

計算材料科学と情報科学による 微視的原子配列と物性相関の解明



キーワード 第一原理計算、分子動力学法、ナノ構造、欠陥制御

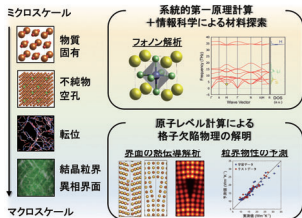
藤井 進 FUJII Susumu

マテリアル生産科学専攻 助教

材料物性学講座 量子材料物性学領域 吉矢研究室



ここがポイント!【研究内容】



- 材料の性質は、物質固有の特性のみならず、意図的・自発的に導入される様々なスケールの格子欠陥（不純物や界面など）に著しく影響される。
- 第一原理計算や分子動力学法などの電子・原子レベル計算手法を用いることで、新物質探索や格子欠陥の物性解析を系統的に実施。
- 情報科学も併用し、物質・欠陥の微視的原子配列と物性の相関関係を解明。
- 確立した手法を主に熱電変換材料や燃料電池などのエネルギー材料に適用し、ナノスケールからマクロスケールまで緻密に設計した新しい機能性材料の開発を目指している。

応用分野	エネルギー分野、電子デバイス分野
論文・解説等	[1] S. Gao, T. Broux, S. Fujii et al., <i>Nature Communications</i> , 12, 201 (2021) [2] S. Fujii et al., <i>Nature Communications</i> , 11, 1854 (2020) [3] S. Fujii et al., <i>Acta Materialia</i> , 171, 154-162 (2019)
連絡先 URL	http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/msp8/

