



アドバンスソフト技術セミナー ナノ・バイオシミュレーションの現状と当社の取り組み

ナノシミュレーションの取り組み

アドバンスソフト株式会社
技術第2部 主事研究員
小池 聡

2.

本日の内容

- ナノとは？
- ナノテクノロジーの歩みとメソスコピック系の物理
- 弊社のナノメゾ材料分野における取り扱い対象(現状)
- 弊社のナノシミュレーションにおける業務内容概要
- 弊社のナノシミュレーション分野のソフトウェア開発・解析概要
- 弊社が持つナノ(材料)分野のためのソフトウェア
- 材料分野でのシミュレーション
- 材料分野への対応例その1
- 材料分野への対応例その2



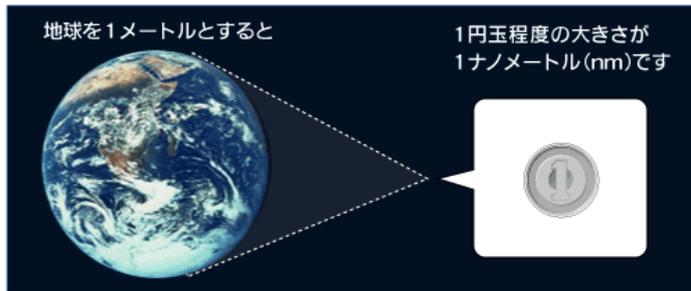
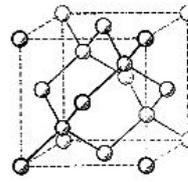
ナノとは？

■ ナノとは？

ナノメートル(nm=10⁻⁹m)の略。

Si原子の半径(共有結合半径) ~ 0.1 nm

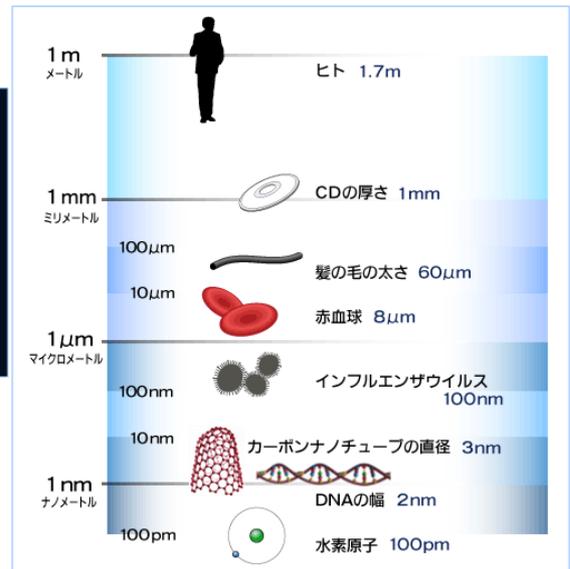
Si結晶の単位格子(ブラベ格子) ~ 0.54 nm



NEDOのページ

<http://app2.infoc.nedo.go.jp/kaisetsu/nan/nan00/index.html>

注) 右図水素原子半径はVdW半径。共有結合半径 ~ 0.03nm



3



ナノテクノロジーの歩みとメゾスコピック系の物理(1)

- 1959 ファインマン教授の予言
「将来は原子を1個ずつ積み上げて物質をつくるのが可能」
- 1974 谷口紀男教授
「加工精度が2000年には1nm程度になる」
- 1981 走査型トンネル顕微鏡の発明(IBM)
- 1985 スモーリー博士 サッカーボール型フラーレンの発見
- 1990 走査型トンネル顕微鏡による原子操作
(「IBM」の文字を35個のキセノン原子でかく)
- 1991 飯島澄男博士、カーボンナノチューブの発見
- 2000 米国クリントン大統領「国家ナノテクノロジー戦略」の発表
- 2001 日本では第2期科学技術基本計画で
「ナノテクノロジー・材料」分野を重点分野に指定

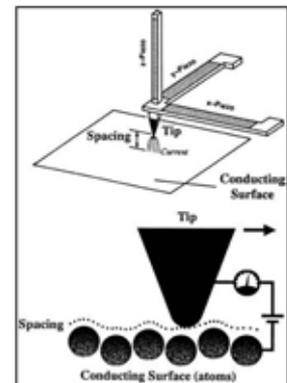


Fig. 2.24. Schematic of scanning tunneling microscope (STM) (taken from Devita²⁴ and Foster²⁵).

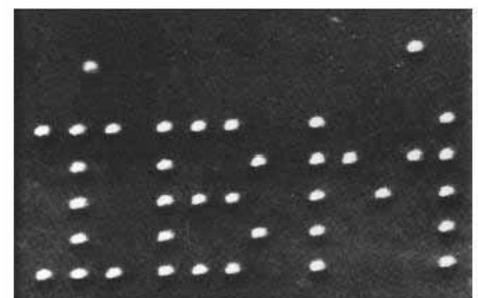
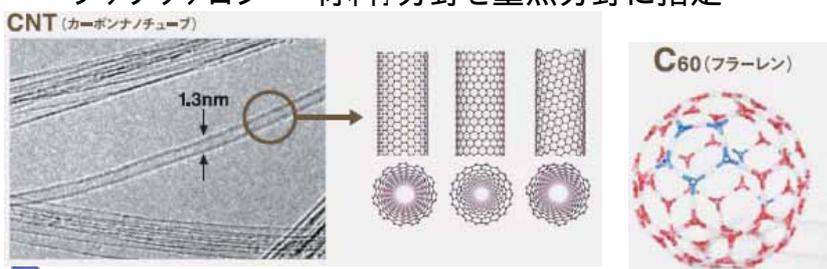


Fig. 2.25. IBM logo spelled out using 35 xenon atoms arranged on a nickel surface by an STM (courtesy of IBM Research Division).



弊社のナノシミュレーション分野のソフトウェア開発・解析(1)

ソフトウェア開発

■ ソフトウェア開発

- 第一原理計算 Advance/PHASE
- 結晶成長プログラム Advance/TFLAGS
- 分子動力学プログラム
- STS解析プログラム
- デバイス形状作成モデラ
- タイトバインディングプログラム

■ ソフトウェアのカスタマイズ

- QMC
- スパッタリング解析



7

弊社のナノシミュレーション分野のソフトウェア開発・解析(2)

受託開発の例1: 第一原理計算 PHASE

■ 文科省: イノベーション基板シミュレーションソフトウェアの研究開発

ナノデバイスシミュレーションシステム

- リーダ: (独)物質・材料研究開発機構計算科学センター長
大野先生
- サブリーダー: アドバンスソフト 宇田毅

他、東大、東京理科大、金沢大、慶応大、東邦大、富士通研、日立製作所が参画。
弊社からは、宇田の他、甲賀、田上、小池が参加

弊社では主に以下の開発に携わっている

- ・電子相関の高精度化
- ・擬ポテンシャルの高精度化
- ・高速化・安定性向上
- ・GUI
- ・電子ダイナミクス解析
- ・化学反応経路探索の高度化
- ・自由エネルギー解析



開発成果をPKG化
Advance/PHASE



8

弊社のナノシミュレーション分野のソフトウェア開発・解析(3)

■ 受託解析概要

金属材料、半導体材料、表面反応、エネルギーに関する受託解析

ここでは、その中で、

- ・ナノ材料解析(STM画像)ほかについて紹介します。



9

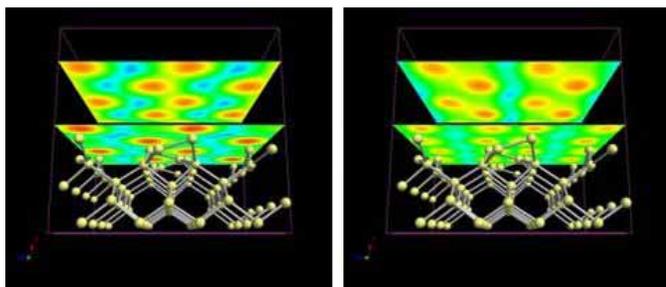
弊社のナノシミュレーション分野のソフトウェア開発・解析(4)

第一原理計算 Advance/PHASEによる解析例1

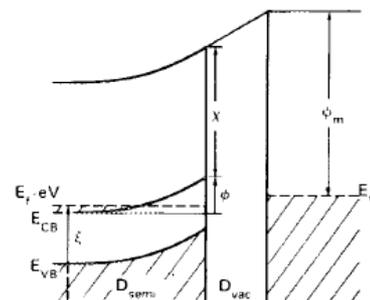
■ STM画像

Si p(2x2)表面のSTM像のシミュレーション

STMで得られる画像は、物質の表面の波動関数を可視化したもの。
STM像の正確な理解のためには、電子状態を知る必要がある。



左: バイアス負: 占有状態
右: バイアス正: 非占有状態



10

弊社のナノシミュレーション分野のソフトウェア開発・解析(5)

受託開発の例2: STS解析プログラム

■ STM/STS

半導体とチップの材料やドーパント等を変えたときの、STSによるIVカーブを手軽にシミュレーションしたい。
第一原理で計算するのはしんどい。

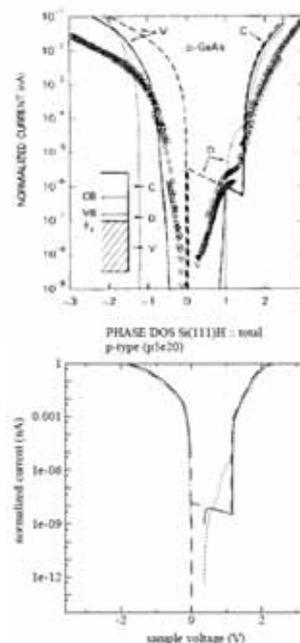
R.M.Feenstra and J.A.Stroscio(1987)

- ・半導体-真空-チップの間の電子遷移の計算
- ・移動方向は1次元に近似
- ・電子は自由電子で近似
- ・ゼロ温度



この論文ベースでさらに以下の改良を施したプログラムの開発

- ・電子の状態密度は第一原理計算の結果を反映させる
- ・有限温度



弊社が持つナノ(材料)分野のためのソフトウェア

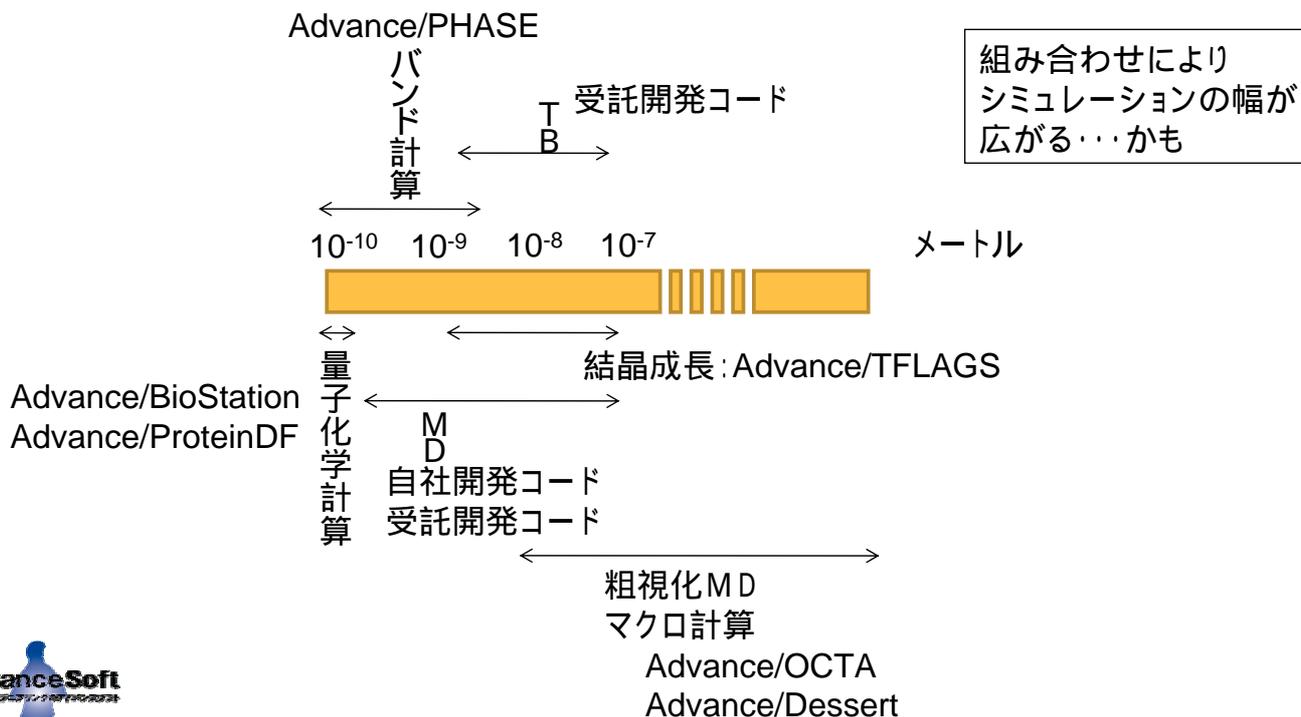
主なもの

- 量子化学計算コード
Advance/ProteinDF
Advance/BioStation
- 第一原理バンド計算コード
Advance/PHASE
- 粗視化分子動力学コード
Advance/OCTA
- 結晶成長シミュレーションコード
Advance/TFALGS
- デバイスシミュレータ
Advance/DESSERT



弊社が持つナノ(材料)分野のためのソフトウェア

■ スケールによる分類



13

材料分野でのシミュレーション

弊社の取り組み

- 単体でのシミュレーション
・研究開発に必要な物性量等を求める機能の充実
- さまざまなシミュレーションの組み合わせ
・マルチスケール、マルチフィジックスのような使い方

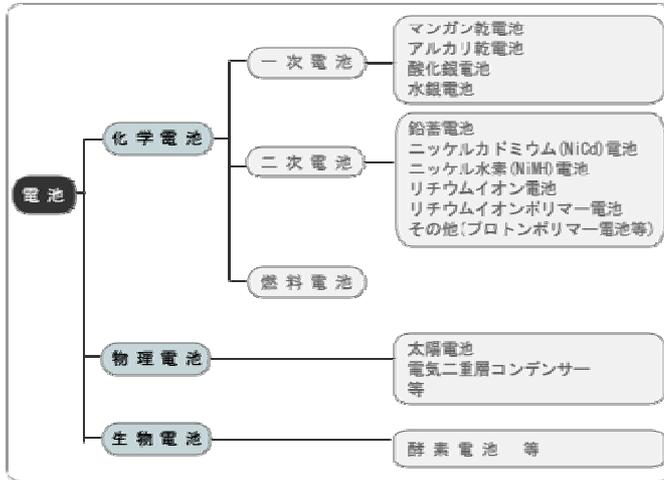
いかに手軽に使えるか？



14

材料分野への対応例その1(1)

燃料電池の研究開発 リチウムイオン電池



携帯電話



材料分野への対応例その1(2)

陽極

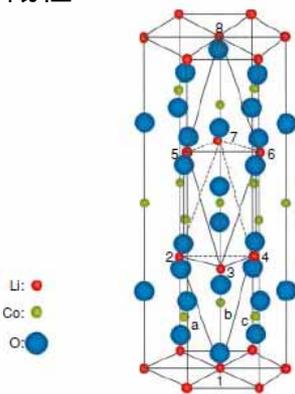
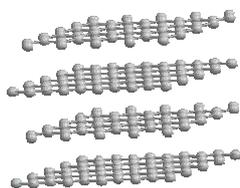


図 3.1 LiCoO₂の層状構造

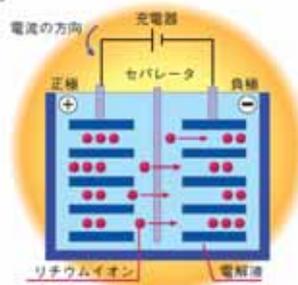
http://www.ntt-fsoken.co.jp/research/pdf/2004_ichi.pdf

陰極



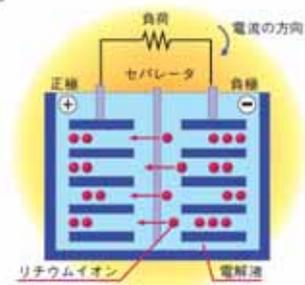
リチウムイオン二次電池の動作原理

● 充電



リチウムの化合物である正極材料内のリチウムイオンが、セパレータを通じて負極炭素材の層間に移動することにより充電電流が流れる。

● 放電



負極炭素材の層間にあるリチウムイオンが、セパレータを通じてリチウムの化合物である正極材料内に移動することにより放電電流が流れる。

島津製作所様のカタログ(C10G-0081)より



材料分野への対応例その2(1)

■ 有機ELの研究開発

有機EL素子の概要

Bottom Emission

Top Emission



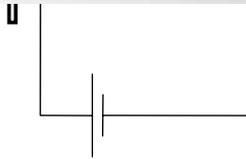
<http://www.sony.jp/oel/>

世界初*有機ELテレビが
あなたのお気に入りのコンテンツを
さらに美しく。

©2007年10月



<http://www.ypoint.jp/howabout.htm>



2010年における
有機ELディスプレイの市場

