

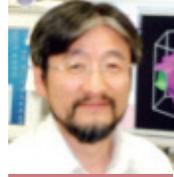
第一原理計算による物性予測と物質設計

First-principles predictions for materials design

研究分野

ナノ機能予測

研究者



小口 多美夫 ○
T. Oguchi
白井 光雲
K. Shirai
山内 邦彦
K. Yamauchi
粉田 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

基礎

実用化準備

実用化

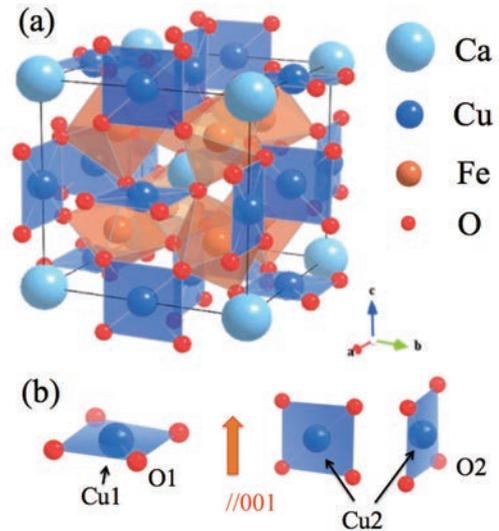
研究内容

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より物質・材料設計の指針を得ます。

技術内容

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、マルチフェロイクス系、遷移金属酸化物系、有機分子材料系、二次電池正極材料系、触媒反応等をあげることができます。



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】

(遷移金属酸化物系)

[1] M. Toyoda, K. Yamauchi, T. Oguchi, *Ab initio* study of magnetic coupling in $\text{CaCu}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ ($\text{B}=\text{Ti, Ge, Zr, and Sn}$), *Phys. Rev. B* 87, 224430 (2013).

[2] T. Ueda, M. Kodera, K. Yamauchi, T. Oguchi, First-principles calculation of x-ray absorption spectra for the A-site ordered perovskite $\text{CaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$, *J. Phys. Soc. Jpn.* 82, 094718 (2013).

(新材料探索)

[3] K. Shirai, Temperature dependence of Young modulus of silicon, *Jpn. J. Appl. Phys.* 52, 088002 (2013).

(マルチフェロイクス系)

[4] K. Yamauchi, Theoretical prediction of multiferroicity in $\text{SmB}_6\text{Mn}_2\text{O}_6$, *J. Phys. Soc. Jpn.* 82, 043702 (2013).

(二次電池正極材料系)

[5] T. Oguchi, H. Momida, First-Principles Study of X-ray Absorption Spectra of FeS_2 , *J. Phys. Soc. Jpn.* 82, 065004 (2013).