



理論物質設計のための非経験的計算手法の開発と応用

Development and application of nonempirical computational methods for materials design

【第一原理物質設計手法の開発】

物質に圧力や電場、磁場を加えたり、あるいは温度や化学組成に変化を加えたりすると、その物質に様々な変化が生じます。結晶構造に歪みが生じたり、トポロジカルに非自明な電子状態が実現したり、複雑な磁気構造があらわれたり、超伝導転移が起きたりするといった現象はその典型例です。こういった物質の結晶構造、電子構造、磁気構造の変化を第一原理的に、正確かつ効率的に計算する手法の開発を行っています。実験を参照せず、完全非経験的に物質の性質を予測する計算手法を確立することによってその背後にある指導原理の解明を行い、新しい物性物理学の開拓を目指します。

【機能物質の探索と設計】

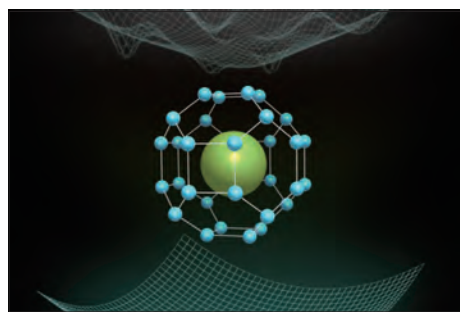
第一原理計算手法を駆使し、様々な機能物質の探索と設計に取り組んでいます。超伝導体については、近年の高圧下水素化物における高温超伝導の発見を受け、より低圧でより高い超伝導転移温度を持つ物質の探索と設計に挑戦しています。磁性体については、与えられた結晶構造からそこで実現する磁気構造を正確に予測する枠組みを構築しています。さらに強磁性体並みに大きな異常ホール効果や異常ネルンスト効果などを示し、スピントロニクスなどの応用に使える反強磁性体の探索も行なっています。トポロジカル物質については、大規模な結晶構造予測計算と組み合わせる磁性エレクトロイドなど新しい物質の設計を行なっています。また、トポロジカル表面の電子状態を使った高効率水素発生反応などの研究も進めています。

【Development of ab initio Materials Design Methods】

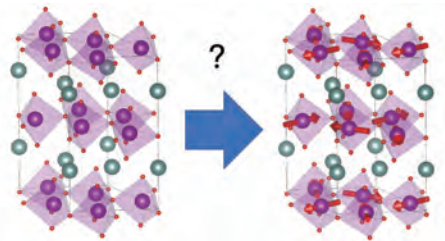
The application of pressure, electric or magnetic fields, or changes in temperature or chemical composition causes various changes in materials, such as distortion of the crystal structure, realization of topologically non-trivial electronic states, emergence of complex magnetic structures, and superconducting transitions. We are developing ab initio methods to calculate such changes accurately and efficiently in crystal, electronic, and magnetic structures. By establishing a computational method that predicts the properties of matter in a completely non-empirical manner without referring to experiments, we aim to elucidate the guiding principles behind these predictions and explore a new frontier of condensed matter physics.

【Exploration and Design of Functional Materials】

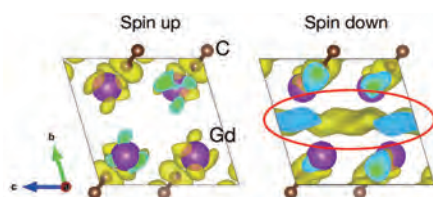
We are working on the search and design of various functional materials based on first-principles calculation. For superconductors, following the recent discovery of high-temperature superconductivity in hydrides under high pressure, we are challenging to search for and design materials with a higher superconducting transition temperature at lower pressure. For magnetic materials, we are constructing a framework to accurately predict the magnetic structure from a given crystal structure. We are also searching for antiferromagnets that exhibit anomalous Hall effect and anomalous Nernst effect as large as ferromagnets and can be used for spintronics and other applications. For topological materials, we are designing new materials such as magnetic electrides in combination with large-scale crystal structure prediction calculations. We are also studying efficient hydrogen evolution reactions using the electronic state of topological surfaces.



1 高圧下水素化物超伝導体の構造予測
Crystal structure prediction for superconducting hydrides under high pressure



2 与えられた結晶構造に対する磁気構造予測
Magnetic structure prediction for a given crystal structure



3 磁性エレクトロイドの理論物質設計
Theoretical materials design of magnetic electrides



教授
有田 亮太郎
Ryotaro ARITA, Professor
専門分野：物性理論
Specialized field : Condensed matter theory
E-mail :
ryotaroarita@g.ecc.u-tokyo.ac.jp



講師
野本 拓也
Takuya NOMOTO, Lecturer
専門分野：物性理論
Specialized field : Condensed matter theory
E-mail :
nomoto@ap.t.u-tokyo.ac.jp