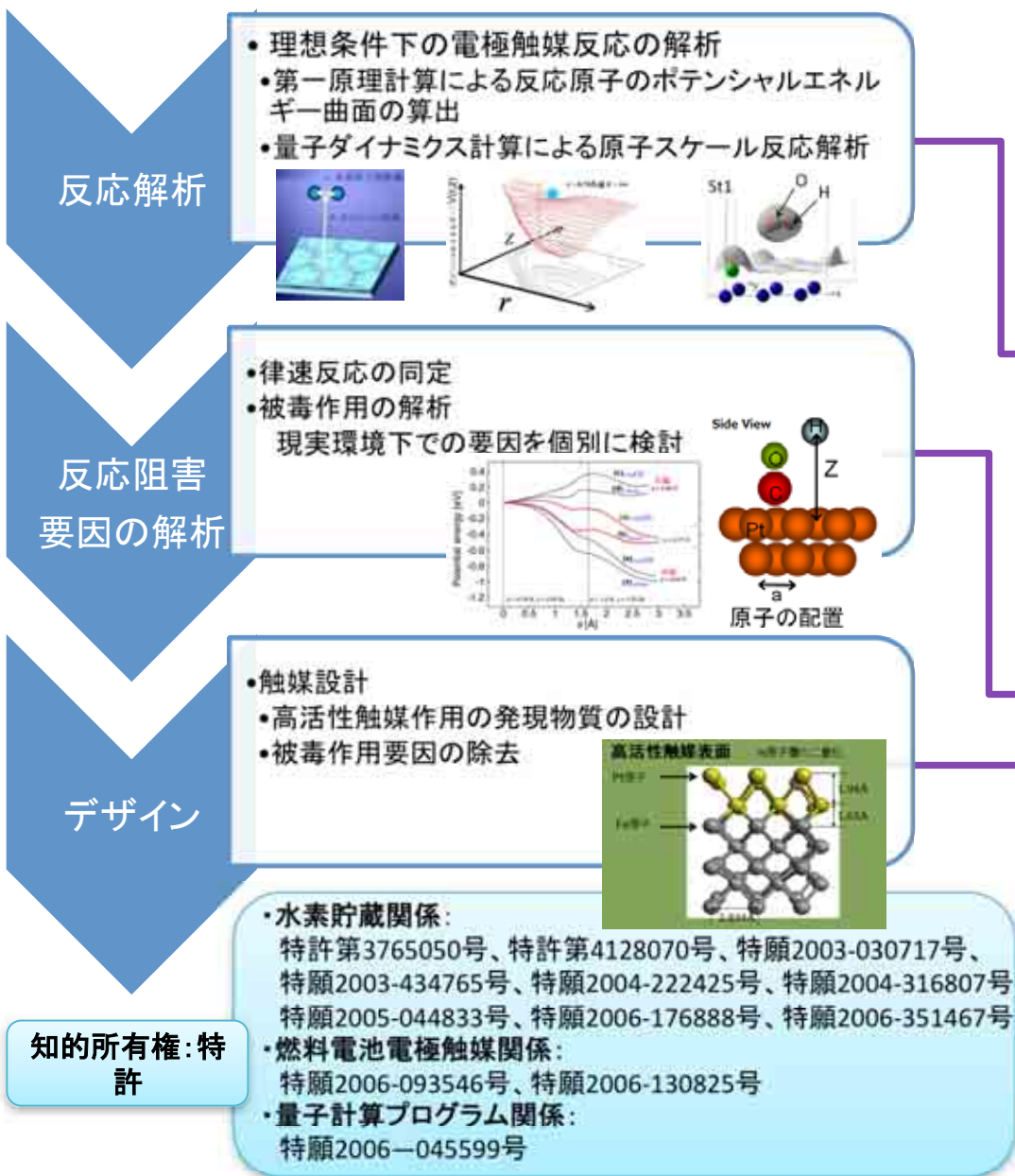
有機/金属界面の構造と電子状態

今後の展望

- 光触媒反応の解明とデザイン
- 半導体表面のエッチング過程の解明とデザイン

現状: クリーンエネルギー機関: 燃料電池
電極触媒反応の原子スケール解析と触媒設計

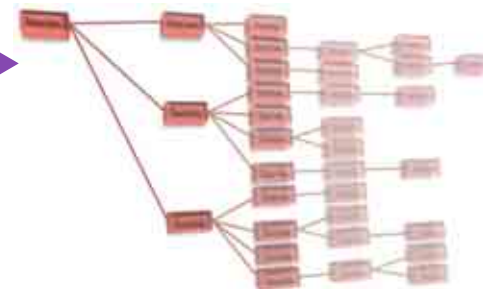
将来展望: 原子スケールの触媒反応
解析と設計の汎用化



ペタフロップ機関の効率的活用による
大規模多重空間の解析と探査

環境問題・資源枯渇問題の絡み合う社会問題に対処する知的物づくりに貢献

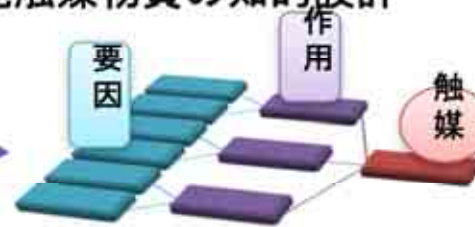
・ターゲット反応の反応経路探査



・律速段階 & 反応阻害要因の同定



・高機能触媒物質の知的設計





高精度計測と計算機支援 による「ものづくり」

CMD[®]

基礎工での実験・理論連携の例

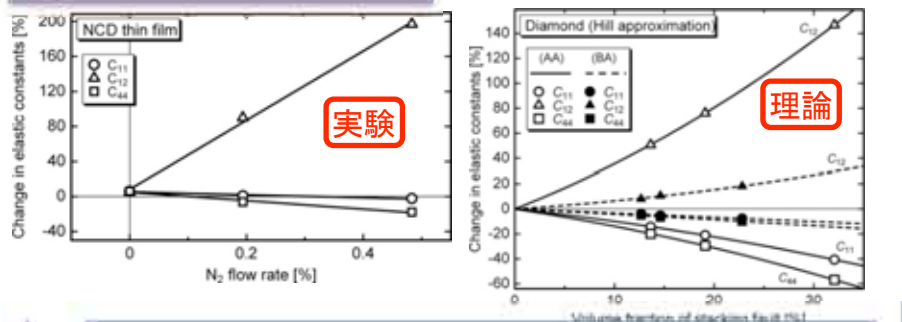
実験グループ(合成・計測・評価)との連携による計算機支援による物質設計

ナノ結晶ダイヤモンド解析 ～ナノ組織の同定～

実験データ

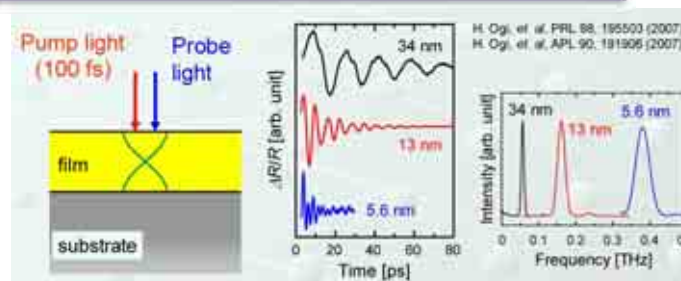
理論モデル構築

Tanigaki, Tanei, Kusakabe,
Ogi, Nakamura, Hirao

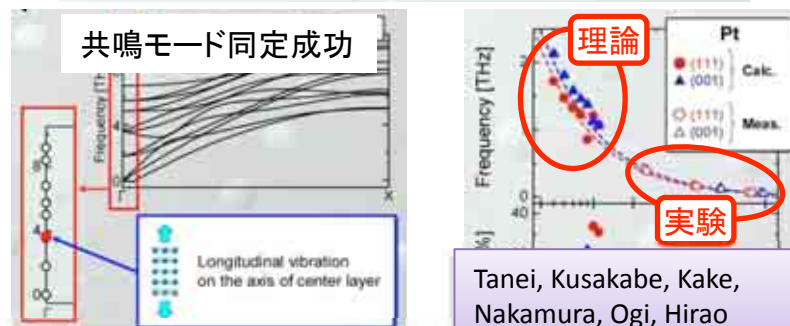


- 超高周波表面弾性波フィルタ
- パワー半導体デバイス への応用

共鳴音響フォノン分光の解析 ～コヒーレントフォノンの同定～



共鳴モード同定成功



Tanei, Kusakabe, Kake,
Nakamura, Ogi, Hirao

- 精密計測結果を再現する計算
- 反射波分光へ: 物質相動的变化

ものづくりの「基準・規格」が作られつつある！



計算機による最高精度の 「ものづくり」

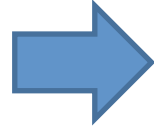
with



CMD[®]

最高精度をもつ物質設計:

1. 技術開発
2. 技術評価



規準・規格

Knowledge: IP based on rigorous theory

Skill: World record of accuracy

電子状態の第一原理解析
～密度汎関数変分法～

既存の世界標準を超える精度

- Multi-ref DFT beyond LDA.
- Operator analysis beyond Conf. Int.
- Up conversion beyond down folding.
developed by Kusakabe & Maruyama.

Int. Property of OU (2009).
Int. Standard.

- 世界最高精度
 - 世界最高効率
- の第一原理計算が評価できる。



量子多体系の物理量評価
～数値厳密解析法～

- Boundary Modified DMRG
- Accel. Conv. Series method

World record of accuracy
in det. of the Haldane gap. (2009)
Cf. Ueda & Nishino, arXiv (2009).
Cf. Nakano & Terai, JPSJ (2009).

多体効果を示す物理量の決定を

- 世界最高精度
 - 世界最高速度
- で実現！



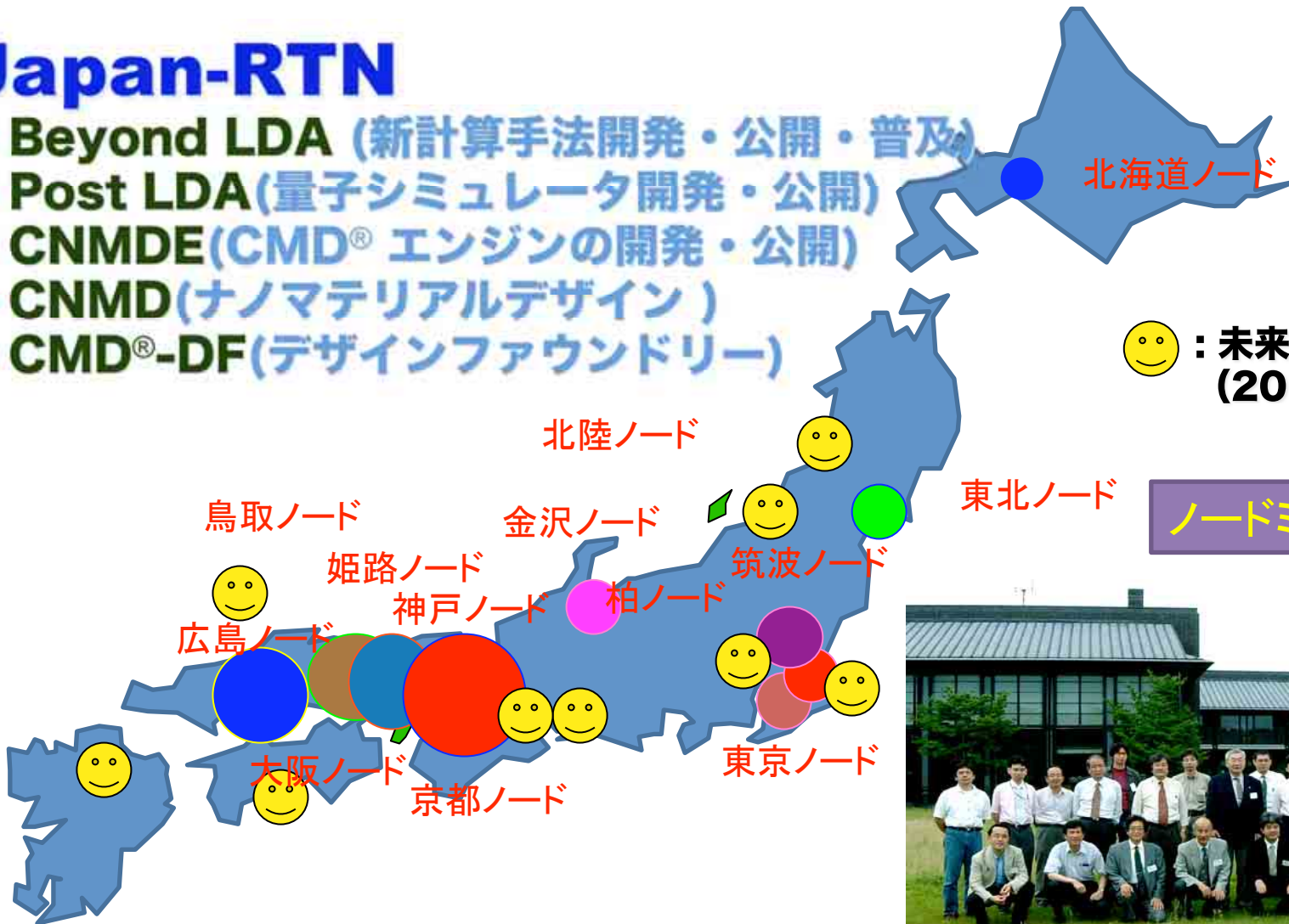
計算機ナノマテリアルデザイン (CMD[®])

オール・ジャパンによる人財育成・教育研究ネットワーク

JAPAN Research Training Network (RTN)

Japan-RTN

- Beyond LDA (新計算手法開発・公開・普及)
- Post LDA (量子シミュレータ開発・公開)
- CNMDE (CMD[®] エンジンの開発・公開)
- CNMD (ナノマテリアルデザイン)
- CMD[®]-DF (デザインファウンドリー)



ノードミーティング

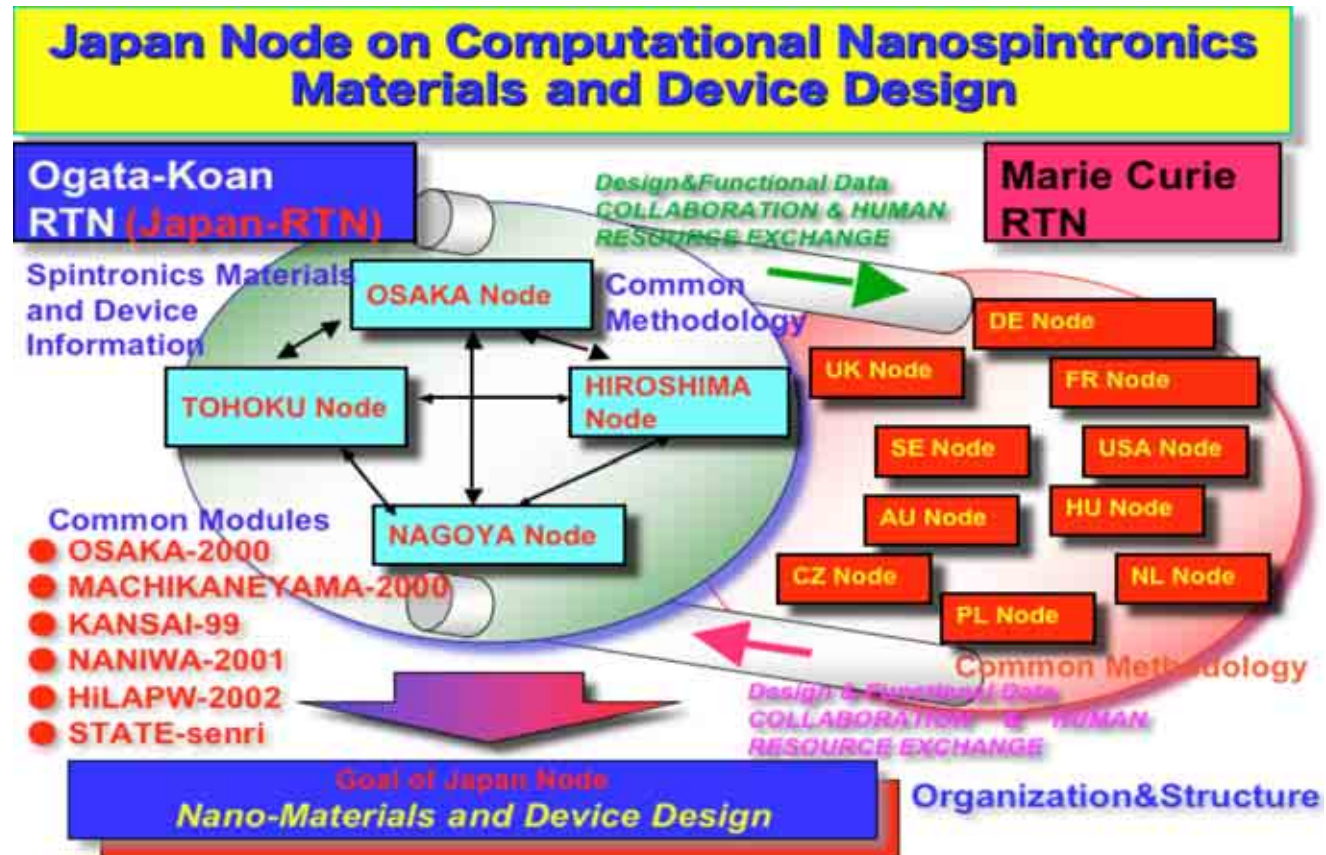


計算機ナノマテリアルデザインチュートリアルの実績

これまでの受講生（計535名）	受講時の所属・役職名
大学	教授、助教授、講師、助手、技官、研究員、学生
高専	教授、助教授、講師
独立行政法人研究所	主任研究員、副主任研究員、研究員
特殊法人研究所	主任研究員、副主任研究員、研究員
民間企業	旭硝子、アドバンストアルゴリズム、IBM、出光興産、NEC、NTTマイクロシステム、エプソン、FDK、オムロン、関西電力、キャノン、京セラ、けいはんな、神戸製鋼所、三洋電機、上越電気製作所、信越化学工業、新日本製鐵、住友電気、ソニー、チッソ石油化学、TDK、東芝、東芝研究開発センター、東芝ライテック、トヨタ自動車、豊田中央研、日産化学工業、日本ガイシ、日本軽金属、日本サーモスタット、日本触媒、日本総研、半導体エネルギー研究所、日立ハイテクノロジーズ、日立マクセル、富士通、富士フイルム、松下テクノリサーチ、松下電器産業、松下電工、松下電池、三井金属、三菱化学、三菱重工、三菱電機、村田製作所、大和崑崙企画、リコー、その他

CMD分野ネットワーク

- 国際ネットワーク(ヨーロッパ)



JAPAN-EU RTN; Core-to-Core Program

<Germany (IFF, FZ-Julich) : **ISIR-Julich Exch.PG**>

<UK (Daresbury Laboratory) >

<France (CNRS, Orsay) : **Osaka Univ.-CNRS Exch.PG**>

❖ Germany: **Prof. Peter H. Dederichs**

<IFF-FZ-Julich>

- Munich Univ.
- Max Planck Institute



❖ UK : **Prof. Walter Temmerman**

<UK (Daresbury Laboratory) >

- Lancaster Univ.
- Keele Univ.
- Warwick Univ.
- Sheffield Univ.



❖ France: **Prof. Frederic Petroff**

<France (CNRS, Univ. Paris-Sud, Orsay) >

- ULP Strusburg
- CNRS, Strusburg
- Clausthal Univ.



CMD分野ネットワーク

アジアネットワーク

- CMDチュートリアルコースにアジアの参加者
- 英語によるチュートリアルを実施
- 平成20年度にはアジア地域でも実施した
 - インドネシア・バンドン工科大学
 - フィリピン・デ・ラサール大学
- 平成21年度はベトナム・ハノイに於いても実施の予定

普及活動:CMDワークショップ

計算機マテリアルデザイン (CMD)ワークショップ

日本国内の第一原理計算をはじめとする量子シミュレーション活用のエキスパート養成講座
(2002年より年2回開催、今春第14回)

対象者:大学・国研の研究者、民間企業の研究者、学生

知的物づくりの匠の養成

Asia Computational Materials Design (CMD) workshop

アジアの中の日本の役割

CMD学の啓蒙、研究者養成活動を通じて、日本とアジア諸国との研究者レベルのグローバルパートナーシップ確立

(2008年度インドネシア、フィリピンにて開催済み、2009年度インドネシア、フィリピン、ベトナム開催を予定)

対象者:アジア諸国の研究者、学生



- ・ペタフロップ機関の活用のエキスパート : 計算機マテリアル・デザイナーの育成
- ・ペタフロップ機関の活用分野: 計算機マテリアルデザインの需要の開拓