

物質・材料研究機構（NIMS）における  
計算科学と実験研究との連携  
および  
“ナノ”の実験研究者としての意見

青野 正和

（独立行政法人）物質・材料研究機構（NIMS）



フェロー、(WPI センター) 国際ナノアーキテクトゥクス研究拠点 (MANA) 拠点長

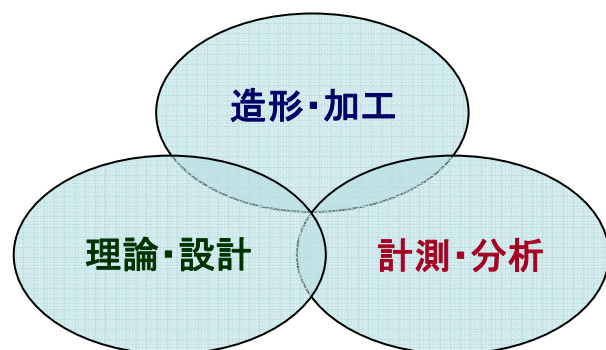




# NIMS におけるナノテクノロジー関連の 実験研究と理論研究の連携

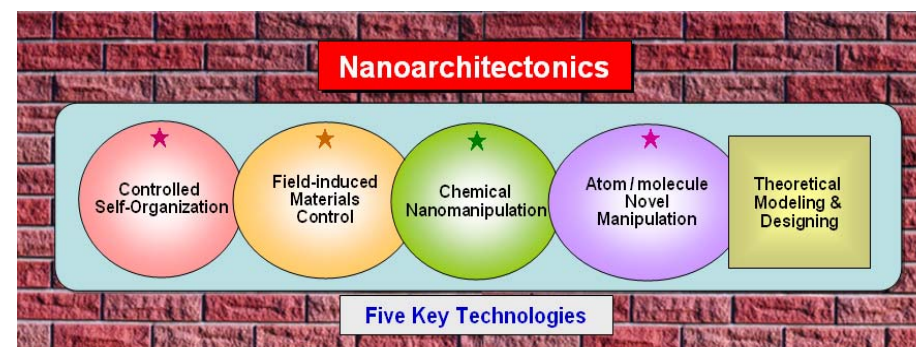
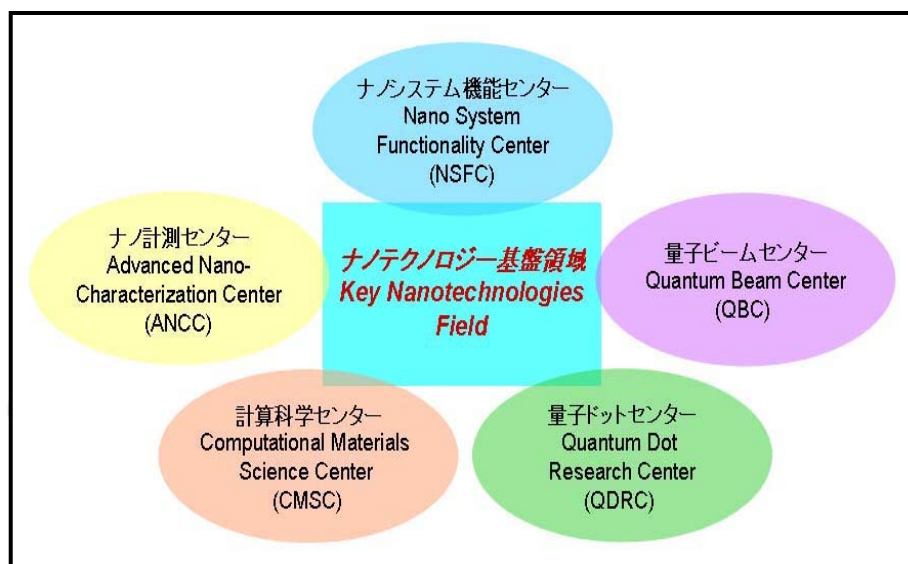


<ナノテクノロジー基盤領域>



<国際ナノアーキテククス研究拠点>  
(MANA)

(2007年10月発足)

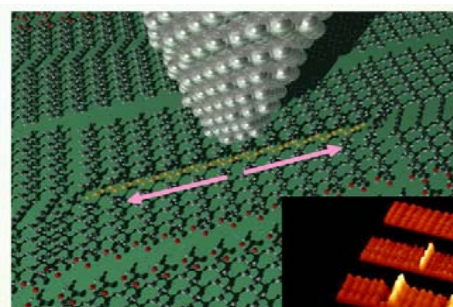


# “ナノ”の実験研究者としての意見

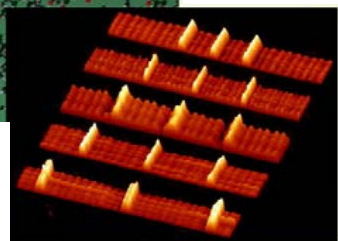
ナノ現象の多くは、  
**動的過程**で、**励起状態**を含み、強い**外場の影響下**で起こる。

それらのメカニズムを計算シミュレーションによって正しく  
 理解したい。それによってメカニズムの制御が可能になる。

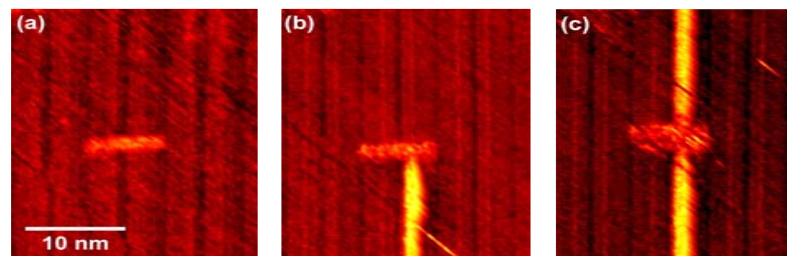
## <例 1> 導電性高分子鎖の連鎖重合による形成とそれによる分子へのナノ配線



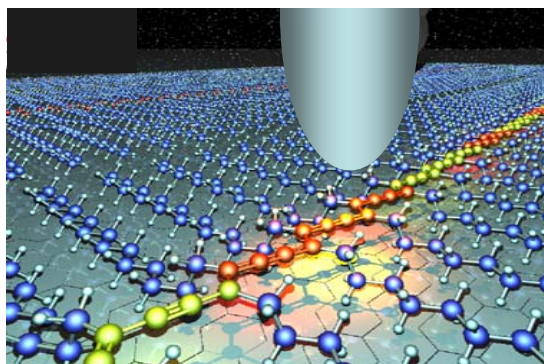
← ポリジアセチレン分子鎖の任意位置での形成



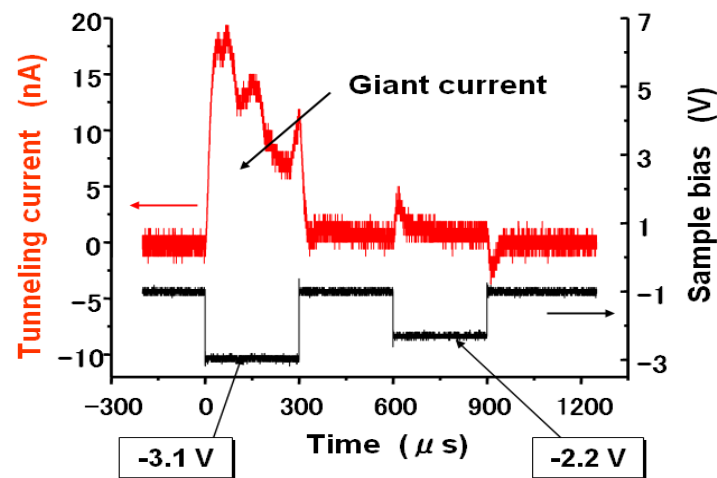
それを用いた分子へのナノ配線 ↓



## <例 2> 高分子鎖の電界による金属への転移

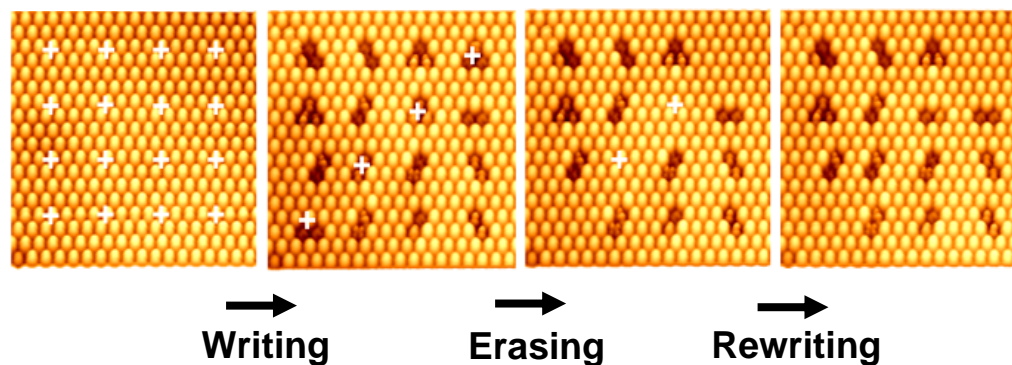
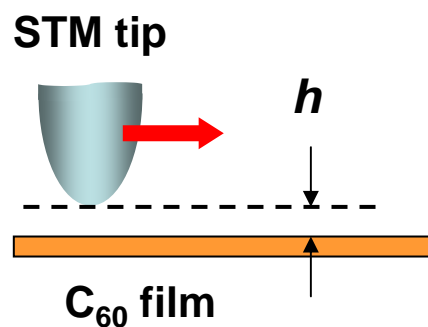


ポリジアセチレンの一本鎖への  
電圧の印加



ポリジアセチレン分子鎖の電界による金属化と  
その状態のゆらぎ

## <例 3> 電圧の極性逆転による化学結合の可逆的制御





# Progress in computer electronics

