

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

#第一原理計算

#計算機マテリアルデザイン

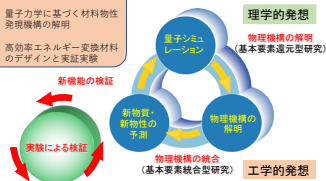
#高効率エネルギー変換材料

#マテリアルズインフォマティクス

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

- ✓ 量子シミュレーターの開発
- ✓ 量子力学に基づく材料物性発現機構の解明
- ✓ 高効率エネルギー変換材料のデザインと実証実験



Develop+

応用分野

材料分野、エネルギー分野



佐藤 和則 SATO Kazunori

マテリアル生産科学専攻 准教授

材料エネルギー理工学講座 計算材料設計学領域



論文・解説など

- [1] H. Saito *et al.*, *Phys. Rev. B* 108, 035141 (2023).
- [2] G. Hayashi *et al.*, *Sci. Technol. Adv. Mat.: Methods* 2, 381 (2022).
- [3] H. N. Nam *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23, 9773 (2021).

連絡先HP

