

# 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

南谷英美  
E. Minamitani

**キーワード**  
Keyword

第一原理計算、表面界面、層状物質、磁性  
first-principles calculation, machine-learning

**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

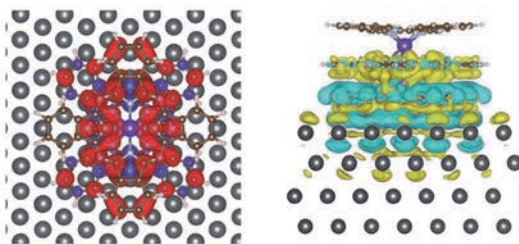
新奇的な固体物性の解明のために原子スケールでのシミュレーションを行っています。

## 概要・特徴

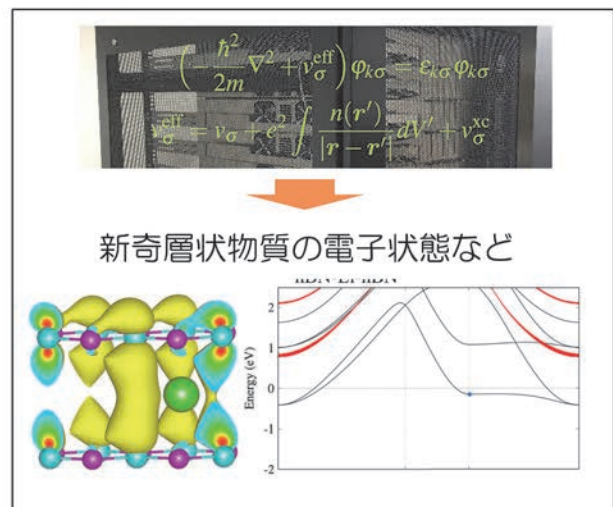
計算機を用いて密度汎関数理論に基づくコーン・シャム電子方程式を解くことにより、物質の電子状態や格子振動の情報（電子・フォノンのエネルギーバンド構造・状態密度）を得ることが可能です。

## 技術内容

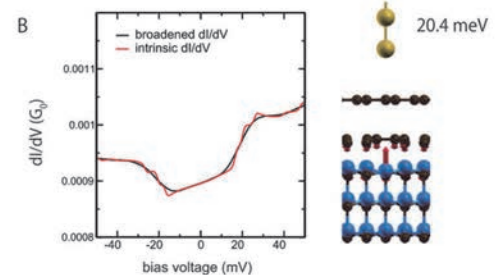
非経験的・量子論的シミュレーション手法である第一原理電子状態計算に基づき、種々の固体系・表面系で発現する物性・機能を理論的に予測する研究を行っています。ナノ構造、物質機能、電子状態の相関を解明することで、新たな機能性物質を設計する研究にも展開しています。



磁性錯体分子と金属表面の相互作用



新奇層状物質の電子状態など



グラフェン/SiC 界面フォノンの解明

## 社会への影響・期待される効果

次世代エレクトロニクス材料（グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイド層状物質など）などの材料特性解析・基礎物性研究を進めています。電子状態以外にも、格子振動やそれが運ぶ熱についての研究も行っています。

## 【論文 Paper】

- [1] Phys. Rev. B. 96, 155431 (2017).
- [2] Nat. Commun. 8, 16012 (2017).
- [3] Appl. Phys. Express. 10, 093101 (2017).
- [4] Nanoscale. Adv. 2, 3150(2020).
- [5] J. Phys. Chem. C 123, 2008 (2020).
- [6] Nature Commun. 13, 6388 (2022).