

『計算科学を利用したマテリアル・プロセスデザイン』

共催：大阪大学グローバル COE プログラム
「高機能化原子制御製造プロセス教育研究拠点」

【日 時】 平成24年1月23日（月）
13：00～16：30（懇親会17：00～）

【場 所】 大阪ガーデンパレス
大阪市淀川区西宮原1-3-35
JR線新大阪駅より徒歩 約10分
JR線新大阪駅よりシャトルバス運行 約3分
(TEL：06-6396-6211 URL：http://www.hotelgp-osaka.com)

【趣 旨】 近年の化石エネルギー枯渇への危惧や資源ナショナリズムの台頭により、高機能マテリアルや高機能デバイスの開発がますます重要になっています。省資源・省エネルギー・省コスト化のために、ナノテクノロジーは不可欠な技術であることは言うまでもありません。量子力学の第一原理に基づいた計算科学シミュレーションは、原子スケールやナノスケールサイズでの物質の微視的世界の基本法則に基づき、量子シミュレーションの逆問題である量子デザインを実行し、新機能性マテリアルや新規プロセスをデザインするアプローチとして脚光を浴びています。第63回を迎える本研究会では、密度汎関数理論に基づく第一原理シミュレーションを駆使し、このようなマテリアル・プロセスデザインとその学術的基礎の確立を牽引しておられる4名の講師の先生をお招きいたしました。その研究成果は、多岐にわたる特許や多くの論文引用回数など、世界的な注目を集めています。本研究会が、量子シミュレーションを利用した新たな新機能性マテリアルや新規プロセス開発が実現するきっかけとなることを期待しております。奮ってご参加ください。

【プログラム】

- 13:10-13:55
「電圧印加固液界面における電気化学反応
—シミュレーションによる現象の理解から物質設計を目指して—」
産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 大谷 実 氏
- 13:55-14:40
「SiC表面におけるグラフェン形成の理論検討」
N T T 物性科学基礎研究所 影島 博之 氏
- 14:40-15:00 休憩（コーヒーブレイク）
- 15:00-15:45
「半導体スピントロニクス材料開発のための同時ドーピング法の提案」
大阪大学 大学院基礎工学研究科 佐藤 和則 氏
- 15:45-16:30
「オーダーN法を用いた大規模第一原理計算」
物質・材料研究機構 理論計算科学ユニット 宮崎 剛 氏
- 17:00- 懇親会

大谷 実 氏

電圧印加固液界面における電気化学反応

—シミュレーションによる現象の理解から物質設計を目指して—

電気化学反応を利用したエネルギー変換デバイス（燃料電池、リチウムイオン電池、太陽光を用いた発電・光触媒）は基本的には電極（固体）と電解質（液体）からなる固液界面を有する。デバイス全体の性能を決める要因は様々なものがあるが、この固液界面で起こる現象は それらの中でも特に重要である。例えば、界面における触媒反応が全体の反応効率を左右し、電極の寿命にも大きな影響を与える。この固液界面で起きている現象を微視的なレベルから理解し、高効率な電極触媒や耐久性に優れた電極材料の設計に生かそうという試みが、実験・理論双方で精力的に行われている。本講演では、第一原理分子動力学法を用いて明らかになった、固液界面における電気化学反応の詳細を紹介する。また、シミュレーションと実験双方の情報交換による、より精密に固液界面を理解するための取り組みを紹介する。

影島 博之 氏

SiC 表面におけるグラフェン形成の理論検討

究極的な二次元物質であると共に、高い移動度と長いコヒーレンス長を持つなど、様々な特異な物性を示すグラフェンを形成する手法として、SiC を熱分解する方法が注目を浴びている。SiC を高温で熱すると表面から選択的にSiが脱離するため、表面に余剰となったCが凝集してグラフェンが形成されるのである。基板のSiCは絶縁性が高いため、そのままグラフェンを電子部品に加工することも可能である。表面のステップも乗り越えてつながったSiC試料全面を覆うグラフェンが実験的に形成されているが、膜厚均一性や結晶品質の改善が課題となっており、制御指針が求められている。しかし、原子の吸着と凝集のみを考えればよいエピタキシーのような成長法と異なり、Siの脱離とCの凝集が表面で同時に起きるため、その形成機構は一層複雑である。本講演では、第一原理計算を用いた機構解明の取り組みについてご紹介する。

佐藤 和則 氏

半導体スピントロニクス材料開発のための同時ドーピング法の提案

磁性半導体(Ga, Mn)Asや(In, Mn)Asの合成とキャリア誘起強磁性の発見に伴い、1990年頃から磁性半導体をベースにした半導体スピントロニクスの研究が活発に行われるようになった。既存のエレクトロニクスが半導体ベースであり、その技術を有効利用できることから磁性半導体材料の探索が続けられているが、磁性不純物濃度が20%程度以下であると室温以上のキュリー温度は実現できないことが第一原理計算により示されており[1]、材料探索の方向性を再検討する必要があるが出てきている。本講演では、現在までの半導体スピントロニクス材料研究を概観した後、室温以上で強磁性特性をあらゆる材料開発の指針として、同時ドーピング法による磁性元素の高濃度添加法とそれを用いた新物質の計算機マテリアルデザインについて解説する。

[1] K. Sato et al. Rev. Mod. Phys. 82 (2010) 1633.

宮崎 剛 氏

オーダーN法を用いた大規模第一原理計算

密度汎関数法にもとづく第一原理計算は、物質、材料の微視的構造、物性を高精度で計算することができる強力な手法である。しかし、通常用いられている計算手法では計算する系の含む原子数Nが数百を越えると、計算量がNの3乗に比例して急激に増加するという問題があり、数千原子以上を含む大規模系に対して第一原理計算を実現する事は長い間不可能であった。この問題を解決する為に「オーダーN法」という計算時間とメモリ量がNに比例する計算手法の開発が欧米や日本の複数のグループで行われてきた。オーダーN法の最近の発展は著しく、実際の応用研究にも使われ始めてきている。本講演では、オーダーN法、特に我々が開発してきたオーダーN法第一原理計算プログラムCONQUESTを中心に紹介し、数万原子、数十万原子を含む系に対する第一原理計算が可能となってきたことを示す。また、半導体表面3次元ナノ構造、巨大生体分子の系に対する研究結果を紹介する。