

# 量子シミュレーション手法の開発と マテリアルデザインへの応用



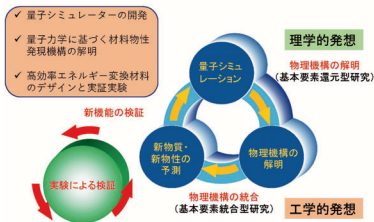
**キーワード** 第一原理計算、計算機マテリアルデザイン、  
高効率エネルギー変換材料、マテリアルズインフォマティクス

佐藤 和則 SATO Kazunori

マテリアル生産科学専攻 准教授  
材料エネルギー工学講座 計算材料設計学領域



## ここがポイント!【研究内容】



- 電子の励起状態に関わる様々な物理現象（磁性、相変態、電気・熱・スピン伝導現象など）を、固体電子論に基づき表現する量子シミュレーション手法の開発
- 量子シミュレーションの知見を利用した多階層連結物性シミュレーターの開発
- 高効率エネルギー変換材料（太陽電池材料、発光材料、熱電材料、磁気冷凍材料など）、省エネルギー関連材料（スピントロニクス材料、超伝導材料など）、構造材料（高強度材料、形状記憶材料など）のシミュレーションと、統計的学習による材料探索ガイドラインの提供

応用分野	材料分野、エネルギー分野
論文・解説等	[1] G. Hayashi <i>et al.</i> , <i>Sci. Technol. Adv. Mat.: Methods</i> 2, 381 (2022). [2] H. N. Nam <i>et al.</i> , <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 23, 9773 (2021). [3] H. Okumura <i>et al.</i> , <i>J. Phys. Soc. Jpn.</i> 89, 034704 (2020).
連絡先 URL	<a href="https://mat-cmd.sakura.ne.jp/wp/">https://mat-cmd.sakura.ne.jp/wp/</a>

