

第一原理計算を活用した新物質開拓

Keyword : 第一原理計算、未開拓物質群、熱電輸送特性、エピタキシャル薄膜

研究の背景

環境・エネルギー問題が顕在化している現在、これらの問題解決に貢献する物質・材料研究が求められています。エネルギー材料の創製を目指した新物質開拓を、第一原理計算を用いた「物質設計・物質選定」と、エピタキシャル薄膜合成技術を組み合わせて、効率良く行います。合成候補物質を第一原理計算を用いて抽出・選定し、実際に候補物質の合成・物性評価を行うことで、第一原理計算を利用した「物質設計・物質選定」の優位性を示します。特にこの研究では、物性が未解明な「未開拓物質群」に着目し、未開拓物質群の新物質開拓を行います。

研究の狙い

本研究では、エネルギー材料の中でも、特に熱電変換機能に着目し、「未開拓物質群」の中に潜む、優れた熱電変換機能を示す物質の開拓を目指します。また、熱電変換機能に加えて、新規物性・機能の開拓も併せて行います。

最先端研究トピックス

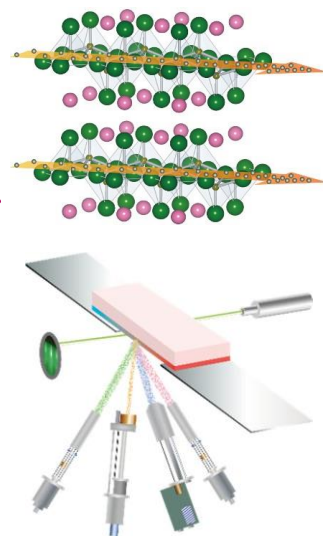
第一原理計算による未開拓物質の物性予測



スクリーニング
物質選定



新物質合成



文献

- I. Ohkubo and T. Mori, *Chem. Mater.* **26**, 2532 (2014).
- I. Ohkubo and T. Mori, *Inorg. Chem.* **53**, 8979 (2014).
- I. Ohkubo and T. Mori, *Chem. Mater.* **27**, 7265 (2015).

まとめ

- 第一原理計算を用いた「未開拓物質群」の物性予測と熱電変換機能の開拓
- 第一原理計算を用いた合成候補物質の選定
- 選定された候補物質のエピタキシャル薄膜化手法を用いた物質合成

実用化の目標

- 第一原理計算を用いた合成候補物質の選定手法の確立
- 「未開拓物質群」の中から、実用的な新物質を含む新たな物質群の発見
- エピタキシャル薄膜化手法を用いた新物質合成とプロセス開発



ナノパワー分野 熱エネルギー変換材料グループ

大久保 勇男

E-mail: OHKUBO.Isao@nims.go.jp

URL: http://samurai.nims.go.jp/OHKUBO_Isao-j.html