

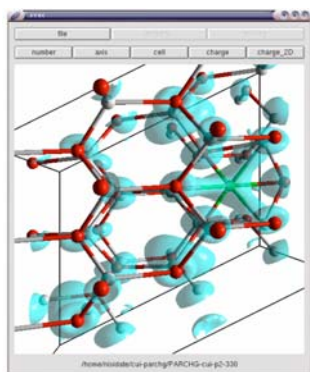
シーズ名	電子構造計算、および科学技術計算環境の構築	分類：5
所属 / 職 / 氏名	工学部 電気電子・情報システム工学科 / 准教授 / 西館数芽	
キーワード	電子特性・構造特性の予言、新物質の設計、ナノ構造の設計、ハイパフォーマンスコンピューティング	

## どんな技術？

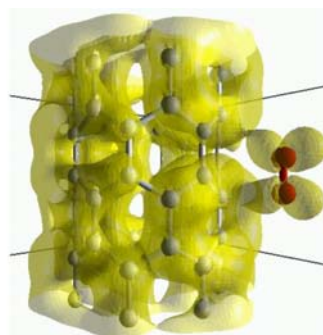
一言アピール

**第一原理電子構造計算法によるデバイス材料や分子などの電子構造解析. 分子動力学シミュレーションコードの開発. 解析用計算コードの開発. OpenGL によるグラフィックスプログラミング. Perl プログラミング. Linux 環境の整備.**

我々の現代生活を支える半導体。その性質は、バンドギャップや欠陥準位、不純物レベルといった特殊な電子構造に由来します。我々の研究室では、最新の科学理論と東京大学物性研究所の超並列スーパーコンピュータを駆使して、物質の電子構造を探ります。



半導体内の欠陥により誘起された電子構造  
並列計算機で数時間の計算結果



結合電子軌道を重ねて表示  
自作のデスクトップ並列計算機で計算(Linux)

## 何に使えるの？

金属および酸化物表面における触媒反応の電子論的研究、半導体の欠陥状態の電子構造解析、電池の正負極材料の電子構造解析

### 関連特許

### 関連資料等

- M. Hasegawa and K. Nishidate, Transfer doping of a metallic carbon nanotube and graphene on metal surfaces, Phys. Rev. B 83, 155435 (2011) (11 pages).
  - K. Nishidate and M. Hasegawa, Energetics of Mg, B, Cu, and Ti Atoms Adsorbed on the ZnO Polar Surfaces from First Principles e-J. Surf. Sci. Nanotech. 9, 199-205 (2011).
- Google 検索 => 「にしだてけんきゅうしつ」