



電子状態計算から導く新物質・新機能・新概念へ

多田グループ

多田 朋史

tada.t.ae@m.titech.ac.jp

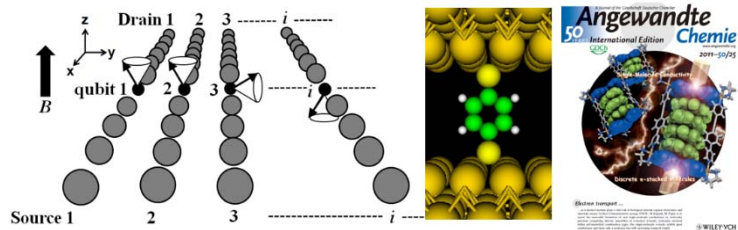
◆ 研究目的と概要 < 新たなコンセプトを生み出せる理論研究を >

近年の計算機の飛躍的發展により、一定の信頼性を確保した上で電子状態計算による材料探索/特性予測が実行可能になってきました。中でも、第一原理計算は原理的に実験値不要の計算手法であり、新物質探索を行う上では欠かせない手法となっています。新物質の探索はもちろん、新機能へのヒント、そして複雑に見える現象を見通しよく整理するための新概念を計算結果から抽出し、世に必要とされる潮流を生み出せる理論の構築を目指しております。

◆ 研究テーマ < 分子素子、量子情報素子、エネルギー変換、新材料探索 >

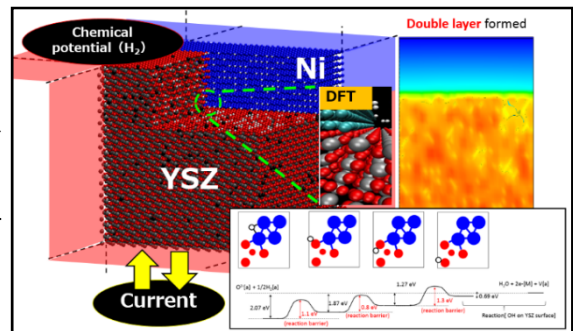
・単一分子素子と量子情報素子

単一分子素子とは、分子一個が電極に接続され、それが電子素子ユニットとして機能しうるコンセプトの微視的接合体です。素子として高い電気伝導度を得るための接続規則を分子軌道から予測できる事を見出し、この分子素子を集積して量子コンピュータを作るための動作原理と、そこで必要となる物理的条件について研究しております。



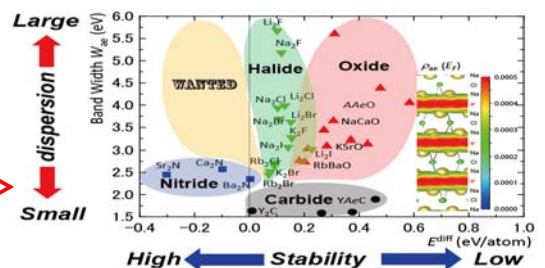
・固体酸化物形燃料電池

イオン伝導性をもつ固体電解質を用いることで、効率よく化学エネルギーを電気エネルギーに変換できるシステムが固体酸化物形燃料電池です。原子レベルの電子状態計算からマクロスケールの物理量までをつなげるマルチスケール計算技術を開発し、実計測と対応させながら材料設計を行っております。



・二次元エレクトライド材料探索

エレクトライドとは電子がアニオンのように振舞うユニークな材料です。そのアニオン電子を二次元的に内包する二次元エレクトライドを第一原理計算と化学的考察をもとに探索しております。



◆ 当研究室について< 化学、物理、生物、材料 >

・研究体制

多田は平成25年1月1日に東京大学から赴任いたしました。大学院生一名、博士研究員一名、技術員二名の五人体制の小さな研究室ではありますが、各々の専門分野は化学、物理、生物、材料と多様です。研究テーマに関する議論はもちろん、それ以外のトピックに関しても時間を選ばず話合うことのできる環境を大切にしております。

・研究道具

紙と鉛筆(最近ではタブレットとタッチペンでしょうか)で夢を描き、それを具現化する道筋を提起するための道具として計算機を用います。当研究室は16コア計算機を30ノード、12コア計算機を5ノード、8コア計算機を2ノード有しております。もちろんTSUBAMEも使用いたします。数値計算を行う際に計算ソフトも必要になりますが、市販のソフトを用いる場合と、自作のソフトを開発して用いる場合があります。理論研究を始めるうえでコンピュータやプログラミングに関する経験があるに越したことはないですが必須のものではありません。一番大切なのは豊かな想像力でしょう。

・その他

研究活動において理論計算をどう位置づけるかはご自身次第です。実験をやりつつ、それだけでは見えない部分を理論計算で補いたいという方もいれば、ただ単に理論が好きで実験はあまり得意ではないから、という方もいるでしょう。多田は後者でした。きっかけは様々です。当研究室にご興味を持たれた方は是非一度お立ち寄りください。



Computational Materials Design group

Tada Group

Tomofumi Tada

tada.t.ae@m.titech.ac.jp

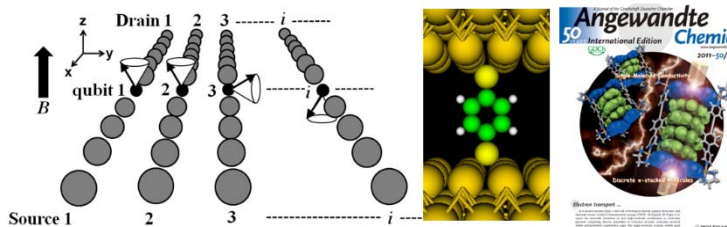
◆ Research targets < Computations for new concepts >

Owing to recent developments of computers, materials designing and quantitative prediction of physical properties with computers becomes an important research strategy. In particular, the first principles electronic structure calculations, which does not require any experimental parameters in principle, are very powerful tool for the designing of new materials. In this group, new concepts for future electronic devices, quantum information systems, and energy conversion systems are investigated with computers, as well as the new materials designing.

◆ Topics <Molecular devices, Quantum Information, Energy, New Materials>

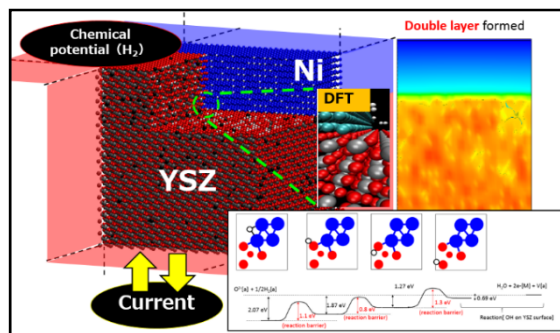
•Single molecular junction and Quantum information processing.

Single molecular junction (SMJ) is a quite small unit composed of a molecule and electrodes for future electronic devices. An effective connection rule between the molecule and electrodes for high conductance in SMJ was derived in past by me on the basis of molecular orbitals, and SMJ for quantum information processing is a present target.



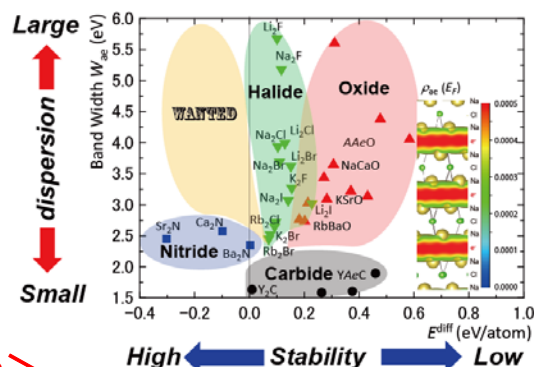
•Solid Oxide Fuel Cells

Solid oxide fuel cells are the chemical-to-electricity conversion systems with high energy conversion rate. In this group, a parallelized kinetic Monte Carlo simulation code has been developed in order to design a macro scale system based on the atomistic level simulations on the first principles methods.



•High-throughput ab-initio screening for electrides

Electrides are unique materials in which electrons loosely confined in nano-cages behave as anions in materials. In this group, two-dimensional electrides are computationally explored with high-throughput ab-initio screening.



◆ About the group

<Chemistry, Physics, Biology, Materials>

•Members

This group started on 1st Jan 2013. This group is a small group with five members (Post-doc, Technical staff, Students), but the special fields of the members widely spread as chemistry, physics, biology, and materials science, which enables us fruitful discussions for many topics in wide range.

•Tools & Messages

In this group, computers and software (or programs) are used to verify our ideas for new devices, new materials, and new concepts. The computer system in this group includes 30 nodes of 16 core/node model, 5 nodes of 12 core/node model, 2 nodes of 8 core/node model, and a single node of 32 core/node model. We also use TSUBAME super computer system in Tokyo Tech. For calculations, we use both well-developed commercial software and original software built from scratch. If you have an experience on computations or programing, it's better to do theoretical research, but such an experience is not a necessary condition. The most important thing is a strong imagination.