

## 第一原理電子状態計算による固体物性・材料機能の予測

First-principles prediction for material property and functionality

研究分野  
Departmentナノ機能予測  
Theoretical Nanotechnology研究者  
Researcher白井光雲 粉田浩義  
K. Shirai 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固体物性の理論解析・予測  
Theoretical analysis and prediction for material properties

研究開発段階

基礎

実用化準備

応用化

## 背景

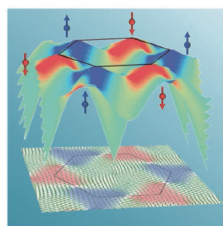
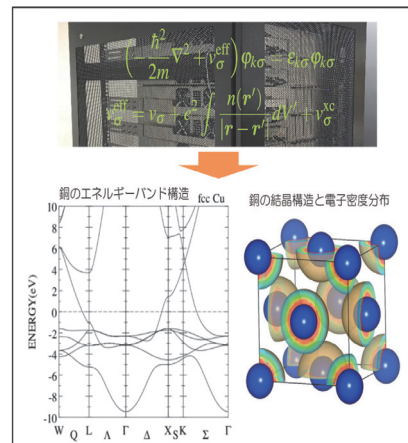
新奇な固体物性の解明や新材料の研究開発においては、電子・原子レベルの理論シミュレーション解析が必要とされます。

## 概要・特徴

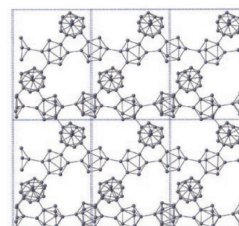
計算機を用いて密度汎関数理論に基づくコーン・シャムール電子方程式を解くことにより、物質の電子状態（電子のエネルギーバンド構造・状態密度）を得ることが可能です。

## 技術内容

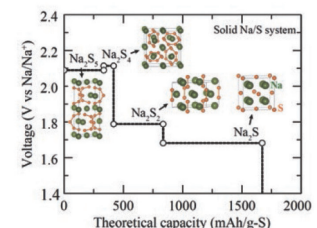
非経験的・量子論的シミュレーション手法である第一原理電子状態計算に基づき、種々の固体系・表面系で発現する物性・機能を理論的に予測する研究を行っています。発現機構を電子状態の特異性から明らかにすることによって、新たな物質を設計する研究にも展開しています。また、第一原理計算に必要な基礎理論や計算手法の開発にも取り組んでいます。



スピン・電荷・軌道の秩序に起因する強誘電性・マルチフェロイック物性の理論研究



フラストレーションを起こす単体半導体



ナトリウム二次電池の充放電機構

## 社会への影響・期待される効果

次世代エレクトロニクス・スピントロニクス材料（マルチフェロイック物質やトポロジカル物質など）やエネルギー材料（リチウムイオン・ナトリウムイオン二次電池電極など）などの材料特性解析・基礎物性研究を進めています。様々な物質・材料への応用展開が可能な計算手法です。

## 【論文 Paper】

- [1] Phys. Rev. Lett. 115, 037602 (2015). [4] Phys. Rev. B 100, 195137 (2019).  
[2] Phys. Rev. B 97, 035113 (2018). [5] Electrochimica Acta 330, 135286 (2020).  
[3] Nano Lett. 18, 3235 (2018). [6] Nature Commun. 11, 159 (2020).