

高精度電子状態計算手法の開発と 表面・界面系への応用

#表面科学

#電気化学

#電子状態理論

#原子論的シミュレーション

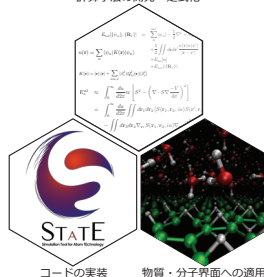
研究
内容

物質と分子の界面はエネルギー変換デバイス、不均一触媒、電気化学触媒などで中心的な役割を果たし、界面の構造と電子状態、および界面における化学反応の微視的機構を理解することが新規高効率デバイスや触媒を開発する上で極めて重要となります。我々は経験的パラメータを用いない電子状態理論に基づいた第一原理計算手法と独自の計算コードの開発、そしてコミュニティコードの開発への貢献を行っています。それらを元に高精度・大規模計算を実行し、界面構造と電子状態、不均一触媒反応、電気化学反応の素過程の解明を進めています。

Develop+
応用分野

材料科学、触媒化学

計算手法の開発・定式化



濱田 幾太郎 HAMADA Ikutaro

物理学専攻 准教授

精密工学講座 計算物理領域 森川研究室

論文・解説など

- [1] I. Hamada, *Phys. Rev. B* 89, 121103 (2014).
- [2] K. Rojas *et al.*, *Commun. Mater.* 2, 81 (2021).
- [3] <https://scholar.google.com/citations?user=q5qggtwAAAAJ&hl=en>

連絡先HP



元素戦略・分子デザイン工学