



国プロジェクトと産学連携のご紹介

アドバンスソフト技術セミナー

イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの作成
ナノデバイスシミュレーションシステムの作成
アドバンスソフト株式会社
取締役 第2部長

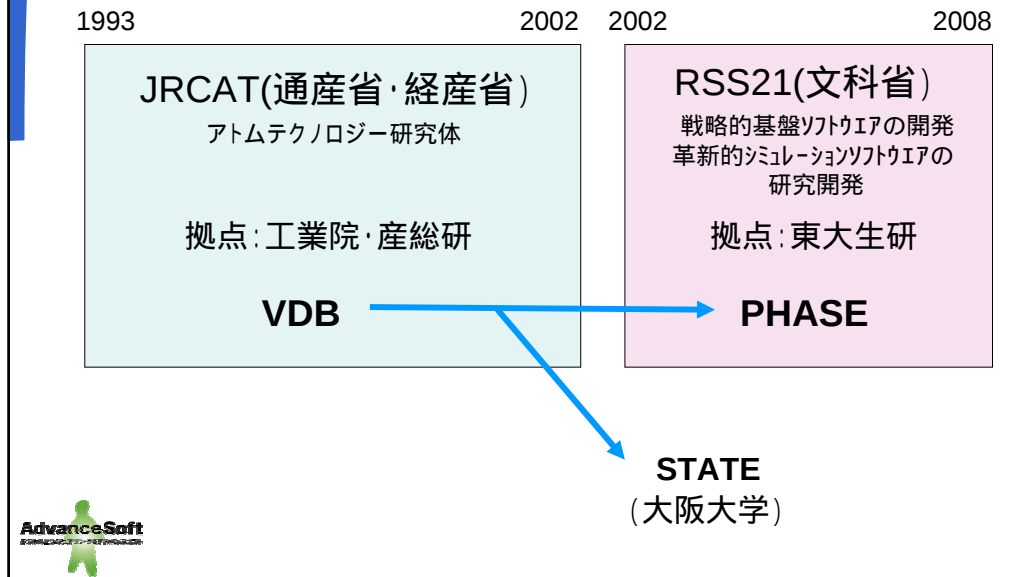
宇田 毅 2.

内 容

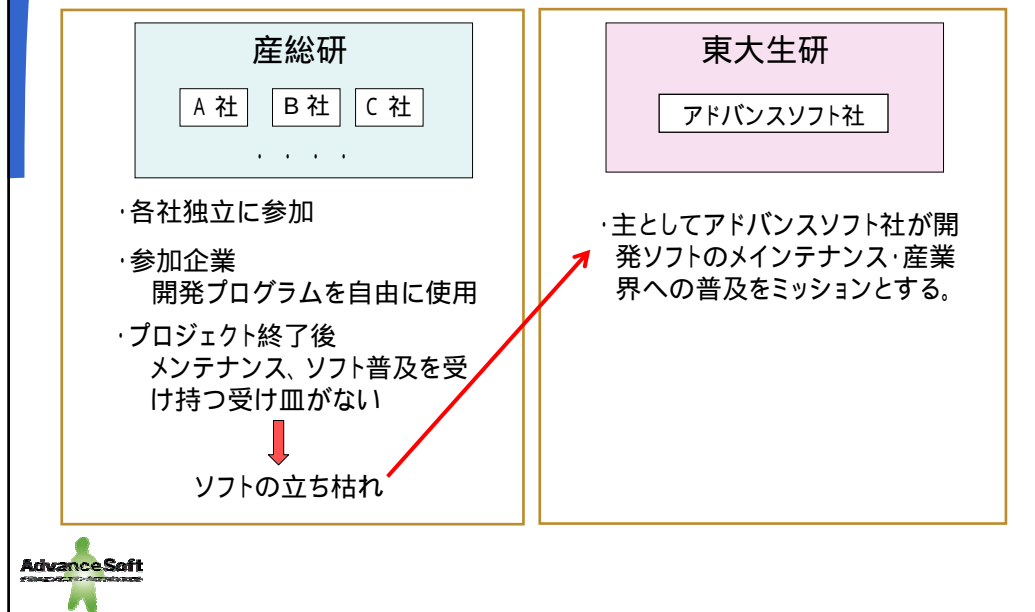
- ナノ材料シミュレータ「PHASE」の生い立ち
「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェア
の作成」プロジェクト以前の産学連携
- PHASE の機能と産業応用
どんな分野で利用されているか。
- 「イノベーション…」プロジェクトでの計画



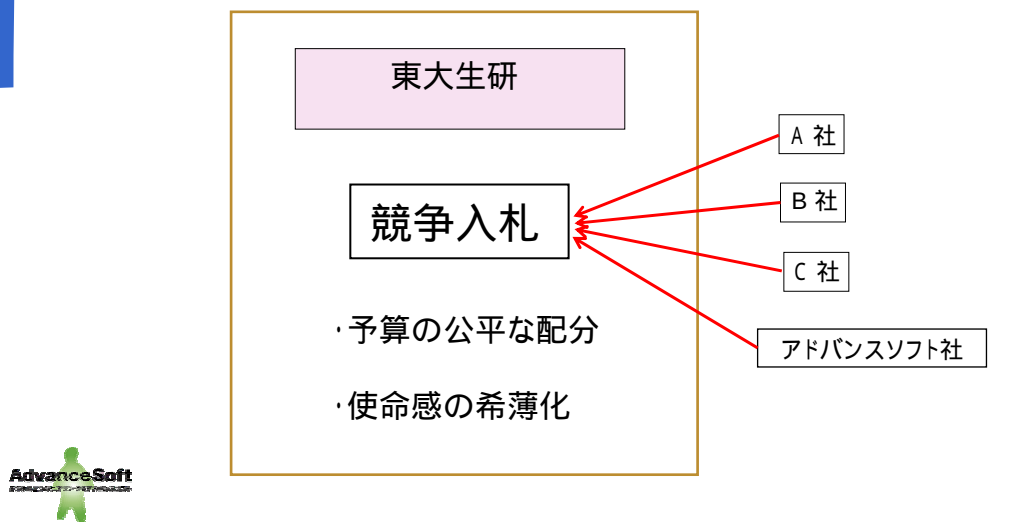
PHASEの生い立ち



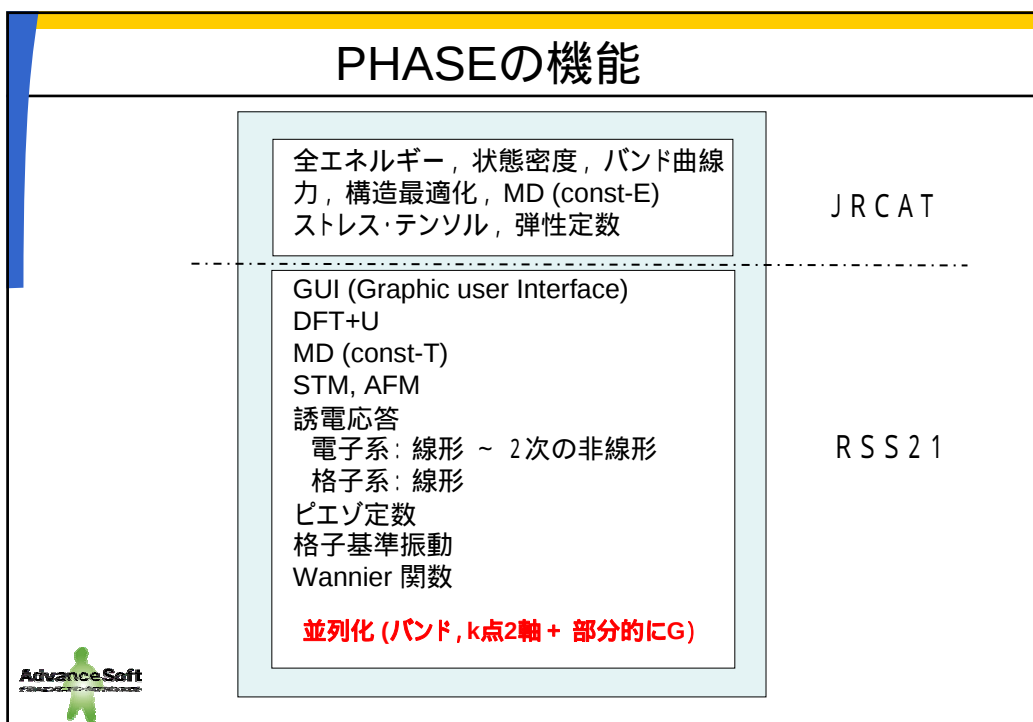
両プロジェクトにおける産学連携



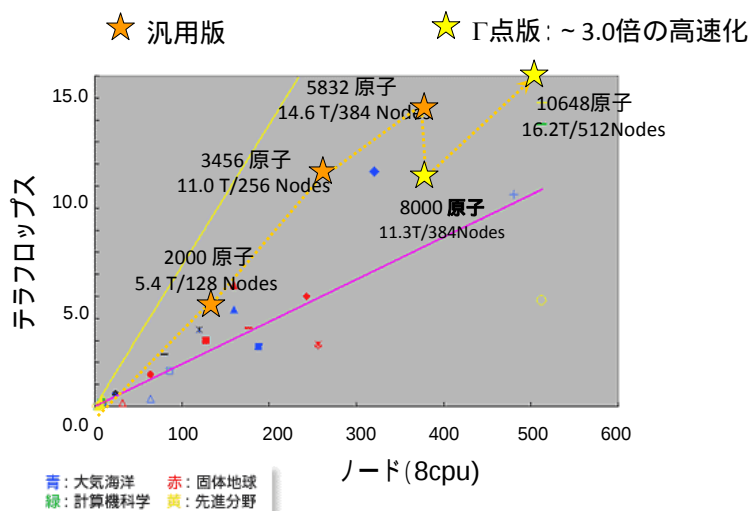
イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの作成 における産学連携



PHASEの機能

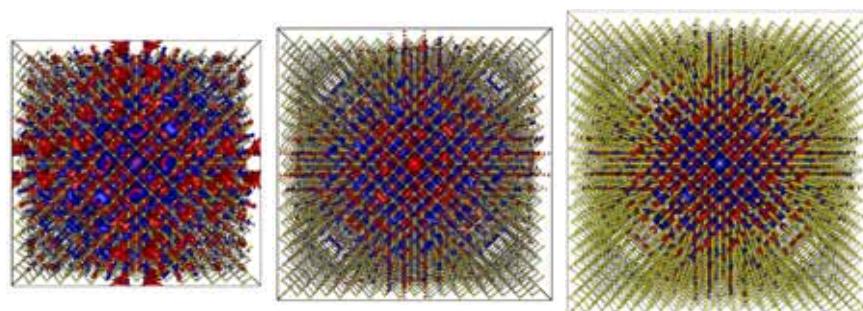


地球シミュレータ上でのPHASEの実行性能



Si 中のAsドナーの波動関数の等値面

青と赤は符号をあらわす



$\text{Si}_{4095}\text{As}$

4.4 nm

$\text{Si}_{5831}\text{As}$

4.9 nm

$\text{Si}_{7999}\text{As}$

5.5 nm



PHASE の商用化

- ・プロジェクト終了後のメンテナンスと普及
- ・安定性向上・高速化
- ・使い勝手の向上
- ・機能追加

Advance/PHASE



商用第一原理計算ソフトウェア比較

プログラム名	特 徴				
	原子・電子相互作用	電子・電子相互作用	基底関数	対象	軌道
CASTEP	擬ポテンシャル	DFT	平面波	固体	価電子
VASP	擬ポテンシャル	DFT	平面波	固体	価電子
PHASE	擬ポテンシャル	DFT	平面波	固体	価電子
SIESTA	クーロン	DFT	原子関数	固体	全電子
Gaussian	クーロン	HF	原子関数	クラスタ	全電子

DFT (Density Functional Theory)
HF (Hartree Fock)

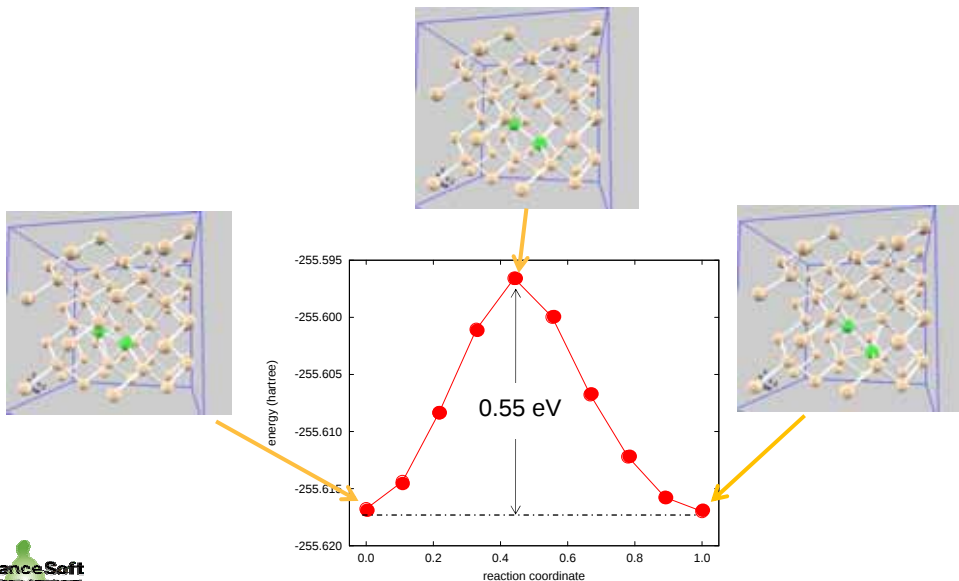


受託解析実績

・不純物拡散	半導体
・仕事関数	半導体, 研究機関
・h-k	半導体
・触媒	自動車, 研究機関
・2次電池	自動車, 化学
・水素貯蔵合金	研究機関
・STM	研究機関
・AFM	研究機関
・合金の相図	分析機器
・XPS	分析機器
・化学反応	研究機関, 化学

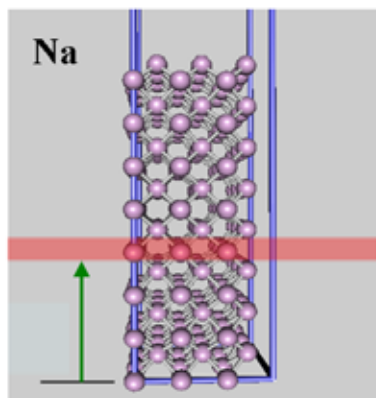


Si結晶中の自己拡散

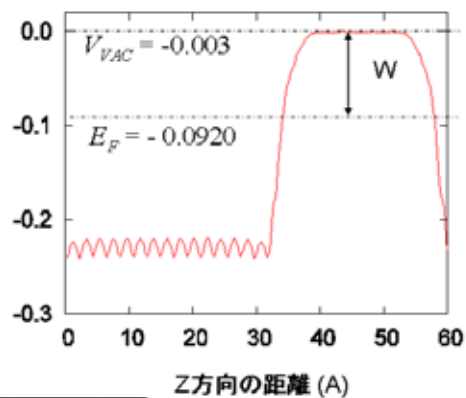


仕事関数(Na)

表面構造



表面に平行な面内でのポテンシャルの平均値

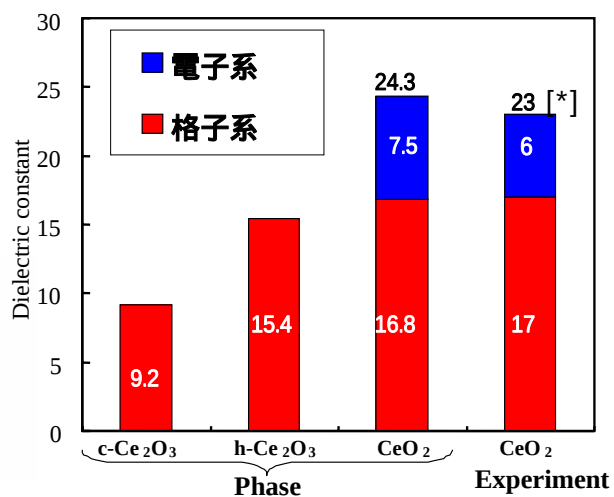
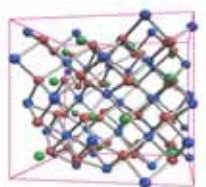
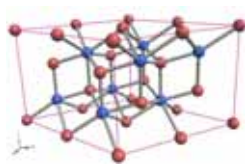


$E_F = -0.0922$ hartree,
WF = 2.50 eV(Phase), 2.82 eV (実測値*)

*S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices (Wiley)



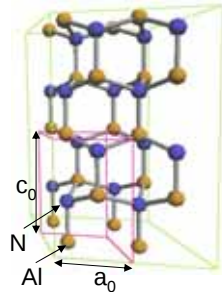
h-k 材料(酸化セリウム)の誘電率



[*] N. I. Santha et al., J. Am. Ceram. Soc., 87 (2004) 1233.



窒化アルミニウム(AlN)のピエゾ定数



Wurtzite構造の場合の e_{33} 成分の計算式

$$e_{33} = e_{33}^{(0)} + \frac{2c_0}{V_0} Z_{\parallel}^* \frac{du}{d\varepsilon_3}$$

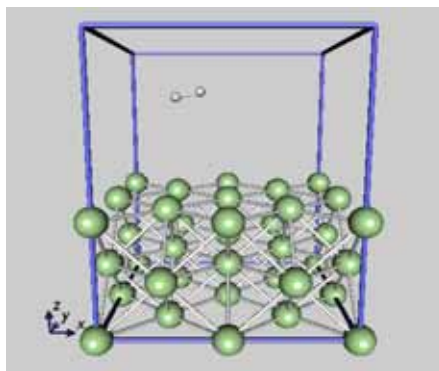
	a_0 (bohr)	c_0/a_0	u_0	e_{33} (C/m ²)	$e_{33}^{(0)}$ (C/m ²)	$Z_{\parallel}^*$	$du/d\varepsilon_3$
PHASE	5.8064	1.601	0.3820	1.61	-0.40	-2.66	-0.19
Ref.	5.8140	1.619	0.3800	1.46	-0.47	-2.70	-0.18
Exp.	5.8777	1.601	0.3820	1.55			

Ref.: Phys. Rev. B 56 (1997) R10024.

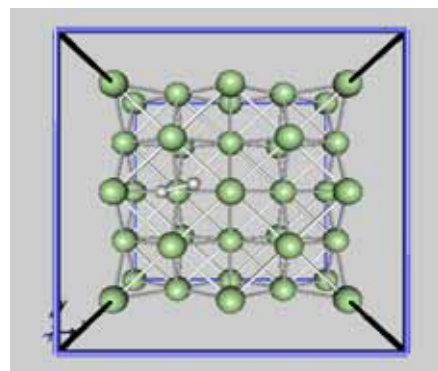


触媒反応

— Pt(100)面上のH₂分子の解離吸着 —



(a) 鳥瞰図



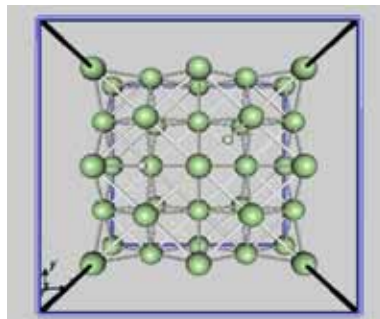
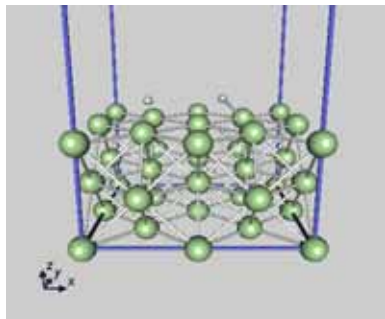
(b) 平面図

Pt 原子(緑色)基板は3層からなる。

小さな白球は水素原子を示す。



前ページからのつづき



bridgeに吸着したHを固定し、hollowのH
を緩和。 → bridgeに吸着。



Pt(100)面上のH₂分子の解離吸着のまとめ

Pt 3層基板の水素吸着エネルギー

Site	eV / H atom
Bridge	-0.608
Top	-0.477
Hollow	吸着せず

吸着エネルギーは
膜厚によるでしょう。

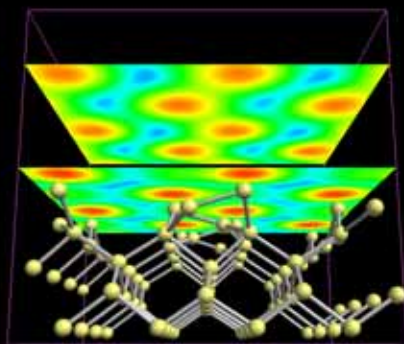
でも、3層膜でも十分
触媒作用を持っています。

安価な材料の上に
数原子層のPtを蒸着
しても触媒基板として
使えそうです。

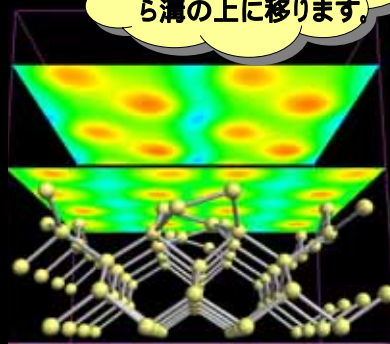


STM像のシミュレーション

針の高さによって像の位置はダイマー上から溝の上に移ります。



(a) occupied



(b) unoccupied

Si(001)-p(2x2) 表面

「ナノデバイスシミュレーションシステムの作成」での開発項目

1. 高精度な電子相関解析
ギャップ補正: TDDFT, Hybrid functional, exact exchange
DFT+U による電子系・格子系誘電率
2. 化学反応解析強化
NEB, Blue Moon, Meta-dynamics
3. PAW型擬ポテンシャルの実装
PAW型ポテンシャル データ・ベースの作成
4. 電子伝導・電子ダイナミクス (ASCOT)
5. ペタコン対応 (理研との共同研究)

