

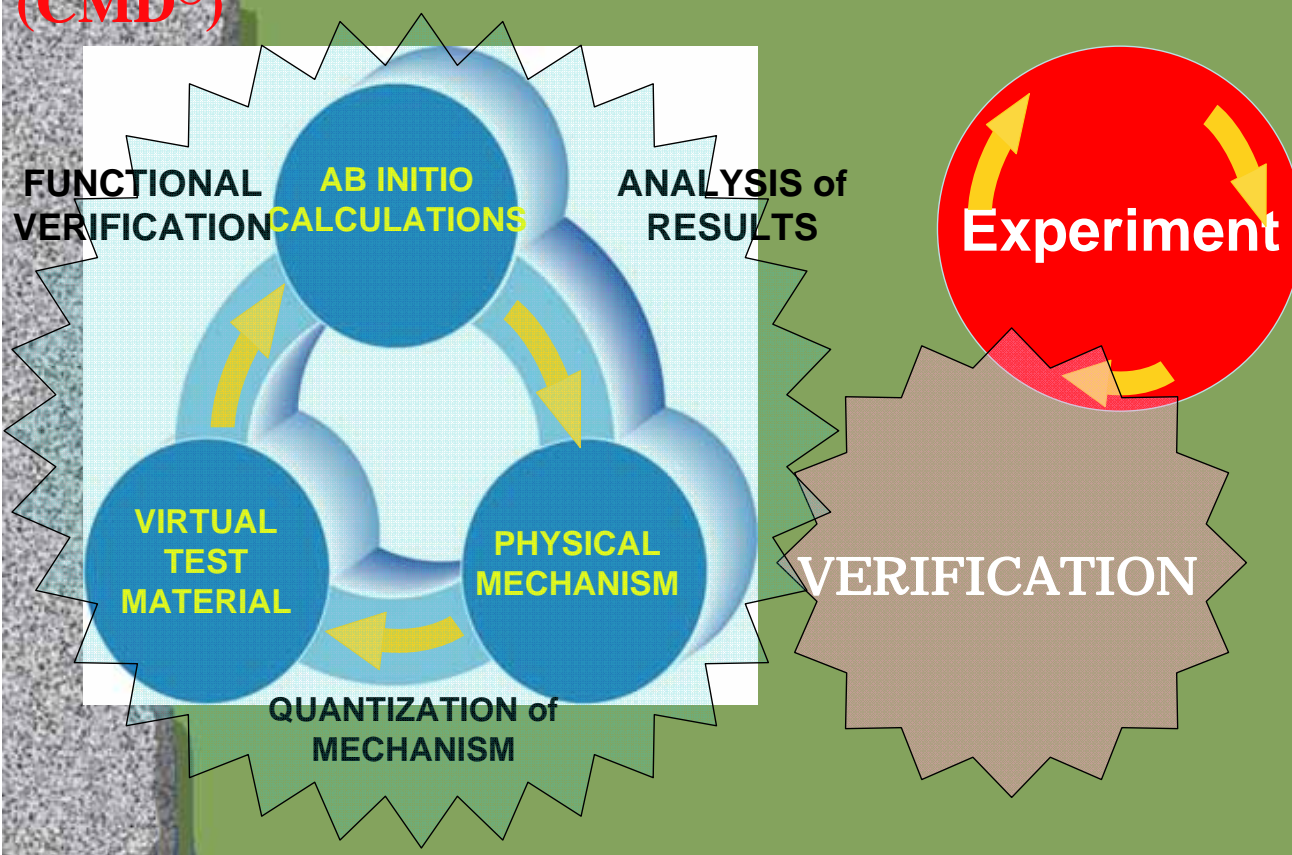
大阪大学サイバーメディアセンター
平成19年度スーパーコンピュータシンポジウム
2007年8月3日(金)大阪大学銀杏会館

計算機マテリアルデザイン入門 ー基礎と応用ー

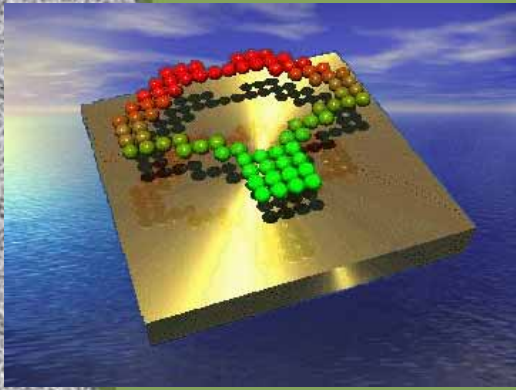


大阪大学大学院工学研究科
笠井秀明, 中西 寛
大阪大学大学院理学研究科
Wilson Agerico Diño

COMPUTATIONAL MATERIALS DESIGN[®] (CMD[®])

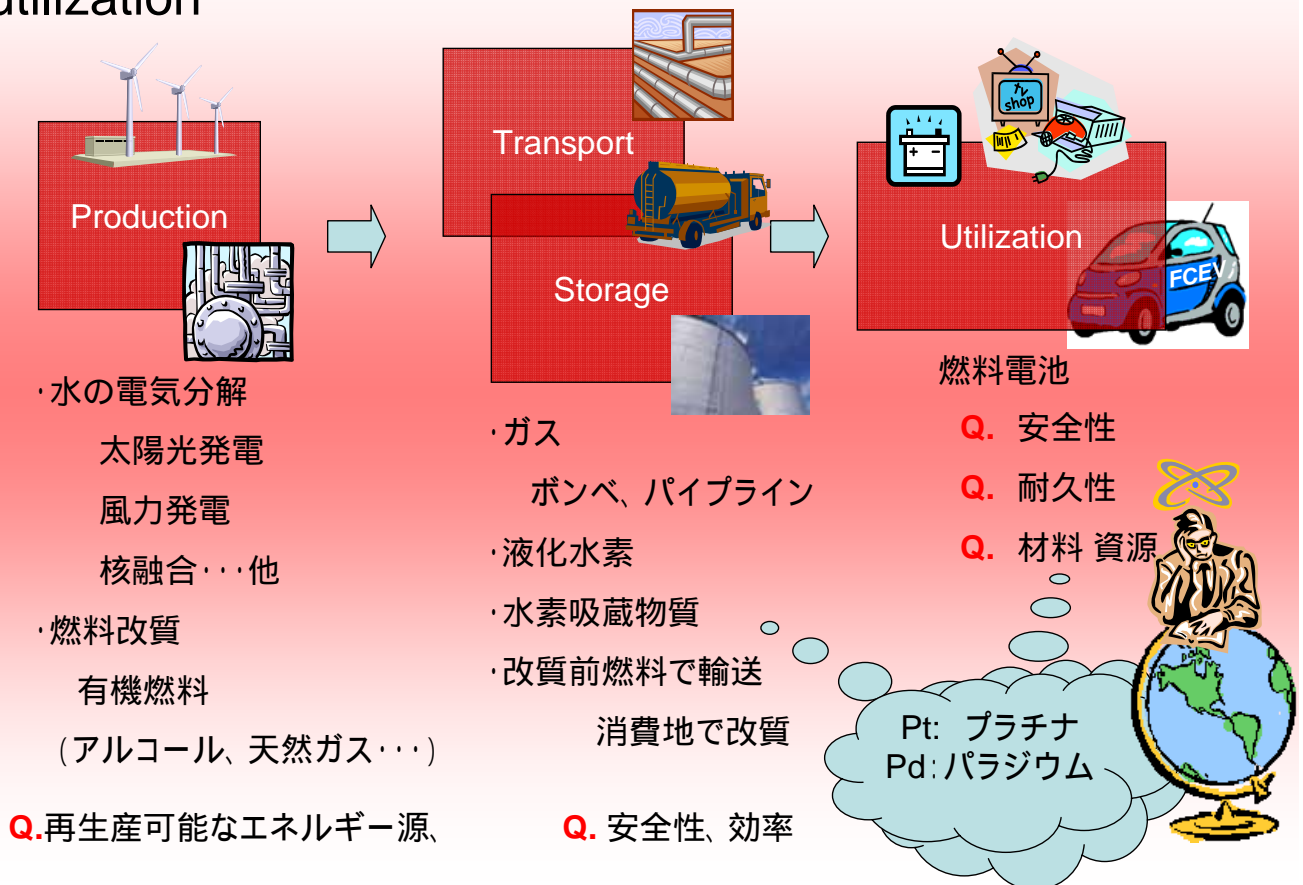


Hydrogen Storage and Fuel Cells



燃料電池と水素貯蔵

Problems in hydrogen production, transportation, and utilization

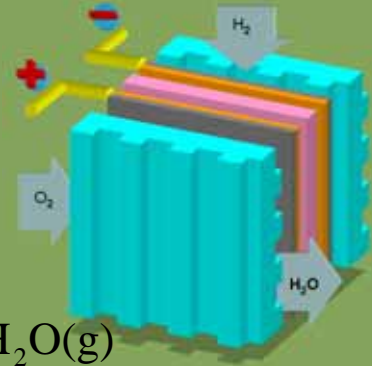
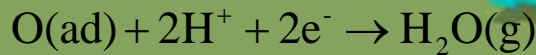
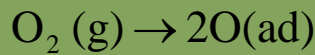


応用例として

酸素分子の解離吸着

・電池の電極反応の素過程

燃料電池の 空気極



・触媒反応の素過程

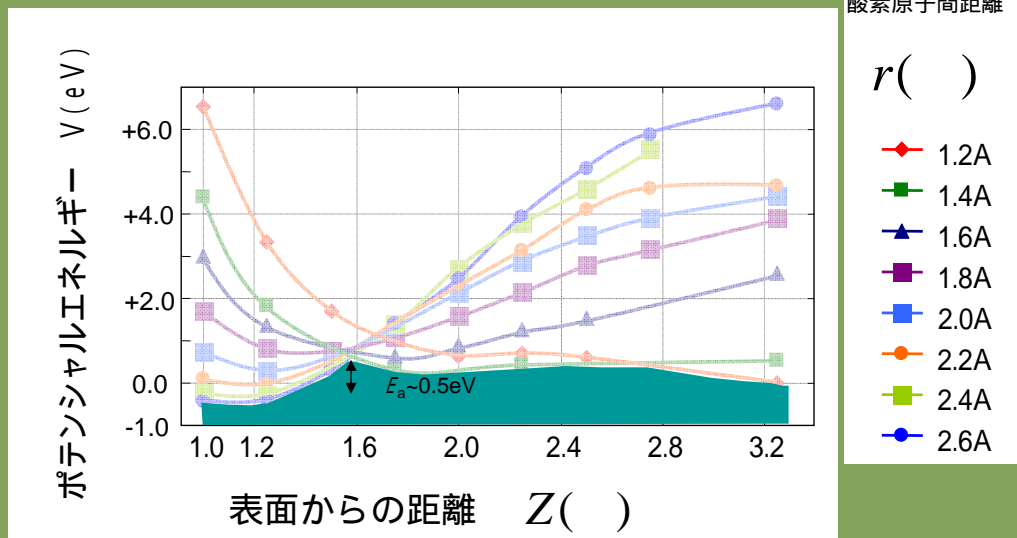
—酸化炭素の酸化触媒

・ ・ ・

表面ナノ構造による磁性デザイン

「Ptを磁化させるナノ構造」

Fe(001) 上のPt原子薄膜



酸素分子の解離吸着の活性化障壁

特願2006-176888号

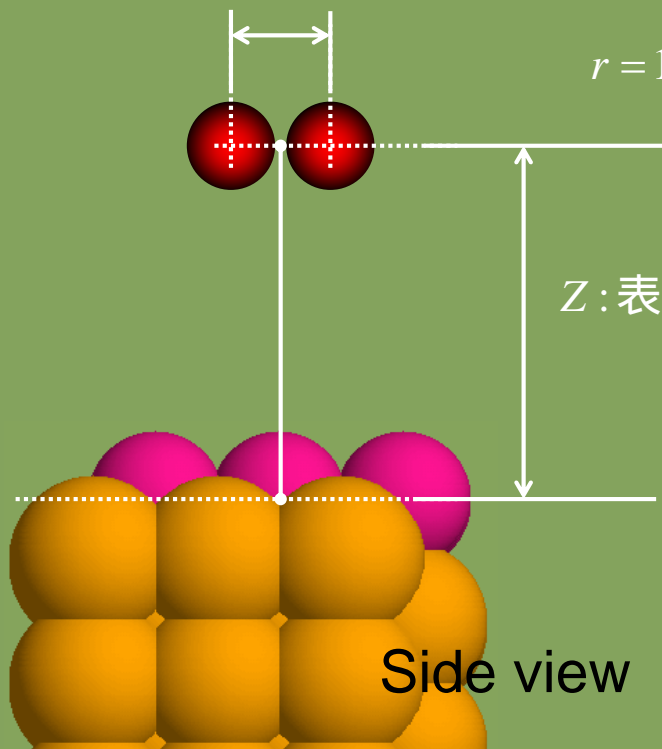
on Pt/Fe(001)

酸素分子の解離吸着

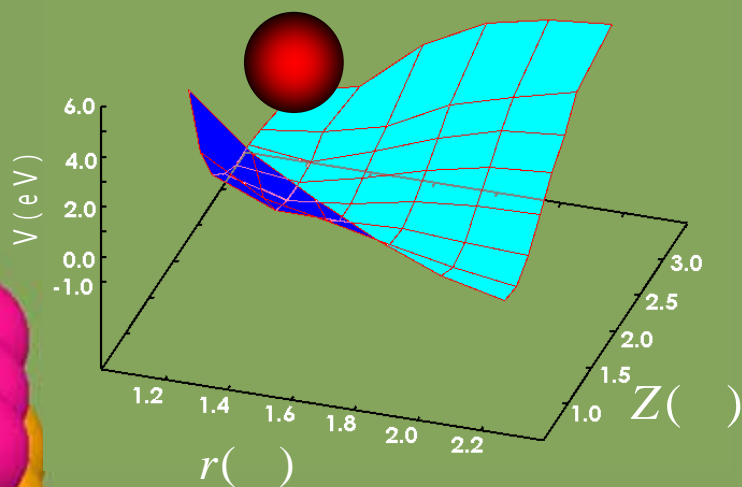
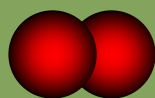
r : 酸素原子間距離

$r = 1.21 \text{ \AA}$ @ $Z = +\infty$

Z : 表面からの距離

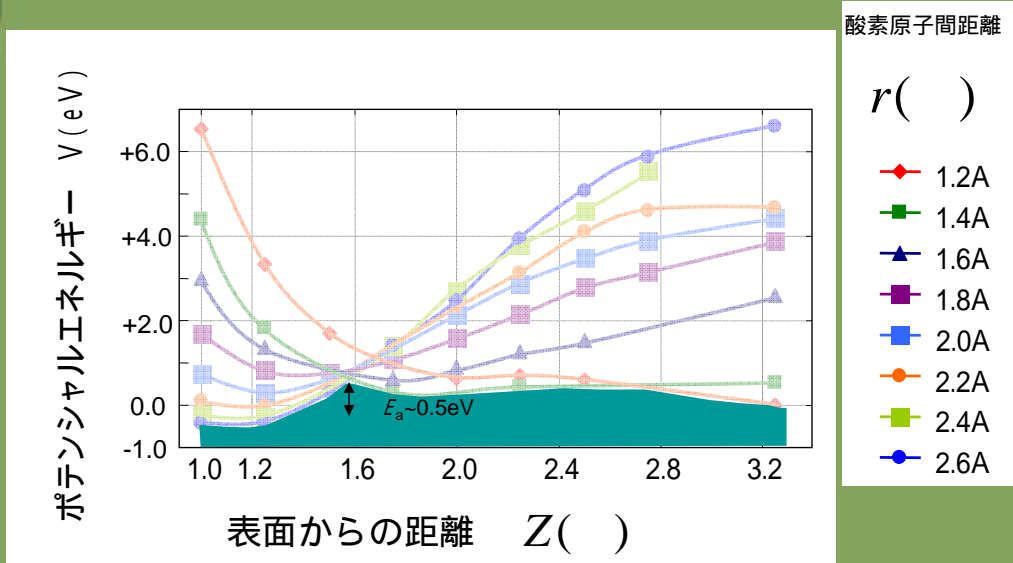


酸素分子の解離吸着過程



on Pt/Fe(001)

酸素分子の解離吸着の活性化障壁



on Pt/Fe(001)

ナスピントロニクスデザインと創製

「阪大オリジナル」

計算機ナノマテリアル・デバイスデザイン

マテリアルデザインエンジン

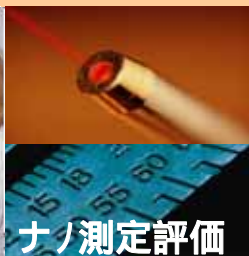


デザイン手法

評価データ

ナノマテリアル・デバイス創製

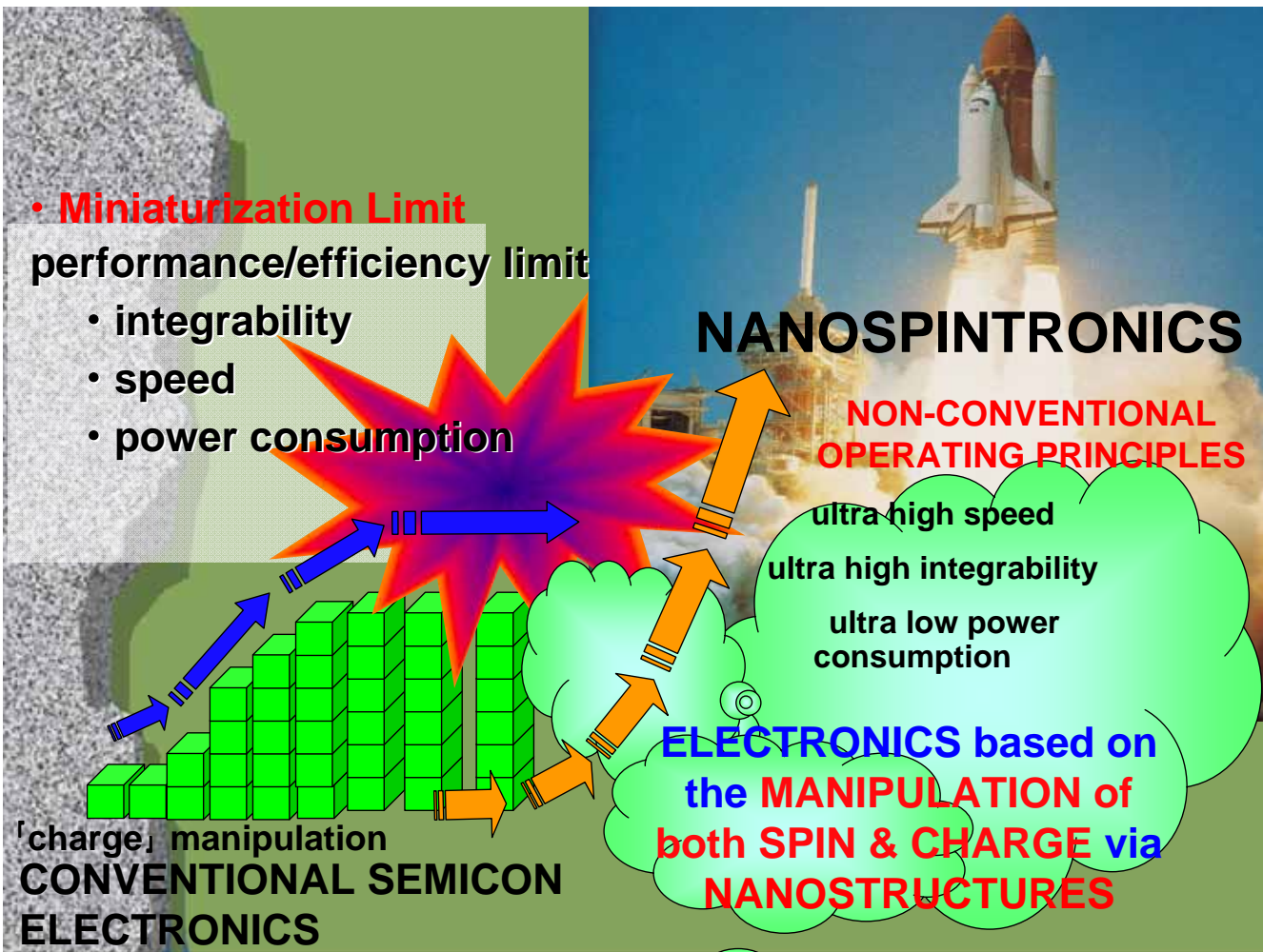
ナノ構造創製



ナノ測定評価

設計図

：2つのエンジンの協奏



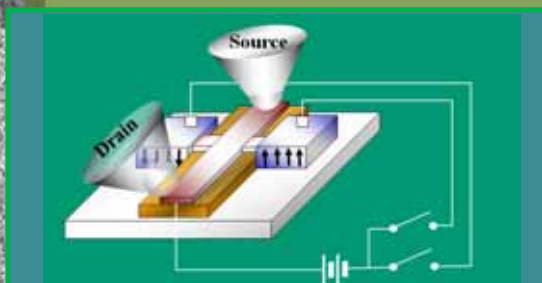
表面ナノ構造利用の

弾道スピン回路 Ballistic Spin Circuit

- スピン分極したサブバンド、および、表面状態を利用
- ロスの無いバリスティック伝導
高速キャリア
- 究極のサイズ = 原子スケール
高集積
- 究極の省エネルギー
スイッチ(スピン反転)
- 不揮発性メモリー

- **磁性原子架橋**
(STM-Tip - 表面間)
- **磁性ナノワイヤー**
(金属・半導体表面上)
- **磁性薄膜**
(金属・半導体表面上)

「表面スピントロニクスデバイス」
*Surface Spintronics Device
(JPA 2003-179726)
(PCT/JP2004/009226)



Ubiquitous Information Society & Transition-Metal Oxide Device

Ubiquitous information society

The society where information can be accessed
"Wherever", "Whenever", "Whoever".



Exchanging enormous digital data at a very high speed



Demand for Transition-Metal Oxide device

- Possible use for nonvolatile memory : RRAM
 - Giant magnetoresistive switch effect
 - Huge capacity storage device
- (ex) TiO_2 (anatase type), NiO, CuO, Fe_3O_4 , PCMO...



Nano-processing of Transition-Metal Oxide Device Elements

Requirement: Ultramicro fabrication of integrated circuits and device materials

Ar ion milling method

- Easy processing
- Has significant limitations for nano-processing (low aspect ratio)
- Has some difficulties to process transition metal oxides



Reactive ion etching method (RIE)

- Potential for nano-processing (high aspect ratio)
- Thorough knowledge and experience is necessary
R&D for transition metal oxide etching has just started



Can R&D period be shortened?



Succeeded in
NiFe RIE

特願2004-075506号

Application of computational materials design techniques

(2005)

大阪大学サイバーメディアセンター
平成19年度スーパーコンピュータシンポジウム
2007年8月3日(金)大阪大学銀杏会館

Realizing a Knowledge- Networked Asia

Quantum Engineering Design Research Initiative,
Graduate School of Engineering, Osaka University

「動き始めたアジア・知のネットワーク」

QE (Quantum Engineering)
デザイン研究イニシアティブ
「大阪大学大学院工学研究科
専攻横断的研究組織」

・アジア各国との共同研究
・共同講演会, ワークショップ
・留学生の受入れ(部局横断)
(特別教育プログラム)
量子エンジニアリングデザインコース

!! WARNING !!

グローバル市場経済状態の諸問題

- ・世界的規模での知・富の偏在化
および格差の増大
- ・国内の産業空洞化、知の流失

- ・知識基盤社会での優位性
- ・安全・安心性、環境調和性、高効率性
- ・ナノ・量子・ICT (Information & Communications Technology) 政策



互いに互角のプレーヤーとして
アジア諸国との強力な
パートナーシップを実現