

ナノマテリアル・ナノデバイスデザイン

第一原理計算を用いた物質設計

～量子シミュレーションから量子デザインへ～

従来の新物質開発は試行錯誤の実験を繰り返す方法が主流で、これは開発までの過程で様々な形で環境に負荷を与えるため、新しい物質開発の方法が望まれています。第一原理計算とは、基本的に実験データなどの経験的なパラメーターを必要とせず、量子力学に基づいた基礎方程式を解くことによって、物質の様々な性質の基礎となる電子状態を明らかにする方法です。これまで多くの研究者の膨大な成果からその信頼性は広く知られていますが、今後は物質の性質を予測することからある性質を持った物質を予測（デザイン）する方向に発展しつつあります。

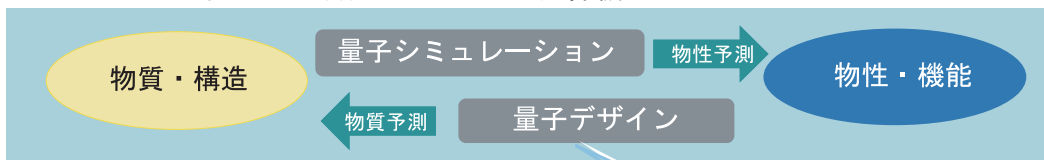
概念



従来型材料開発



計算機マテリアルデザイン



装置

2台のPCクラスターで第一原理計算手法の教育及び研究支援を行います。幾つかの計算ソフトウェアはCMDワークショップ（次ページ）で習得できます。

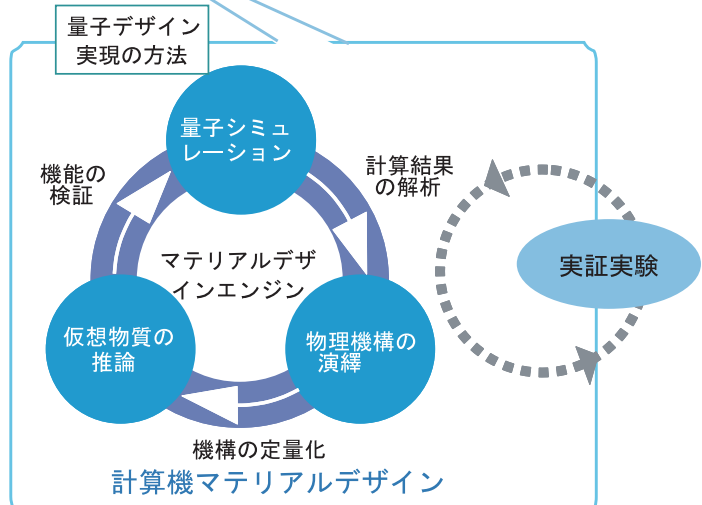


cmd

32 node cluster (2GB for each node)
 CPU: Intel (R) Pentium 4 CPU 3.40 GHz
 HDD: 367GB
 Queueing system: Sun Grid Engine 6.0u11
 compiler : ifort
 Intel (R) Fortran Compiler
 for 32-bit applications
 parallel system: mpich-1.2.7p1

cmd2

35 node cluster (4GB for each node)
 CPU: Intel (R) Core(TM)2 Quad CPU 2.66 GHz
 HDD: 1.8TB
 Queueing system: Sun Grid Engine 6.0u11
 compiler: ifort
 Intel (R) Fortran Compiler
 for Intel (R) EM64T-based applications
 parallel system: mpich-1.2.7p1



応用例

高い強磁性転移温度を持った磁性半導体、表面・界面構造での反応プロセスデザイン、混晶系及び超格子系の新物質デザイン、高効率熱伝材料のデザイン、燃料電池及び水素貯蔵材料のデザイン、etc...