

第一原理擬ポテンシャル平面波法ソフト PHASEによる物質・材料シミュレーション

東邦大学理学部 山本武範

PHASE システム

擬ポテンシャル作成ソフト

CIAO

- TM型ノルム保存PP
- ウルトラソフトPP

入力作成・可視化

PHASE Viewer

擬ポテンシャルデータベース

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	A	Rf	Dh	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
		Lanthanides															
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
		Actinides															
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

使用頻度の高い多くの
元素について検証済み

PHASE

第一原理

擬ポテンシャル
平面波法ソフト

CAMUS

ハイブリッド計算ソフト

QM/TB/MM

UVSOR

誘電応答解析ソフト

誘電関数
非線形感受率
有効質量
圧電定数

PHASEシステムの機能

- 電子状態解析
 - バンド構造
 - (局所)状態密度
 - (部分)電子密度
- STM像解析
- 振動解析
- 誘電物性解析
- 圧電物性解析
- 構造最適化
- 第一原理分子動力学
 - エネルギー一定
 - 温度一定 (Nosé-Hoover法)
 - 拘束条件付きMD
 - ハイブリッド法 (QM/TB/MM)
- 可視化
 - 原子構造
 - 電子密度

第一原理擬ポテンシャル平面波法

- 密度汎関数理論
- 第一原理擬ポテンシャル
 - TM型ノルム保存擬ポテンシャル
 - Vanderbilt型ウルトラソフト擬ポテンシャル
- 平面波基底
- 電子状態解法
 - Modified steepest decent (MSD)法
 - 直線探索付きMSD法
 - 残差最小化法

解析事例

シリコンデバイス

シリコン中ヒ素ドナー
シリコン中単原子空孔
高誘電率ゲート絶縁材料
シリコン/SrTiO₃界面

ナノバイオデバイス

DNAの電子状態と物性
シスプラチンとDNA塩基の反応
固体表面上のDNA自己組織化

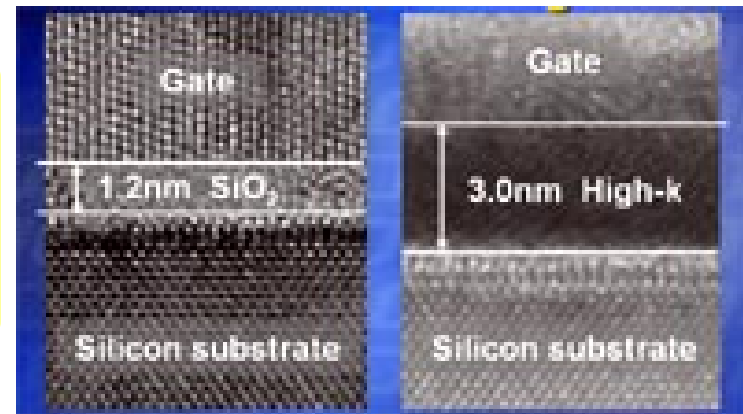
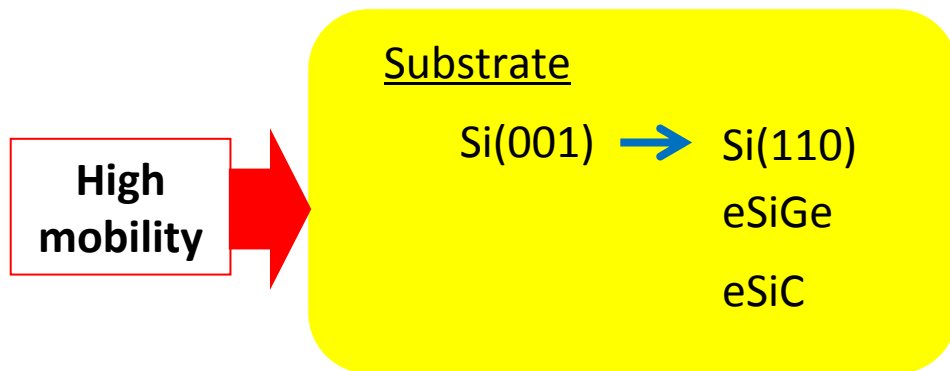
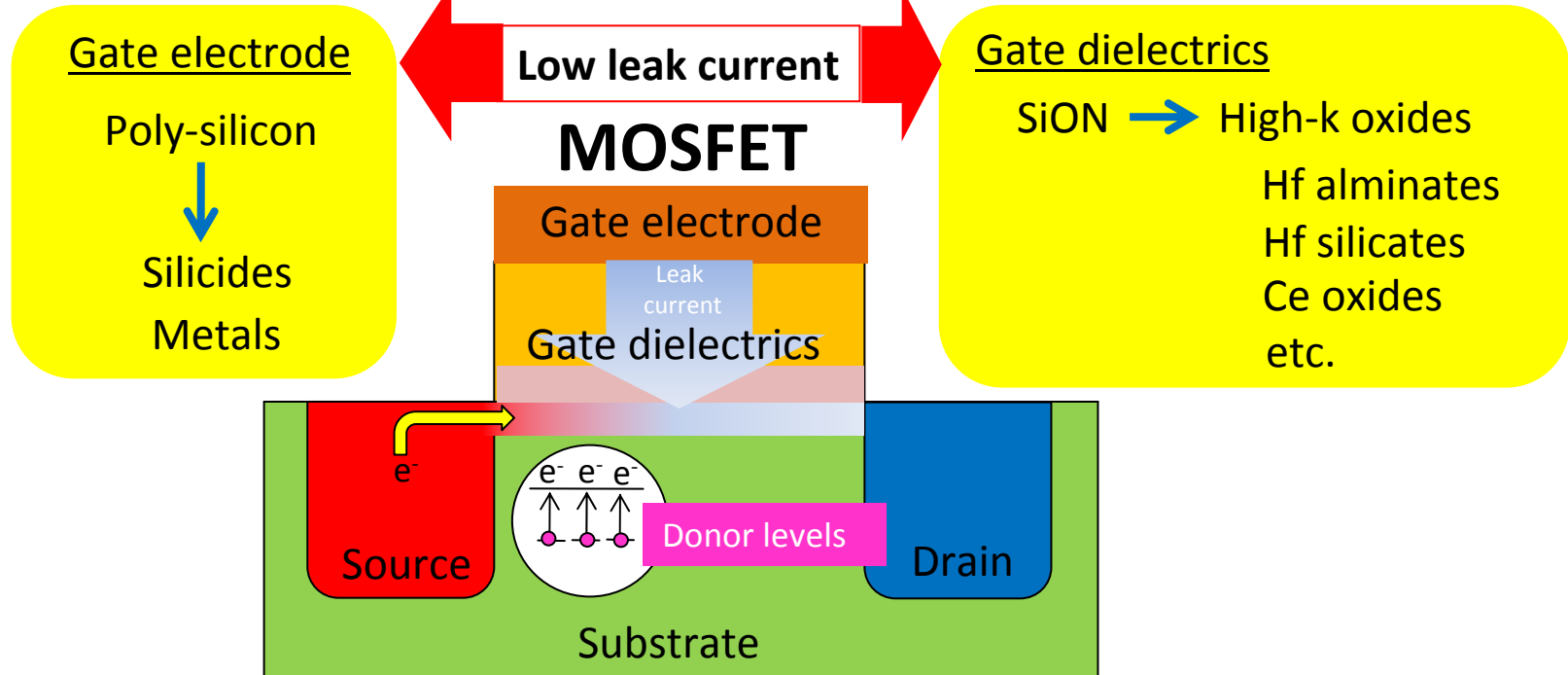
水和現象

シスプラチンの水和反応

水素吸蔵

ニオブ中水素のダイナミクス

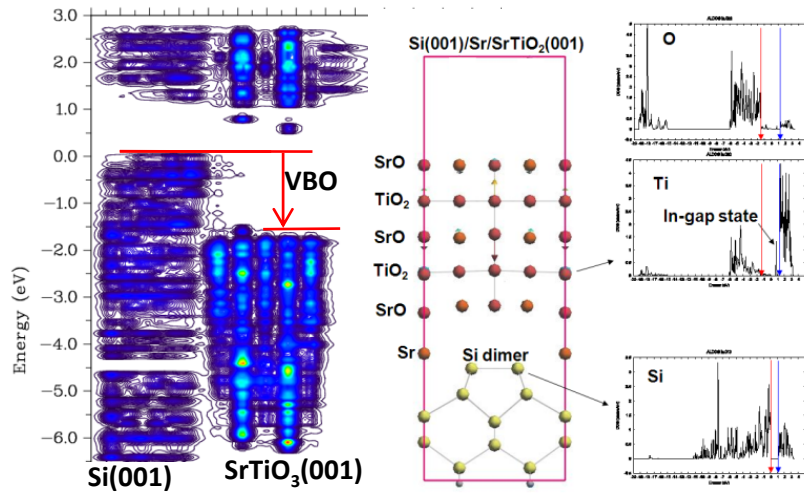
シリコンデバイス



シリコンデバイス：ゲート酸化物

Band offsets at Si(001)/SrTiO₃ interfaces

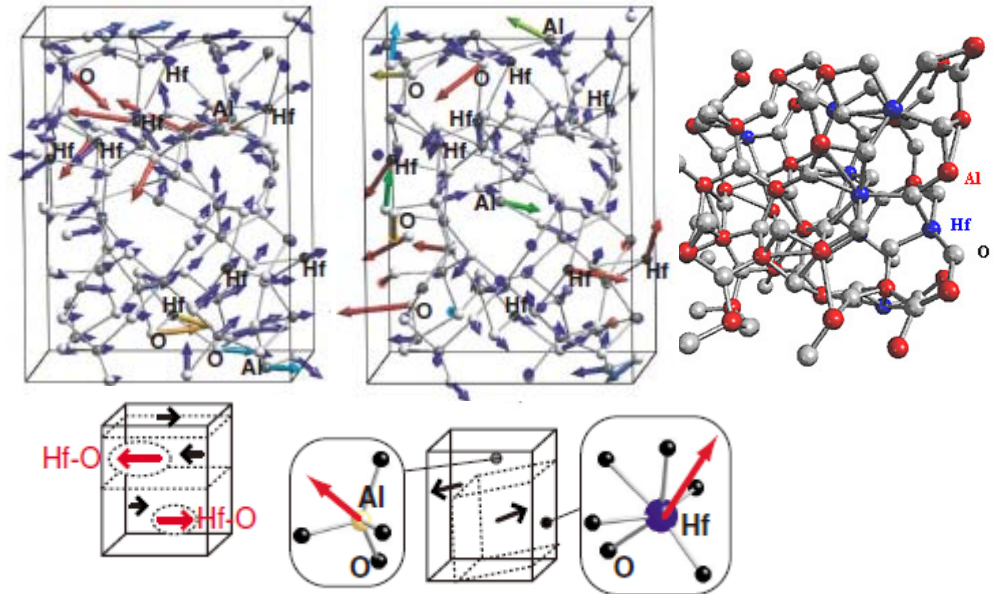
Vibrational and dielectric properties of Hf aluminates



70 cm⁻¹

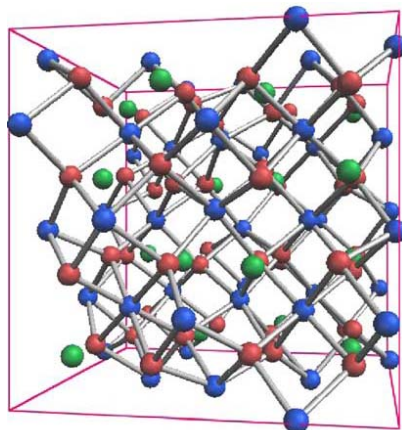
83 cm⁻¹

Phys. Rev. B 2007, 75, 195105.

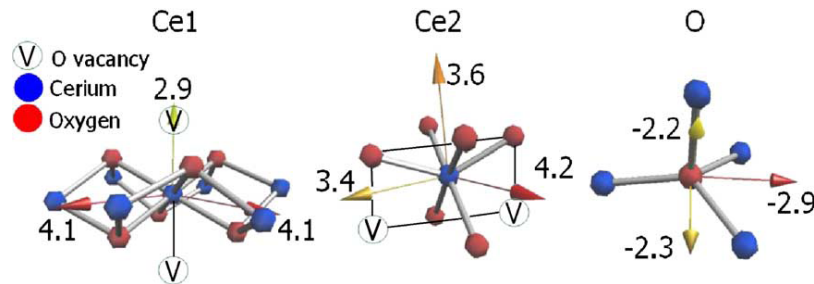


Dielectric properties of Ce oxides

Thin Solid Films 2005, 486, 136-140.



Cubic Ce₂O₃

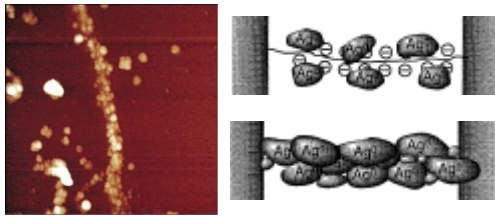


The Born effective charges of cubic Ce₂O₃

ナノバイオデバイス

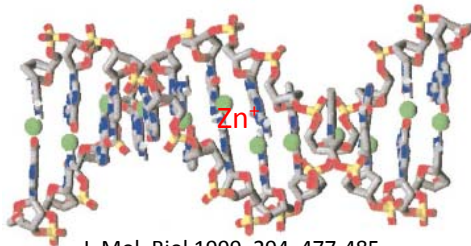
DNA-based nanowires

- Metallized DNA



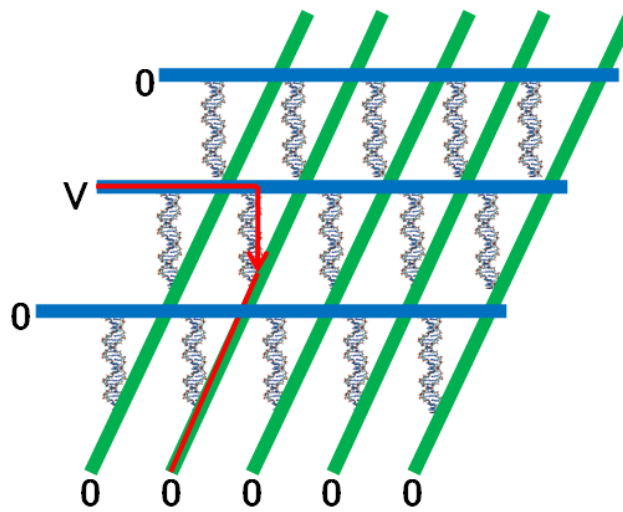
Nature 1998, 391, 775-778.

- M-DNA



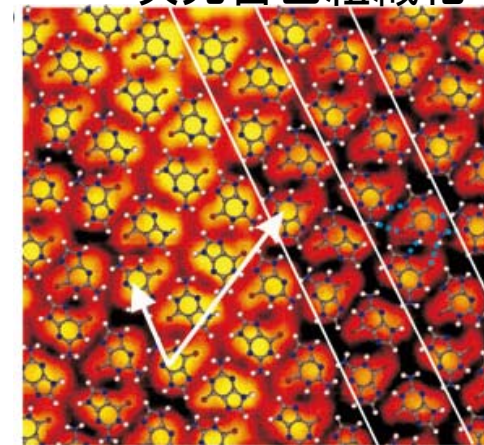
J. Mol. Biol 1999, 294, 477-485.

DNA-based Electronic memory



Nanostructure fabrication

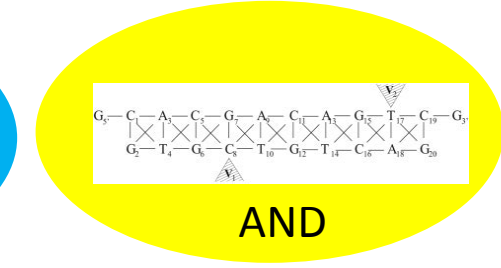
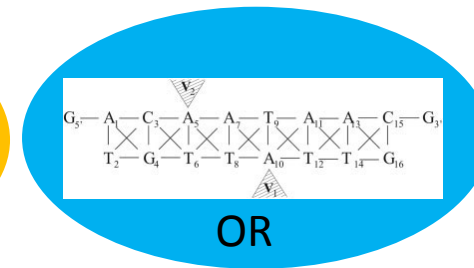
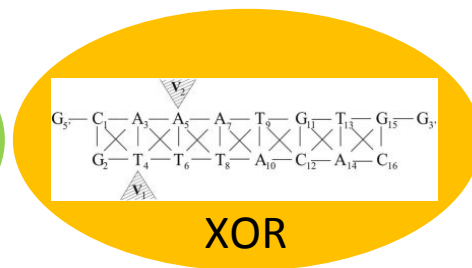
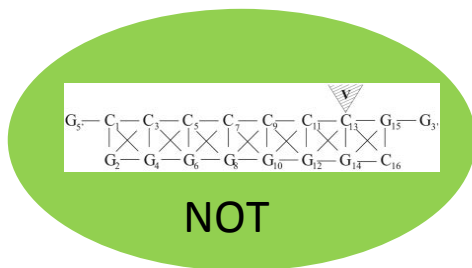
Au(110)表面上のグアニンの
二次元自己組織化



Angew. Chem. 2005, 117, 2310-2315.

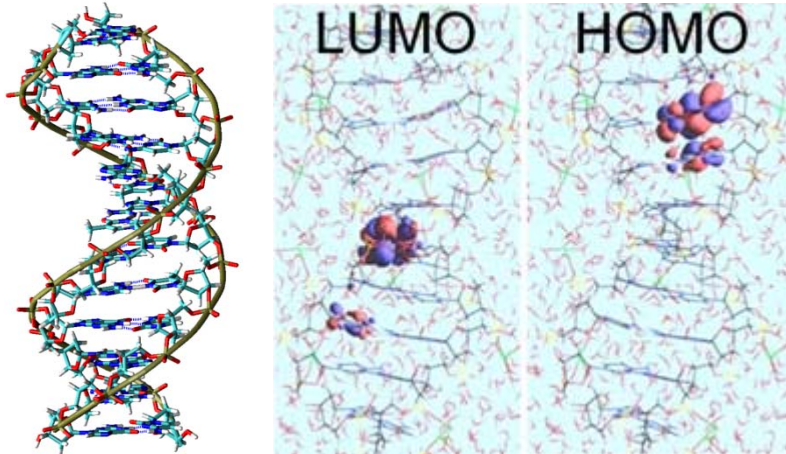
DNA-based electronic logical elements

Inter. J. Quant. Chem. 2008, 108, 1913-1920.

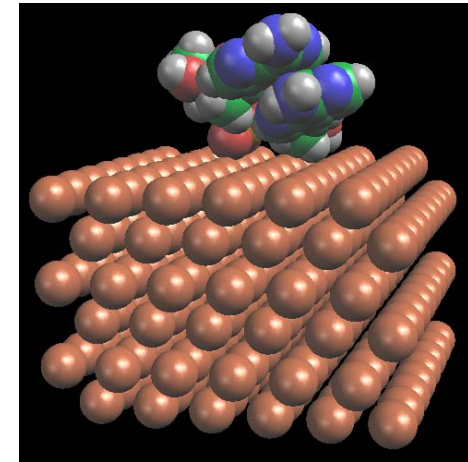


ナノバイオデバイス

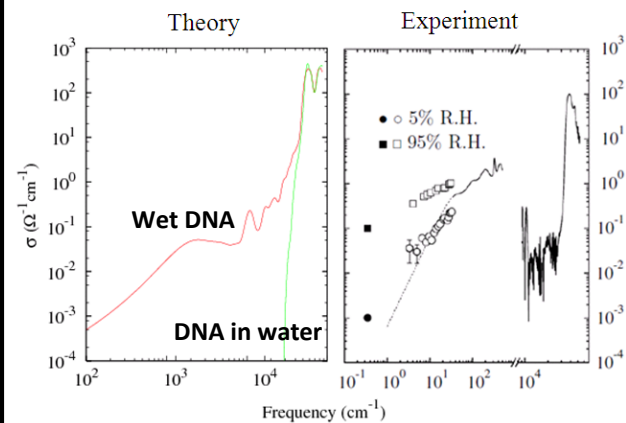
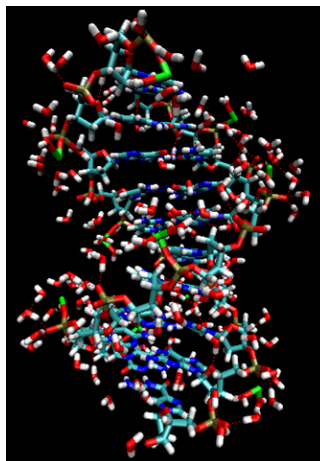
Electronic structure of B-DNA in water



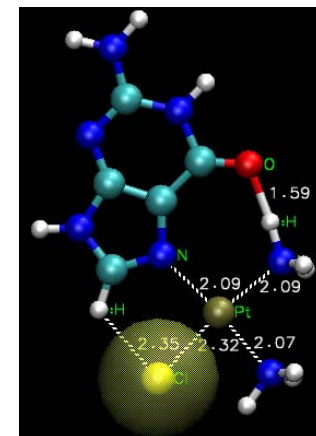
ssDNA on Cu(110) surface



Optical conductivities of wet DNAs



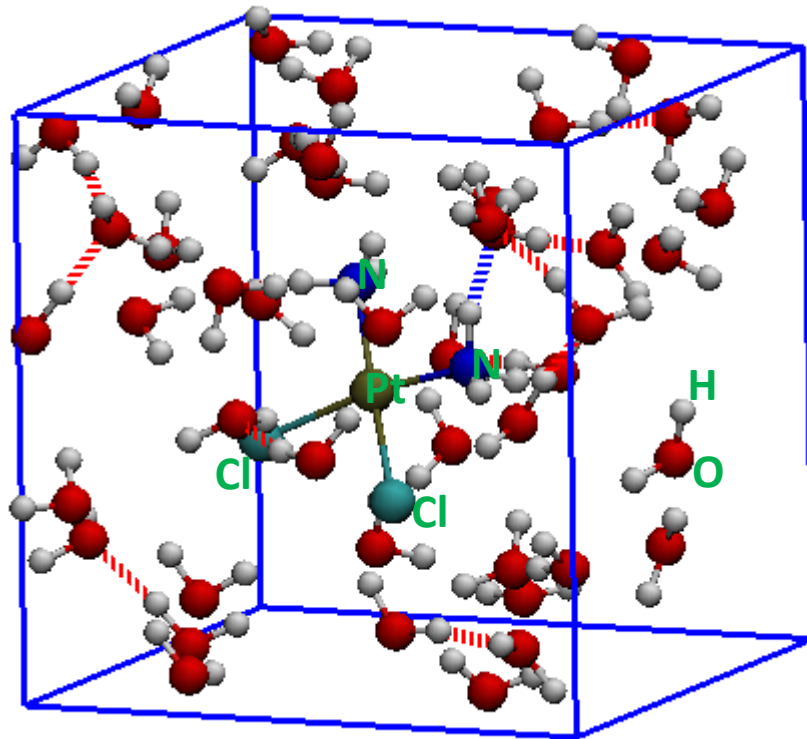
Guanine-cisplatin complex



第一原理分子动力学

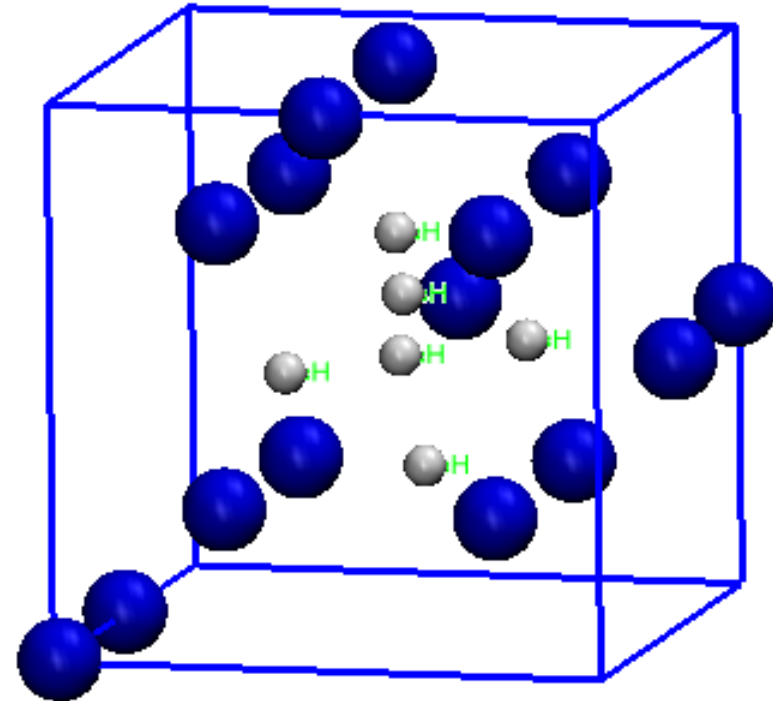
Hydration phenomena

Hydration reactions of a cisplatin complex



Hydrogen storages

Hydrogen dynamics in solid Niobium



まとめ

- 大規模第一原理シミュレーションが次世代および近未来ナノデバイス開発を促進する。
- 第一原理分子動力学シミュレーションによる化学反応解析が環境問題対策および新材料開発の指針を与える。

研究協力

物質・材料研究機構 計算科学センター

アドバンスソフト(株)

(株)富士通研究所

(株)日立製作所基礎研究所

東邦大学理学部 大型プロジェクト

大野隆央 センター長

粕田浩義 ポスドク

宇田毅 部長

山崎隆浩 主任研究員

濱田智之 主任研究員

大西栖平 特任教授

謝辞

本研究は、文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発プログラム「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発(RSS21)」プロジェクトの支援を受けています。