

コンピュータシミュレーションによる ナノ物質・ナノデバイス設計

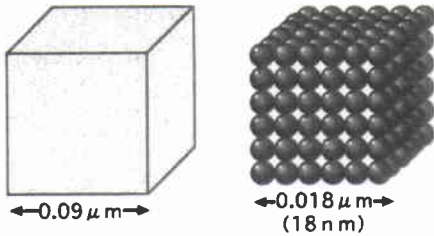
岡山理科大学・工学部・電気電子システム学科

ナノテクノロジー研究室 教授・垣谷公徳

E-mail: kimi@ee.ous.ac.jp, Web: http://sstweb.ee.ous.ac.jp/

日本学術振興会 日中韓フォーサイト事業 「サブ10nmワイヤ；その新しい物理と化学」

ナノデバイスと原子配列



Atomic Arrangement, Design & Control

Real surface



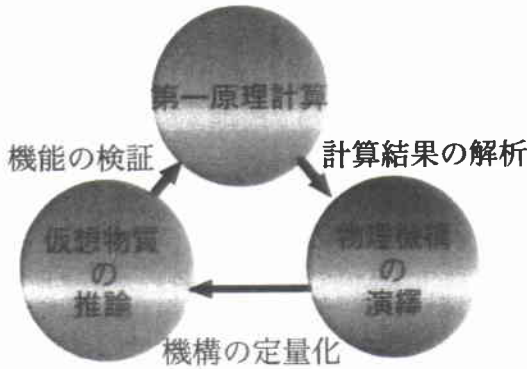
Computer simulation



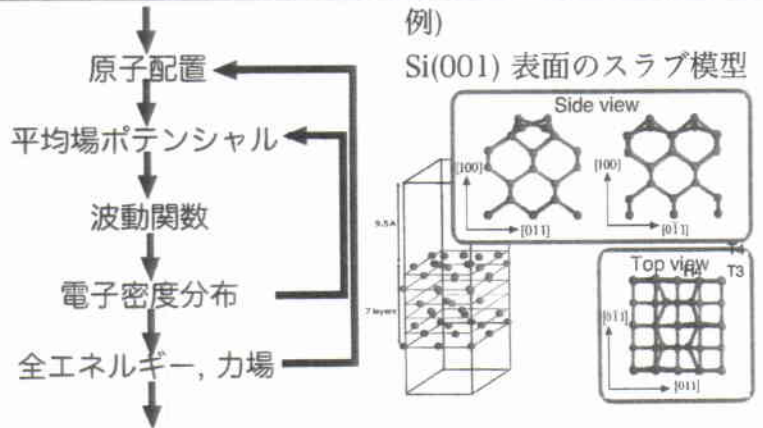
原子配列
← 原子配列設計
原子配列制御

CMD[®] (Computational Materials Design)

第一原理分子動力学



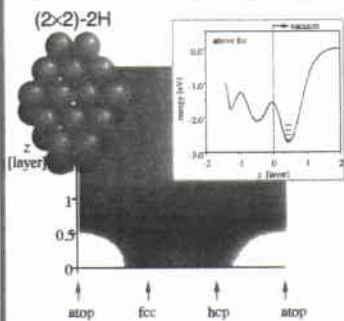
Ref) Akai et al., CMD[®]コンソーシアム



Ni(111)-H

Si(111)-Ag

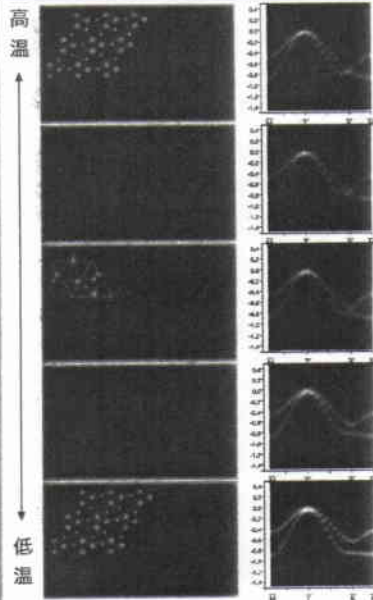
Si(111)-In



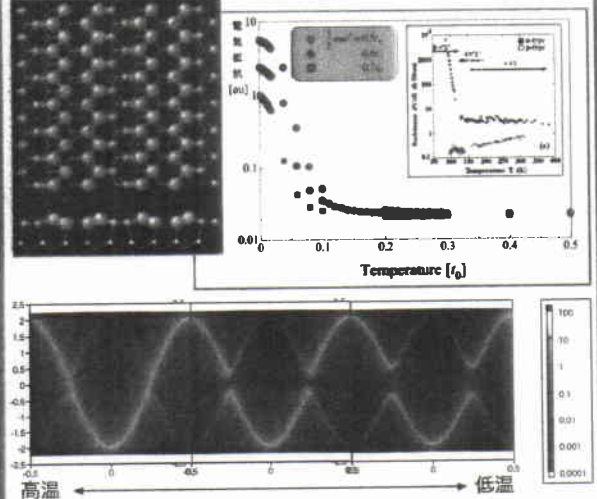
応用) 燃料電池用水素吸蔵材料の探索
排ガス清浄化触媒

計算方法

- 第一原理計算
- 擬ポテンシャル法
- 分子軌道法
- 現象論的模型計算
- 経験的分子動力学法
- モンテカルロ法



応用) 理想的2次元自由電子シート



応用) 擬似的1次元自由電子ワイヤ
原子スケール金属ナノ細線 (線幅: 約1nm)
基礎) パイエルス転移・電子密度波転移