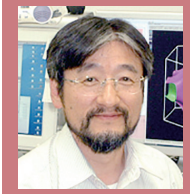


第一原理計算による物性予測と物質設計

First-Principles Predictions for Materials Design



小口 多美夫 ○
T. Oguchi
白井光雲
K. Shirai
山内邦彦
K. Yamauchi
舛田浩義
H. Momida

▶ キーワード Keyword

第一原理計算、相安定性・結合、磁性、超伝導、誘電性、光学特性、遷移金属酸化物系、金属有機分子結晶系、二次電池正極材料、触媒反応
first-principles calculation, phase stability, bonding nature, magnetism, superconductivity, ferroelectricity, optical properties, transition-metal oxides, metal-organic molecular crystals, cathode materials for secondary battery, catalytic reactions

▶ 応用分野 Application

物質、材料、デバイス
materials, devices

▶ 目的・期待される効果

- 新物質の設計、デバイス機能の新原理・概念
- 物性発現機構の解明

研究開発段階



研究内容

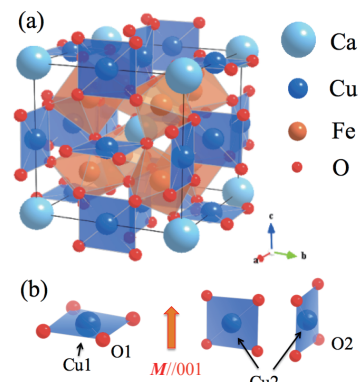
▶ 背景

理論的手法による新物質の設計、デバイス機能の新原理・概念の創出、物性発現機構の解明が求められています。

▶ 技術概要

量子力学の第一原理に立脚した理論手法に基づき、物質中の電子状態を明らかにすることによって物質固有の安定構造や性質を説明・予測し、その発現機構を調べることで物質・材料設計の指針を得ます。

物質固有の構造や性質はその物質中の電子がどのような状態にあるかによって決定されています。我々は、第一原理電子状態計算により様々な凝縮系・表面系を対象とした物性予測とその機構解明に関する研究を進めています。特に最近取り組んでいるトピックスとしては、スピントロニクスデバイスに応用可能な表面Rashba効果、高圧による新材料探索、マルチフェロイック系、遷移金属酸化物系、有機分子材料系、二次電池正極材料系、触媒反応等を上げることができます。



図：A サイト秩序型ペロフスカイト酸化物 $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ 。

【論文 Paper】

(機械学習による結晶構造予測)

[1] T. Yamashita, N. Sato, H. Kino, T. Miyake, K. Tsuda, and T. Oguchi, Crystal structure prediction accelerated by Bayesian optimization, *Phys. Rev. Materials* 2, 013803 (2018).

(状態図・相安定性)

[2] K. Shirai, Phase diagram of boron crystals, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 56, 05FA06 (2017) (progress review)

(強誘電体・スピンバレー系・トポロジカル物質)

[3] K. Yamauchi, P. Barone and S. Picozzi, Topological phase transition coupled with spin-valley physics in ferroelectric oxide heterostructures, *Phys. Rev. B* 95, 035146 (2017).

(強誘電体・圧電体材料)

[4] H. Momida and T. Oguchi, Effects of Lattice Parameters on Piezoelectric Constants in Wurtzite Materials: A Theoretical Study using First-Principles and Statistical-Learning Methods, *Appl. Phys. Express* 11, 041201 (2018).

(遷移金属薄膜・磁性)

[5] K. Nakamura, A.-M. Pradipto, T. Akiyama, T. Ito, T. Oguchi, and M. Weinert, Symmetric and asymmetric exchange stiffnesses of transition-metal thin film interfaces in external electric field, *J. Mag. Magn. Mater.* 457, 97 (2018).