

電子状態論に基づく物性予測

シミュレーション予測による電子材料研究の効率化

分子、高分子、クラスター、溶液
金属、半導体、超伝導体、磁性体
メソスコピック系
量子デバイス
生体物質
ソフトマテリアル

反応ポテンシャル面の決定

光と物質の相互作用・非線形光学

安定性(存在の可否)、結晶構造・格子定数

電子状態、電子伝導度、イオン価数、フェルミオロジー

結晶成長、化学反応ダイナミクス、相転移、表面触媒、水素吸蔵

電子分光スペクトル・核磁気共鳴・磁化率・誘電率(マクロの物性)etc

物質に特定の機能と構造を付与することを試みる場合量子力学に基づく議論は不可欠

Advanced Algorithm & Systems

手法

第一原理(ab-initio)計算

密度汎関数(DFT)または分子軌道(MO)法の計算
物質の構成元素と構造を与えて、電子論的性質を再現させる、
ということが目標

精度は高い。計算時間を著しく要する。

現状では反応・プロセスの追跡は困難か？

半経験的計算

計算は高速。第一原理計算の1/10以下の時間。

パラメータをうまく決定できれば、精度の向上が可能

パラメータの例としては、AM1、MNDO、PM3、ZINDOなど

ただし、周期表のあらゆる元素を計算できるわけではない。

s、p軌道のみを持つ原子はほぼ全部扱える。

d軌道を持つ原子に対するパラメータは開発の途上である。

f軌道に対するパラメータ作成は絶望的であるとされる。

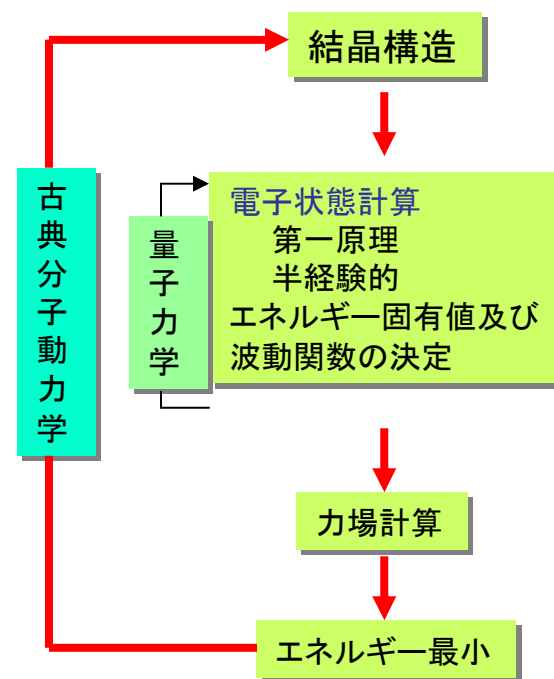
古典MD

上二者にくらべると極めて簡単なものである。

現在の計算機的能力で、ナノメソ領域まで適用可。

事例ごとにパラメーター(ポテンシャル)を設定する必要がある。

構造(力学的特性)は見積もれるが電子論的性質は議論できない。



当然のことながらシミュレーションは全能ではない。

計算機資源の制約・理論の未完成による制限がある。

「Theory of everything」は存在しない。手法ごとの長所と短所を認識した上で、対象とする系に最も適した方法を選べるような選択肢を用意すべきである。

実は

ありとあらゆる物質の性質を計算機の中で再現することは不可能。
物質科学において実験はシミュレーション・理論に常に先行している。



シミュレーションの位置づけ

何よりもまず実験事実を出発点に置く。

蓄積された個々の実験事実を

計算機実験(シミュレーション)によって架橋し、

隠れた法則・未知の物性を検討する。

実験・シミュレーションの相補的役割

適用限界の把握

(計算時間・理論)

定性的モデル／定量的議論

計算事例の調査・蓄積

分子軌道法・密度汎関数法による1電子基底状態

擬ポテンシャル
交換・相関項
高速フーリエ変換
結晶空間群
特殊相対性理論
配置間相互作用

波動関数
固有値
全エネルギー・力場
電子密度
励起状態

摂動論
多体問題
場の理論

高速プロセッサ
高速ネットワーク

並列計算

人間の知識

物質のシミュレーション

凝縮系の物理

物質の示す性質
電子の多体効果
「弱い」集団励起

≠

一電子基底状態

↑
分子・クラスター・結晶の
電子状態計算

電子・ホール相関
光量子物理・
輸送現象・
電気伝導etc

基底状態の考察+対象に応じた適切なモデル

ナノ物質の特異な構造(微粒子・メゾスコピック系等)

⇒ 一様結晶と異なった物性(電子状態・波動関数)

バンド描像は必ずしも有効ではない。

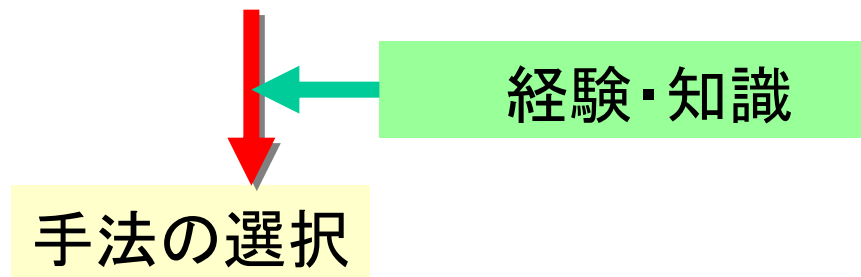
量子論に基づくモデル化が必要

計算機実験による物性予測

適用限界の把握(計算時間・理論)

定性的モデル／定量的議論の使い分け

先行する計算事例の調査・蓄積



非専門家には最適な計算手法を選択することが困難。

顧客と一緒にソリューションを探求
することにより最適手法をご提示