資料7

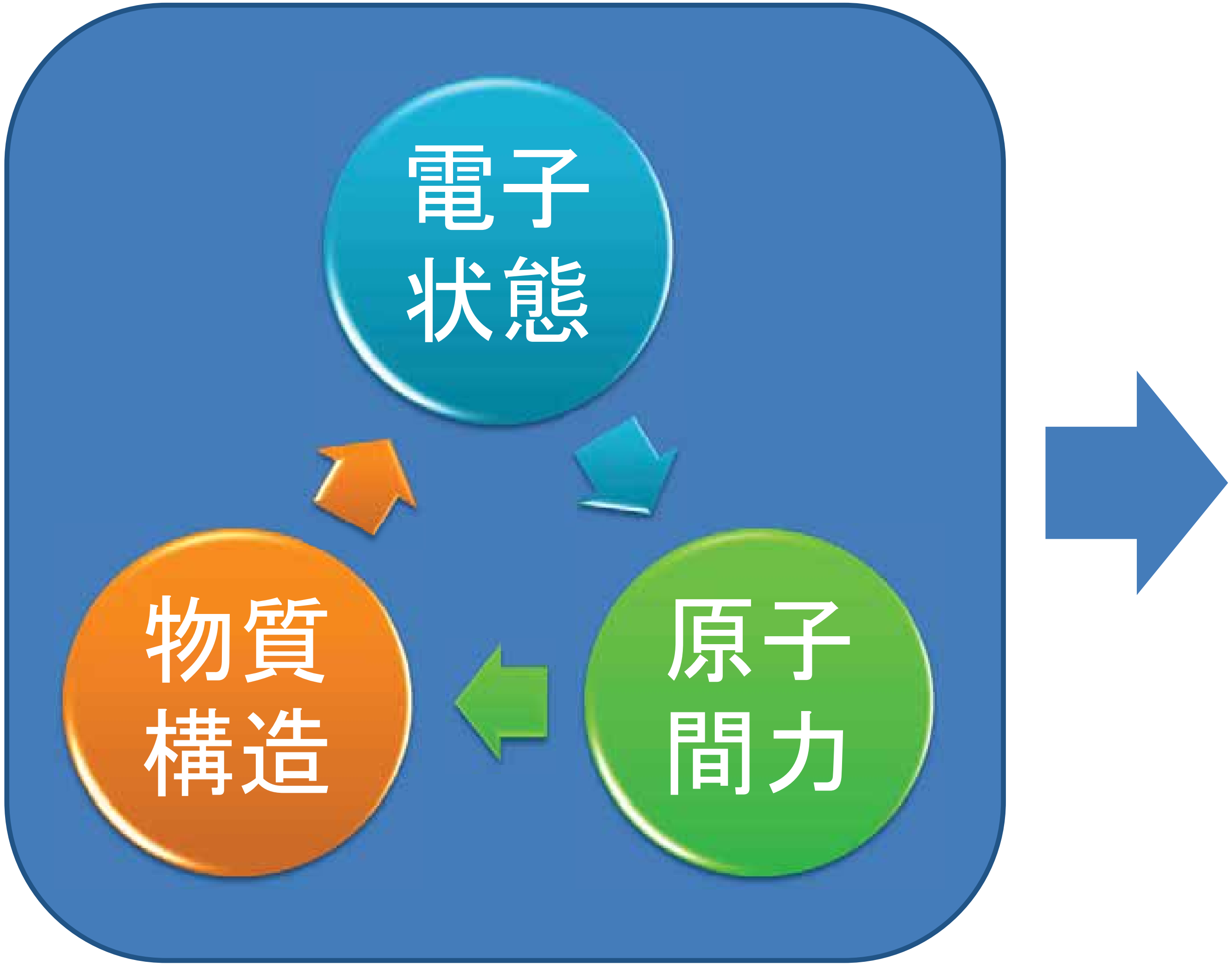
物質科学の基礎研究における
スパコンの必要性

常行真司

東京大学・大学院理学系研究科／物性研究所

cmsi 計算物質科学イニシアティブ

第一原理計算（電子状態計算、分子動力学）



物性

電気的性質
磁気的性質
誘電的性質
光学的性質
力学的性質
熱力学的性質

密度汎関数理論（第一原理計算の基礎理論の一つ）

- 電子の多体問題 ⇒ 平均場の中の**1粒子波動方程式**
- 全エネルギーと**1電子エネルギースペクトル**（バンド構造）

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + u(\vec{r}) + v_{xc}\left[\rho(\vec{r})\right]\right\}\varphi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\vec{r}),$$

交換相関ポテンシャル

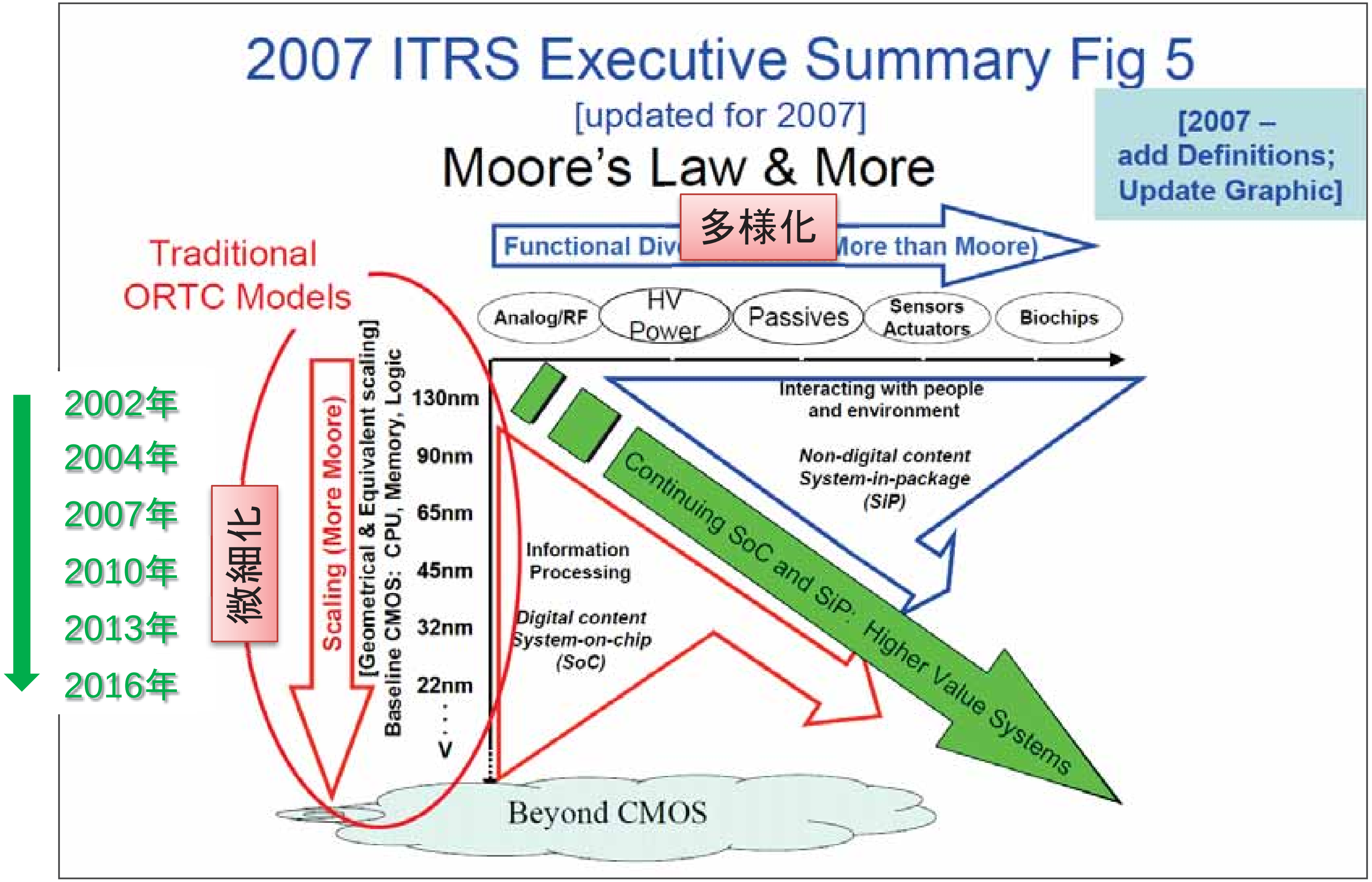
$$\rho(\vec{r}) = \sum_i \left|\varphi_i(\vec{r})\right|^2$$

Kohn-Sham 方程式

Hohenberg & Kohn (1964), Kohn & Sham (1965)

W. Kohn: Nobel Prize in Chemistry, 1998.

将来の半導体デバイス

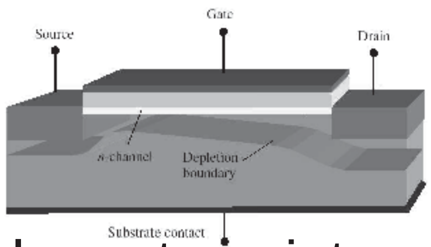


ITRS （国際半導体ロードマップ） http://www.itrs.net/

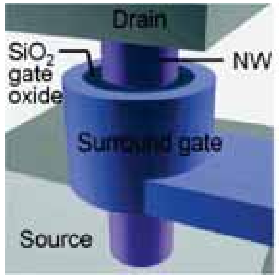
シリコン・ナノワイヤー・トランジスター

押山G

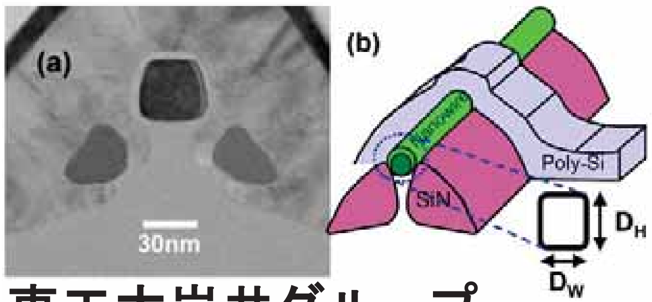
次世代テクノロジーを支える新しいトランジスター



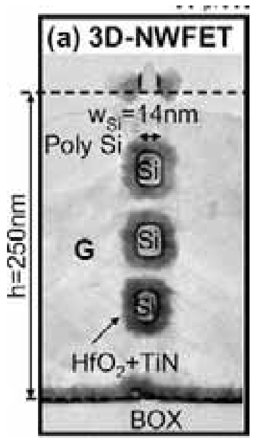
planer transistor



surrounding gate transistor



東工大岩井グループ
（NEDOでの共同研究）
つくばイノベーションアリーナ
との共同

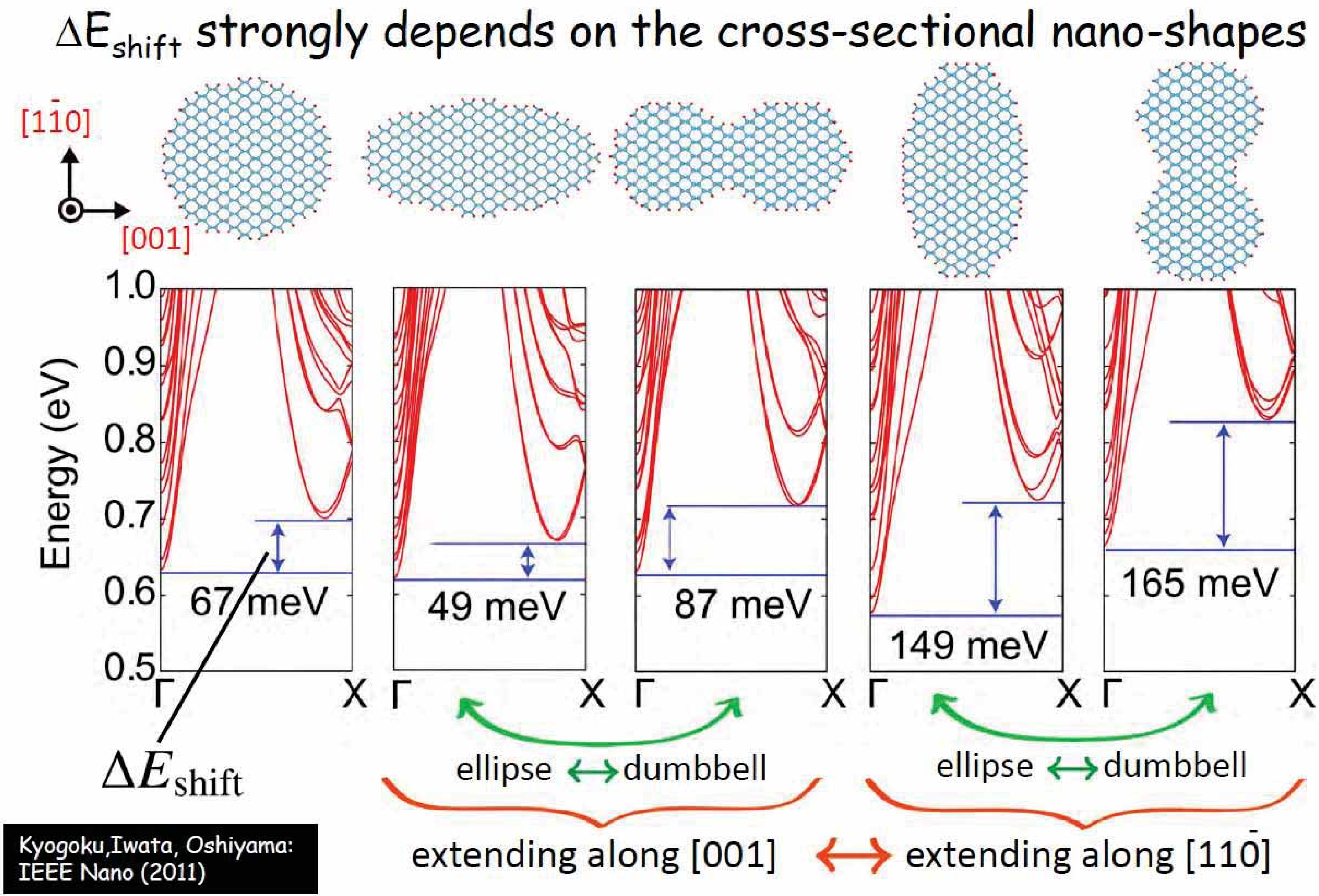


形状、方位、直径、、、
最適なナノ構造は？

量子論計算科学の出番

RSDFTによるSiナノワイヤーの第一原理計算

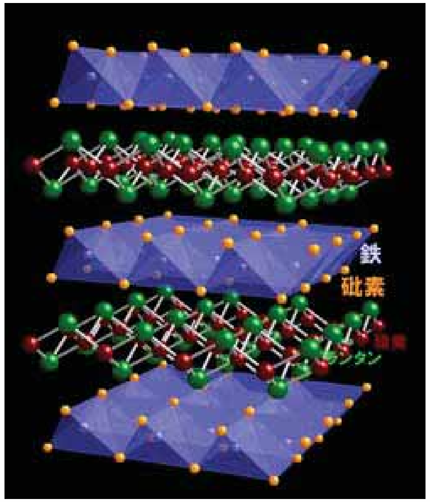
押山G

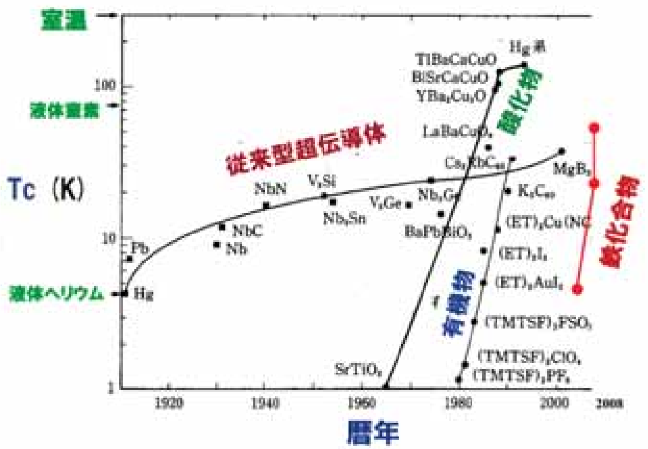


Kyogoku, Iwata, Oshiyama: IEEE Nano (2011)

新しい超伝導材料の開発に向けて

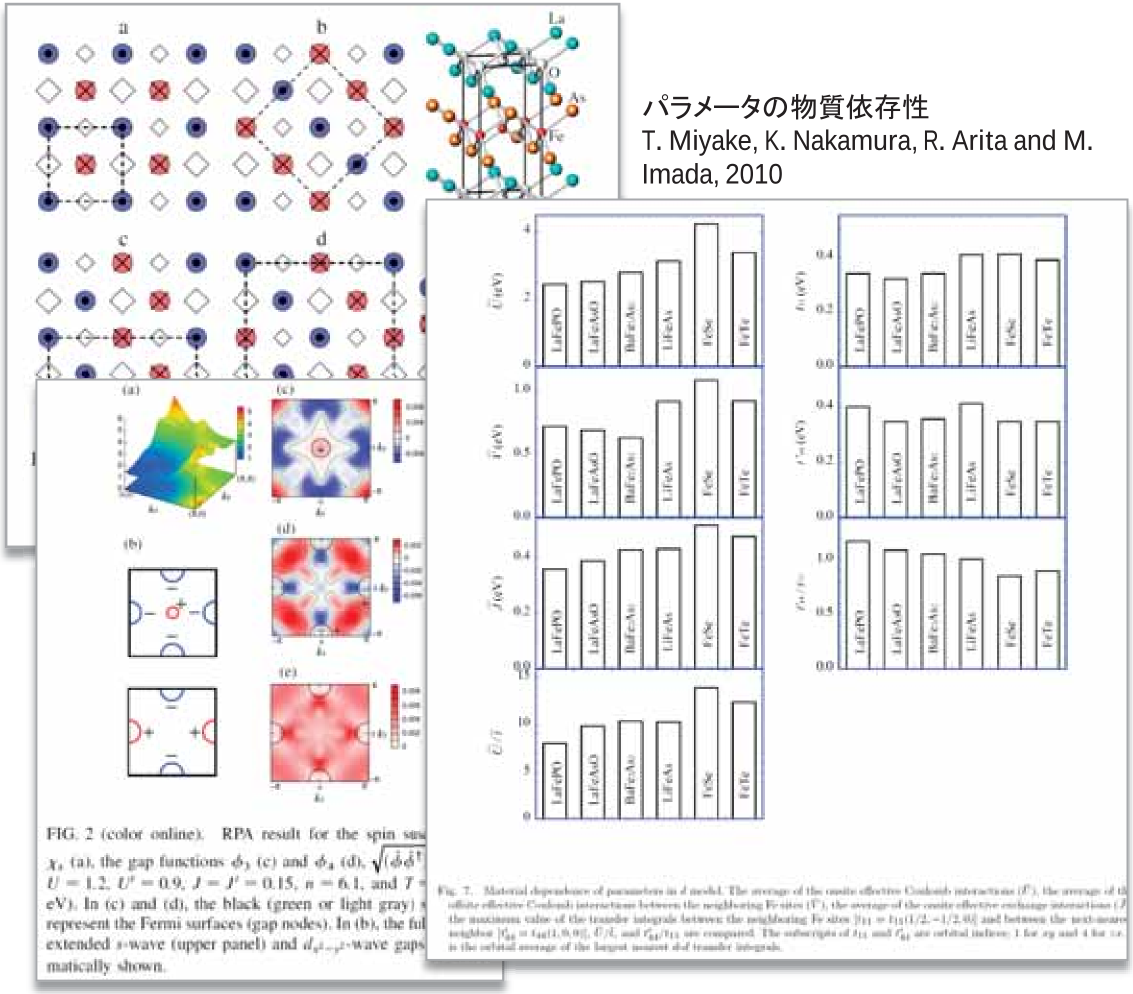
鉄ニクタイド系化合物超伝導体
（東工大 細野グループ, 2008）





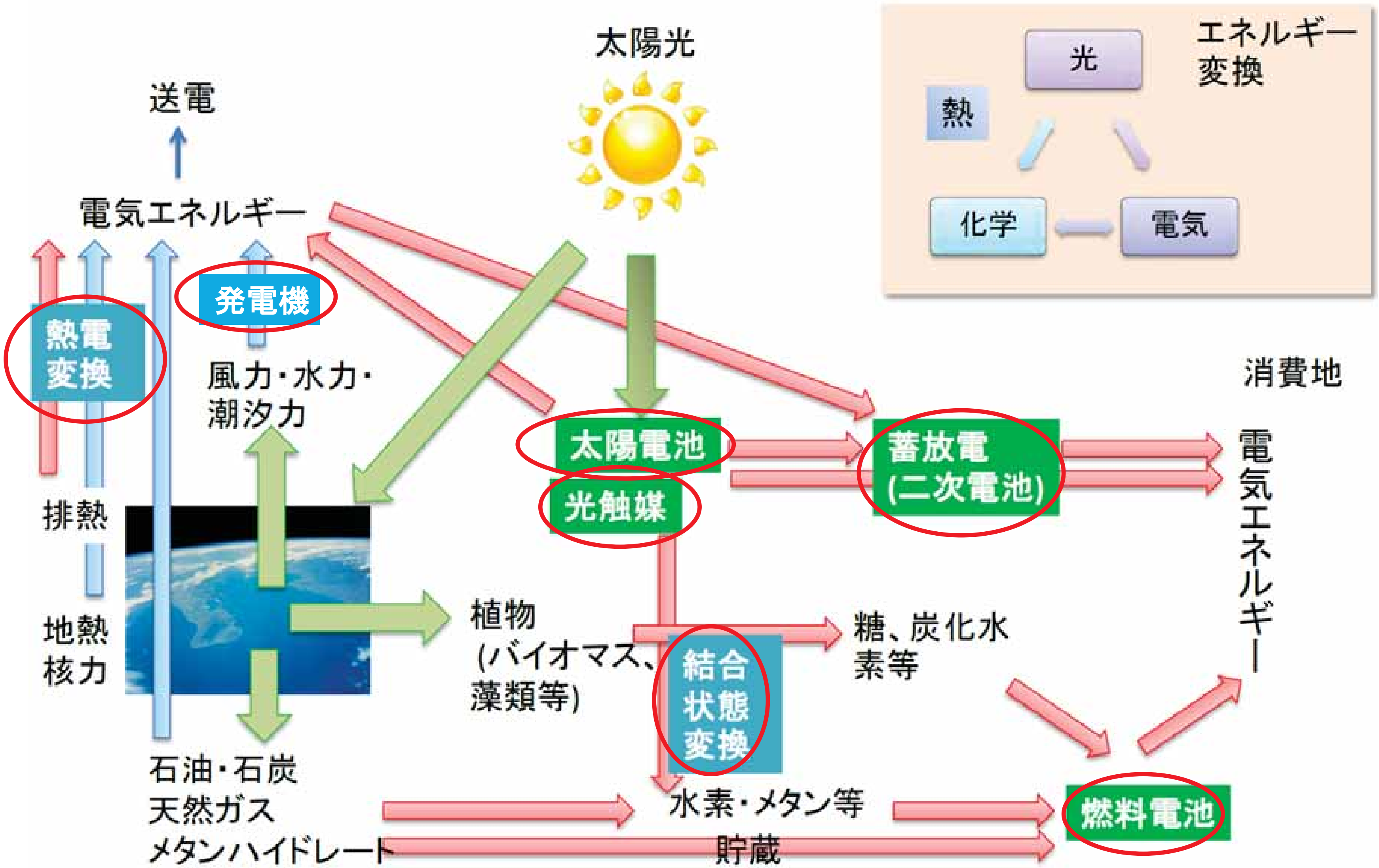
母物質のスピン構造
S. Ishibashi, K. Terakura, H. Hosono, 2008

パラメータの物質依存性
T. Miyake, K. Nakamura, R. Arita and M. Imada, 2010

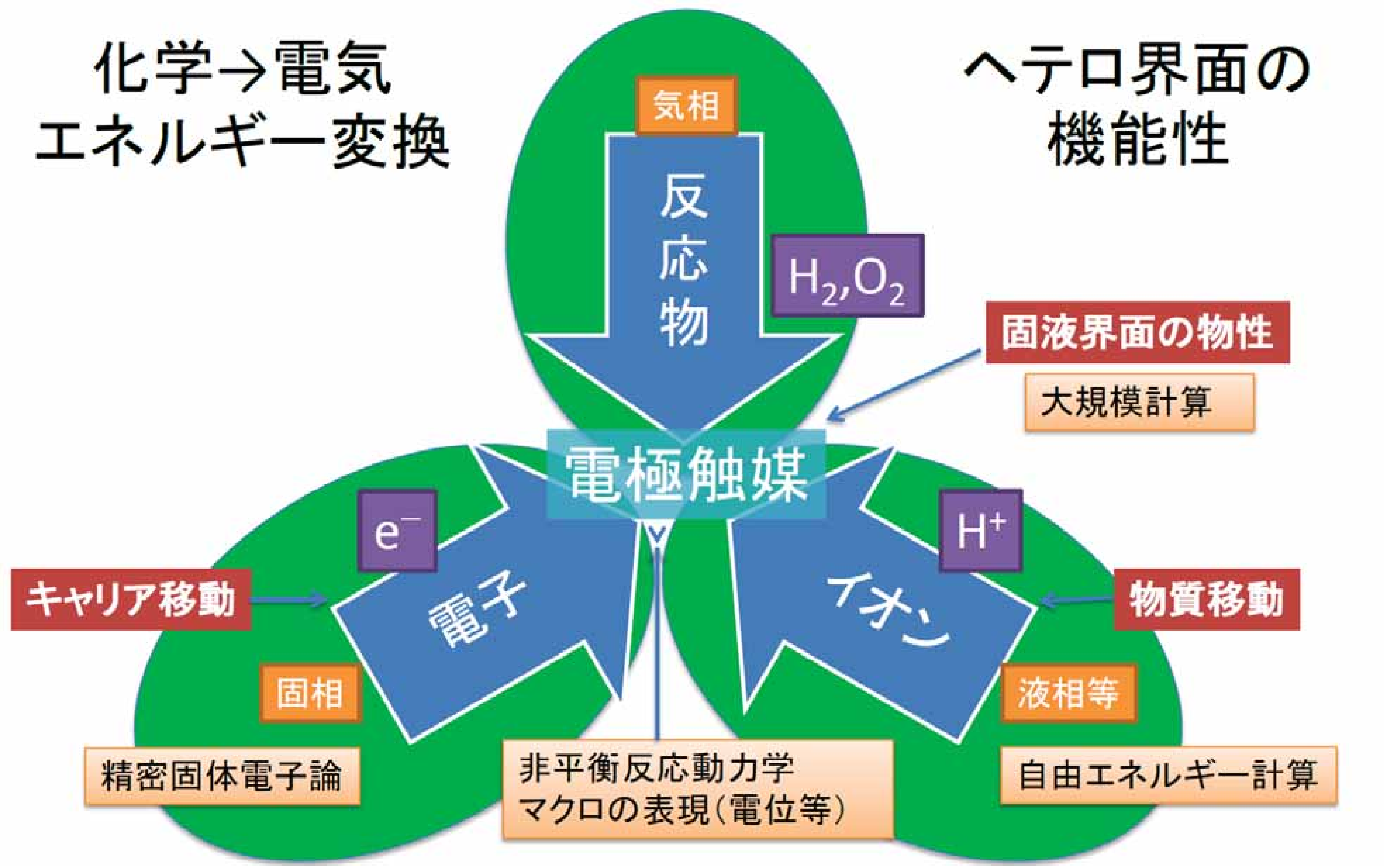


第一原理モデルハミルトニアンによる超電導理論
K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui, Y. Tanaka , H. Kontani and H. Aoki, 2008

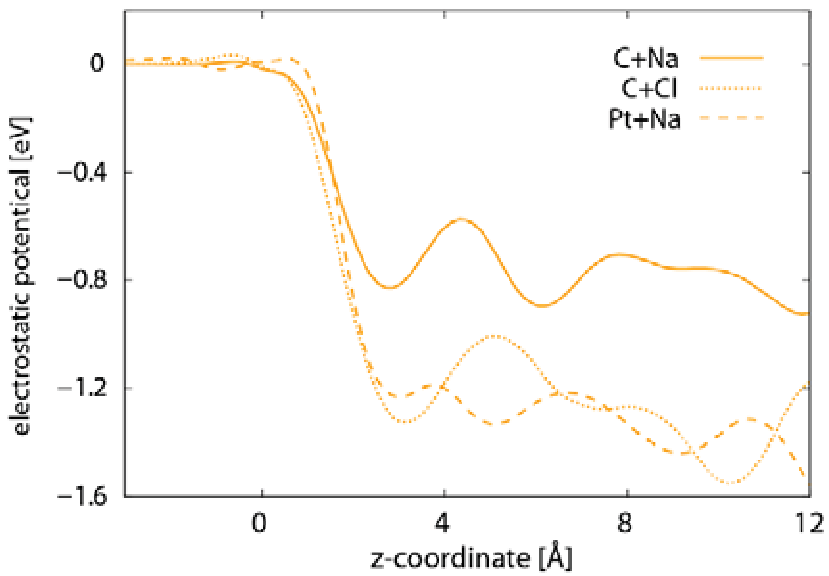
エネルギー問題



CMSI第4部会(杉野)

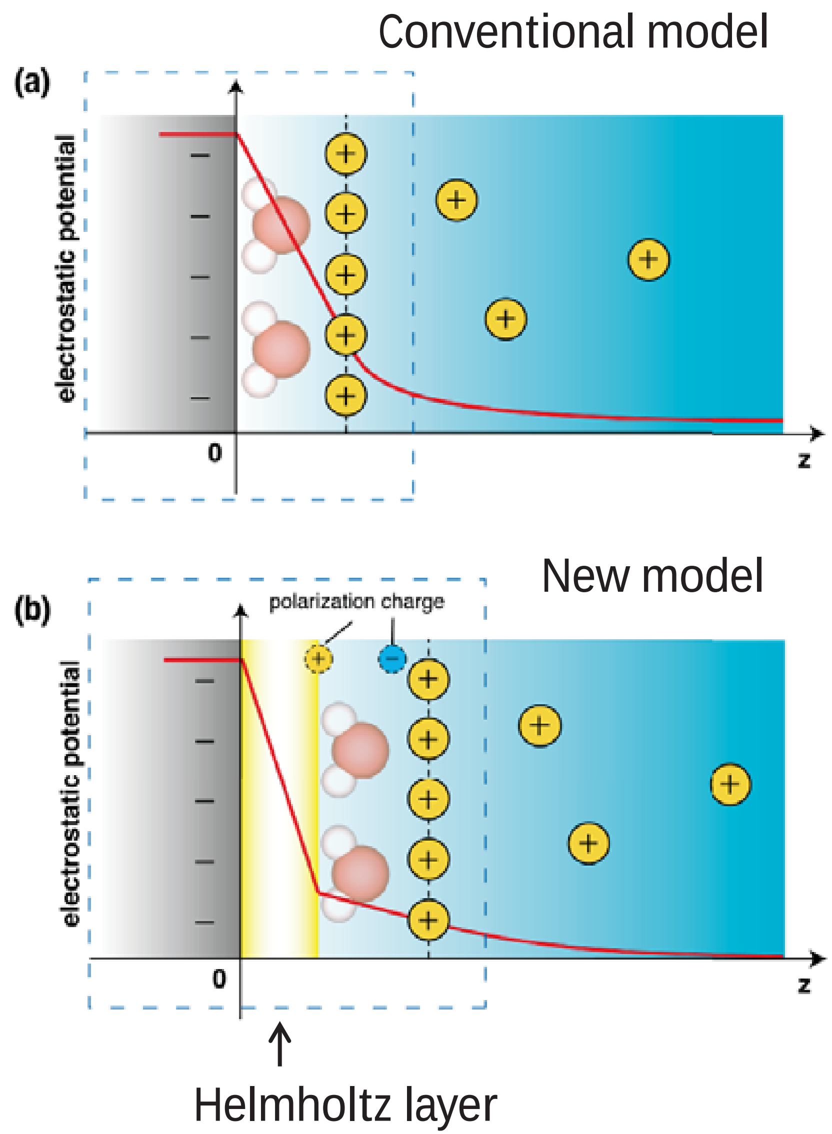

化学→電気
エネルギー変換
ヘテロ界面の
機能性
気相
反応物
H_2,O_2
固液界面の物性
大規模計算
電極触媒
e^-
電子
キャリア移動
固相
精密固体電子論
H^+
イオン
物質移動
液相等
自由エネルギー計算
非平衡反応動力学
マクロの表現(電位等)

電気二重層



FPMD + ESM

Y. Ando, Ph.D. Dissertation (2012)



今後の課題の例

太陽電池: Staebler-Wronski effect

Appl. Phys. Lett. 31, 292 (1977).

Reversible conductivity changes in discharge-produced amorphous Si[a)]

D. L. Staebler and C. R. Wronski

RCA Laboratories, Princeton, New Jersey 08540
(Received 9 May 1977; accepted for publication 17 June 1977)

A new reversible photoelectronic effect is reported for amorphous Si produced by glow discharge of SiH_4. Long exposure to light decreases both the photoconductivity and the dark conductivity, the latter by nearly four orders of magnitude. Annealing above 150°C reverses the process. A model involving optically induced changes in gap states is proposed. The resu[…] physical nature of the material and for its applications in[…] reproducibility of measurements on discharge-produced Si.

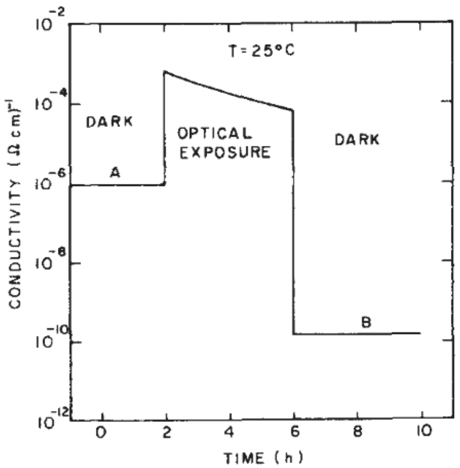
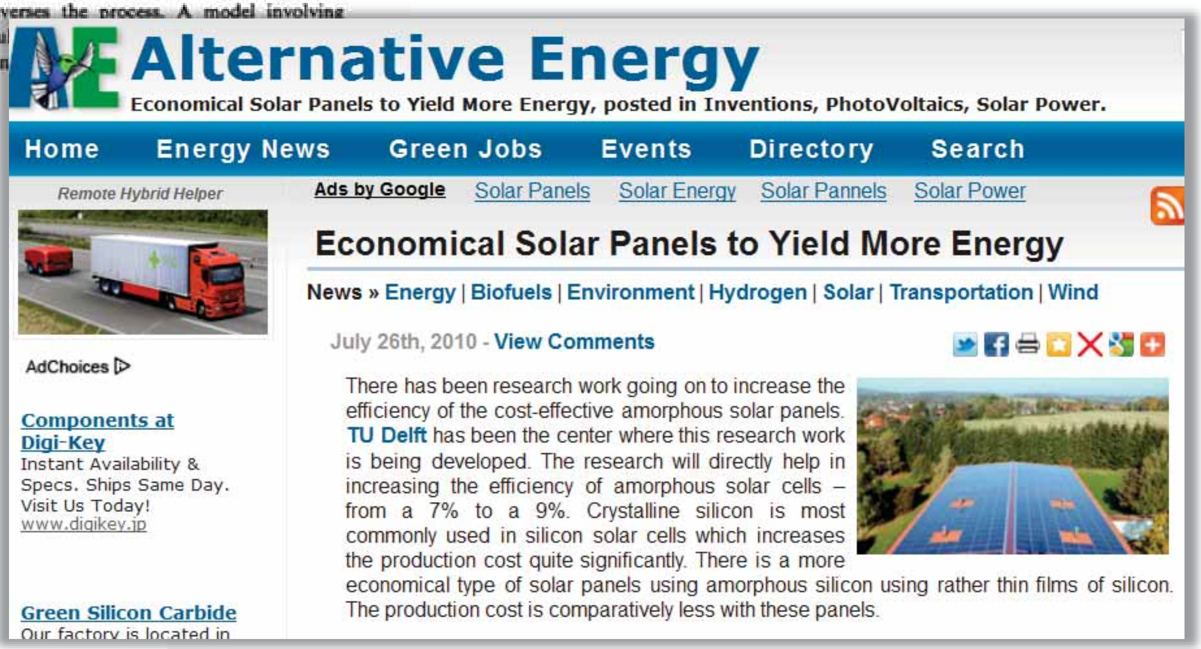


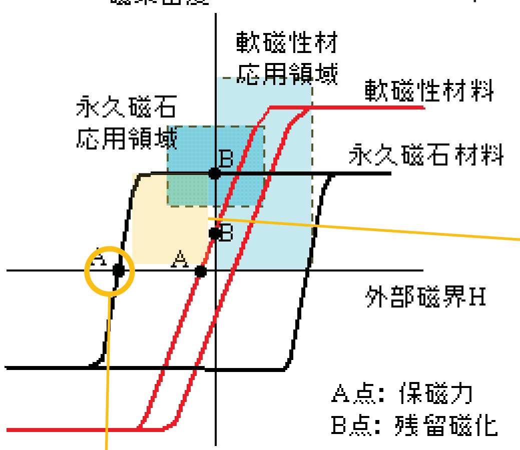
FIG. 1. Conductivity as a function of time before, during, and after exposure to ~ 200 mW/cm^2 of light in the wavelength range 6000—9000 Å.

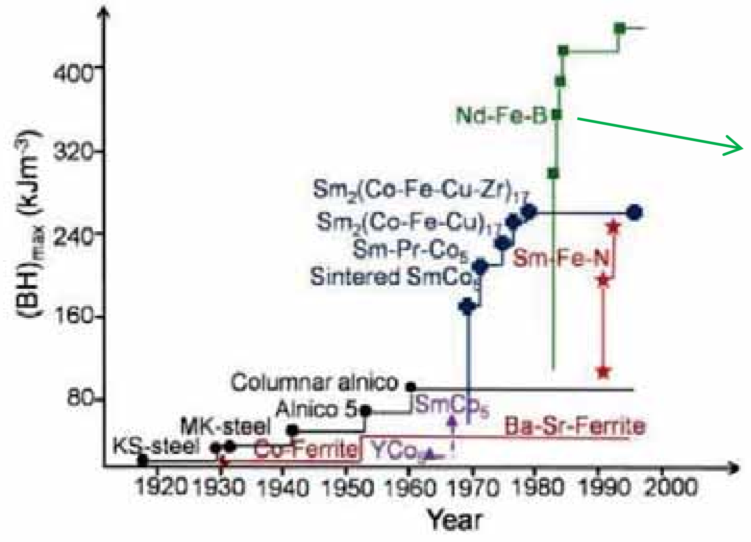


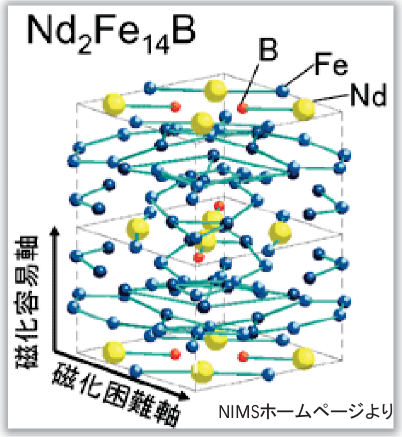
http://www.alternative-energy-news.info/economical-solar-panels-more-energy/

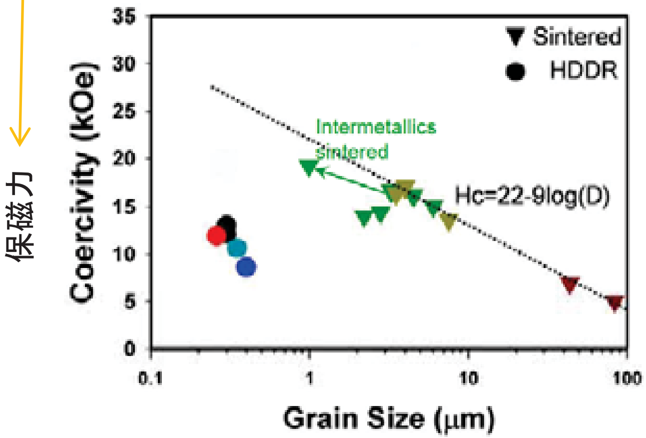
磁石

Wikipediaより

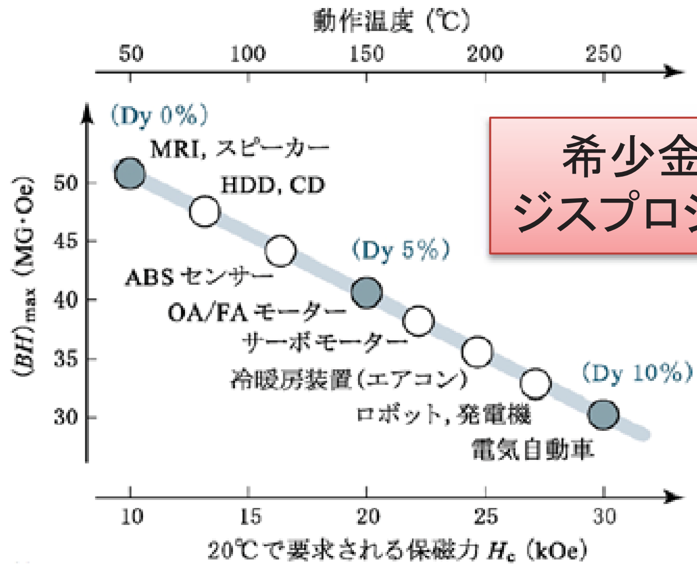








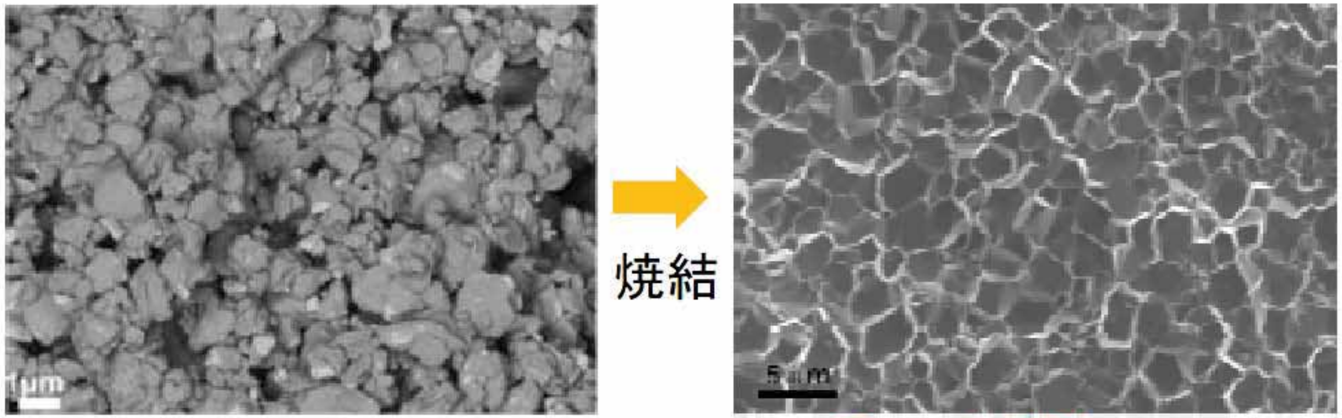
H. Sepheri-Amin et al. Scripta Mater. 65, 396 (2011).



希少金属元素
ジスプロシウム(Dy)

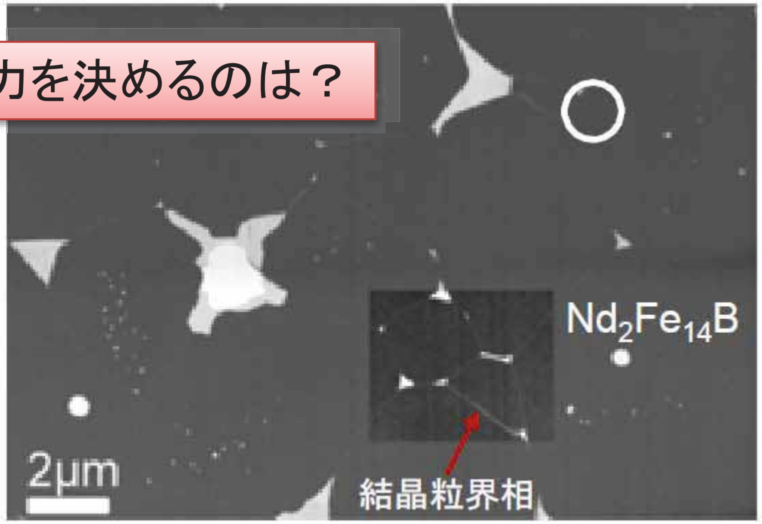
土浦宏紀ほか，固体物理47,677(2009)

磁石



D_{GB}~$1.5D_{powder}$

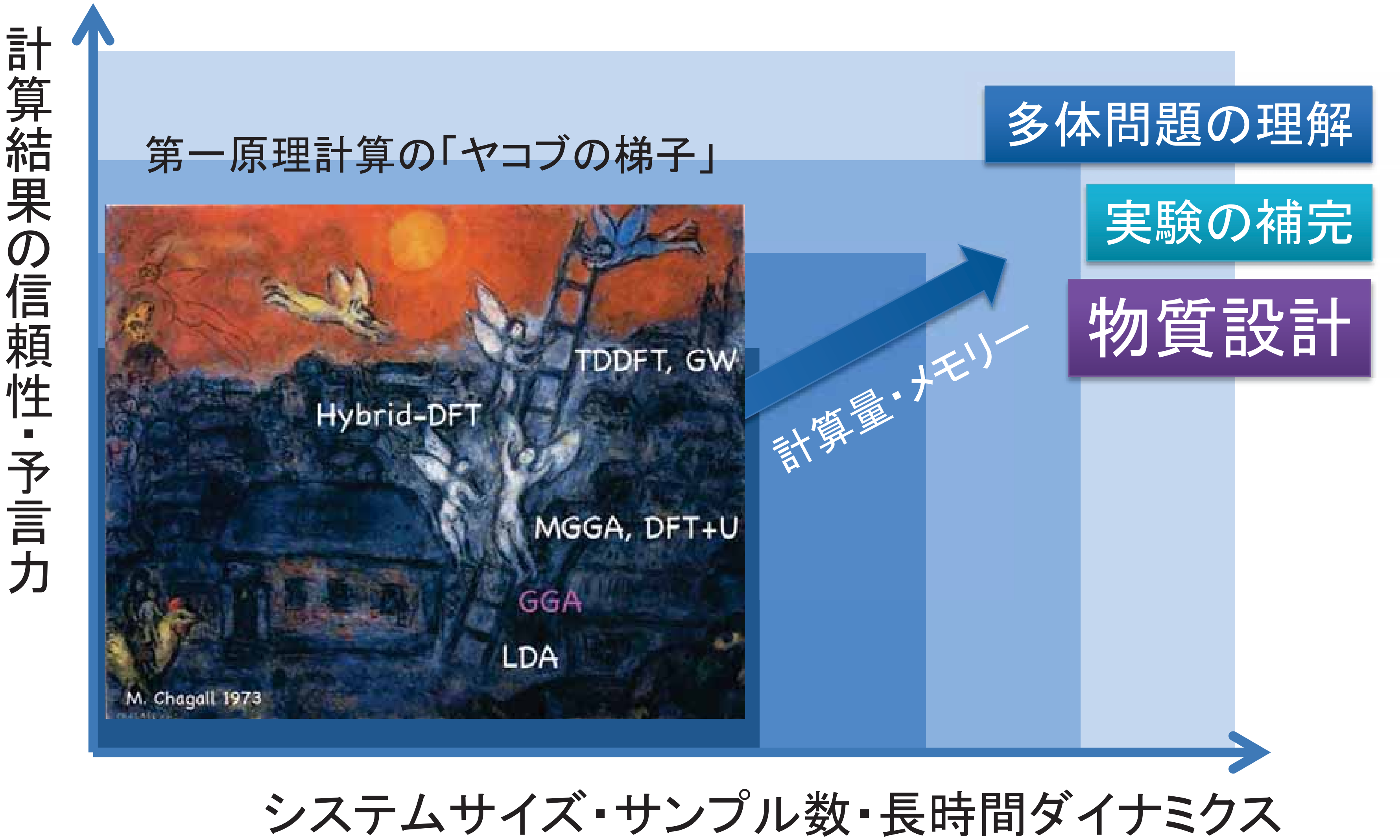
保磁力を決めるのは？



宝野和博(NIMS) CMSI講演資料
http://www.nims.go.jp/apfim/project_j.html

http://www.hitachi-metals.co.jp/prod/prod03/p03_01.html

スパコンの必要性


計算結果の信頼性・予言力
第一原理計算の「ヤコブの梯子」
TDDFT, GW
Hybrid-DFT
MGGA, DFT+U
GGA
LDA
M. Chagall 1973
計算量・メモリー
多体問題の理解
実験の補完
物質設計
システムサイズ・サンプル数・長時間ダイナミクス