

第一原理的手法による電子構造解析

Keywords: 第一原理計算、電子物性

ナノセオリー分野 ナノ計算材料科学グループ

新井 正男

ARAI.Masao@nims.go.jp | https://samurai.nims.go.jp/profiles/arai_masao



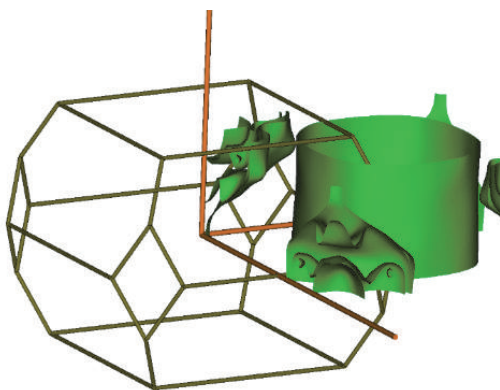
研究の背景 計算機によって物質の特性を予測することができれば、新規材料の開発に有用な方法となる。物性物理学における様々な理論研究の成果を、具体的な物質群へ適用する研究が必要とされている。

研究の狙い 非経験的手法による電子構造計算は広く利用されているが、得られた電子構造から物質の物性を予測するためには、多様な理論と組み合わせる必要が生じるため、様々な課題が残されている。

最先端研究トピックス

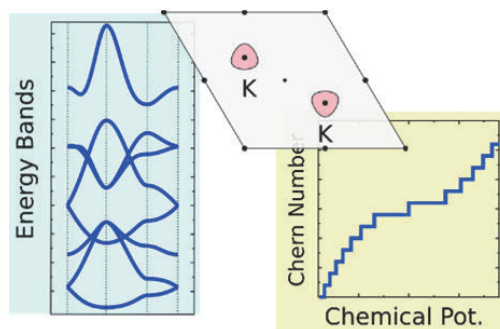
(1) 第一原理的手法による電子構造解析

NIMSで発見された「反転対称性のない超伝導体」 SrAuSi_3 について、第一原理的手法による電子構造計算から、スピン軌道相互作用の与える影響を解析した。



(2) 電子物性評価の例

強結合(タイトバインディング)近似を用いて磁場中の電子構造を求め、グラフェンの量子化されたホール伝導度(チャーン数)を定量的に評価した。



文献 ・ M. Arai, Y. Hatsugai, Phys. Rev. B 79, 075429 (2009)
 ・ M. Isobe, M. Arai, and N. Shirakawa, Phys. Rev. B 93, 054519 (2016)

まとめ

- 第一原理的手法による電子構造解析
- 電子構造データを用いた電子物性評価

実用化への目標

- 計算手法の汎用化
- 計算プログラムの公開