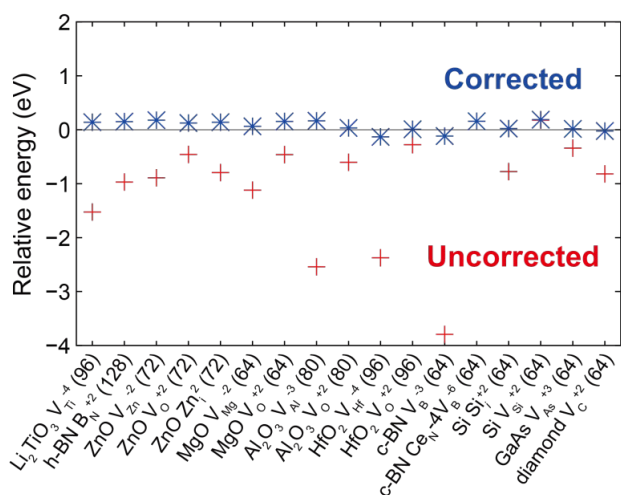


# 計算科学を駆使した電子・エネルギー材料の設計・探索

Design and exploration of electronic and energy materials based on computational science

昨今の計算科学の進展とスーパーコンピュータの演算能力の向上は目覚ましく、量子力学に基づく第一原理計算から既知の材料を原子・電子レベルで深く理解するだけでなく、全く新しい材料の存在やその性質を高い信頼性で予測することも可能になってきました。当研究室では、このような「計算材料科学」に立脚して材料を探究するとともに、これまでにない高機能材料を見出すことを目指しています。卓越した機能だけでなく、安価で高い環境親和性を有することなど、材料開発に対するニーズはますます厳しくなっています。このやりがいのある課題に最先端の計算材料科学を駆使して取り組んでいます。電子デバイスや太陽電池などに使われる電子材料やエネルギー材料を対象に、幅広く研究を展開しています。

With remarkable developments in computational science and the performance of supercomputers, first-principles calculations now allow us to better understand materials on the atomistic and electronic levels. Furthermore, accurate predictions can be made on the formation of as-yet-unknown materials and their potential functionalities. We utilize cutting edge computational science to discover novel materials with outstanding properties, while also prioritizing cost, environmental friendliness, and elemental abundance. Our research targets include a wide variety of electronic and energy materials for applications such as electronic devices and photovoltaic cells.

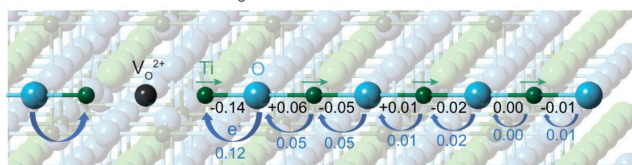


有限サイズの計算モデルを用いることに起因する様々な物質中の欠陥形成エネルギーの誤差。我々が開発した補正手法により、高精度に点欠陥形成エネルギーを計算することが可能となります。本手法は、汎用的点欠陥計算手法として世界中で用いられるようになってきています。

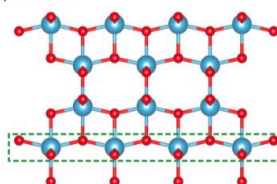
(Phys. Rev. B., 2014)

Errors of the defect formation energies in various materials caused by utilizing finite-size supercells. One can see, when using our correction methods, the formation energies are accurately calculated. This method is now recognized by other researches as a versatile correction method.

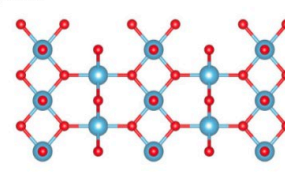
(e) Atomic structure around  $V_{O}^{2+}$  in STO (2560 atoms)



(a) anatase



(b) rutile



第一原理計算により予測されたチタン酸ストロンチウム中の一次元的に広がった酸素空孔状態。この特異な状態は、大きなボレン有効電荷と1次元鎖の結晶構造を持つ場合に発現することがわかりました。この発見は、例えば同じ酸化チタンにおいても、ルチル型構造とアナターゼ型構造で異なる点欠陥特性を発現する理由を説明することができます。(Phys. Rev. B., 2018)

One-dimensionally extended oxygen vacancy state in strontium titanate predicted by first-principles calculations. Such extended state is found to emerge when a material has large Born effective charges and one-dimensional structural feature. Our finding also explains the reason why the oxygen vacancy shows shallow states in anatase  $TiO_2$  but deep ones in rutile counterpart.