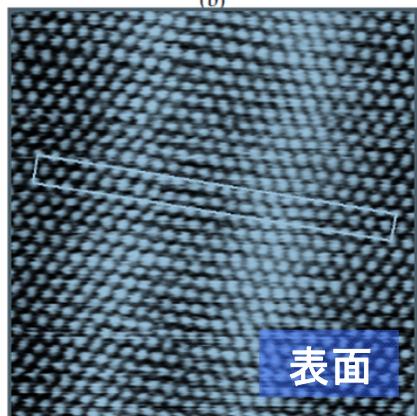
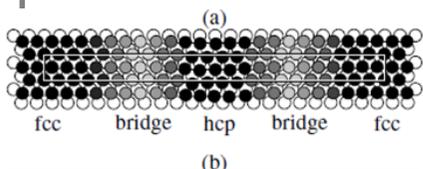


P-25 第一原理計算による局所応力解析

産総研 椎原良典, 香山正憲, 田中真悟, Wang Ruzhi, 田村友幸, 石橋章司

第一原理計算とスパコン

- 量子力学に基づく高精度なナノ物性予測
→ 実験で達成困難なマテリアルデザイン
- 対象は複雑かつ大規模な原子構造
→ スパコンによる大規模計算

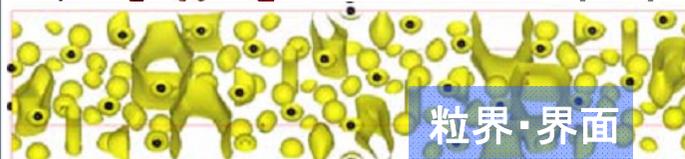
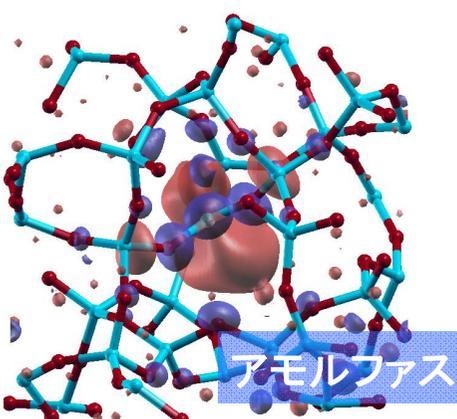


W Haiss, RPP, 64, (2001).

例: Au (111) 表面の再構成現象

原子層15のスラブモデルで1995原子数

T. Tamura et al., PRB, 77, (2008).



M. Kohyama (unpublished)

第一原理計算と局所応力

- 応力: ひずみに対する応答
- 応力分布からひずみと物性の関係
- 従来手法では応力分布は得られない
→ 局所応力計算法を提案

