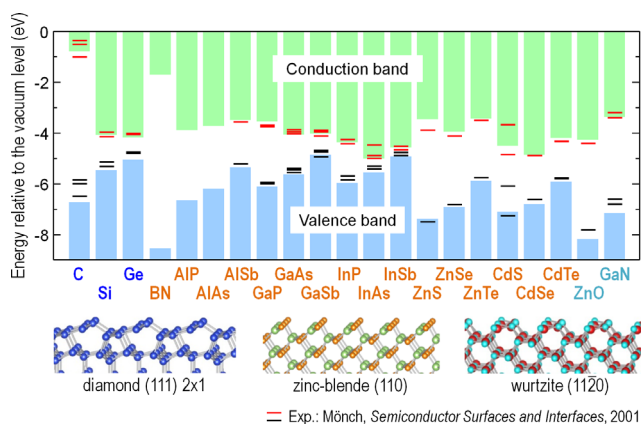


計算科学を駆使した電子・エネルギー材料の設計・探索

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

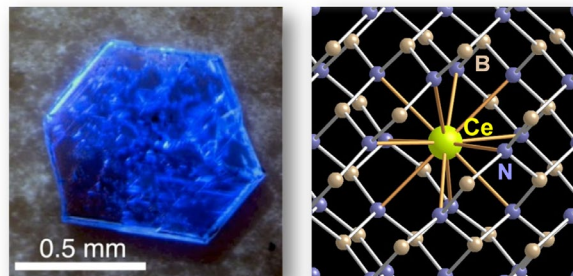
昨今の計算科学の進展とスーパーコンピュータの演算能力の向上は目覚ましく、量子力学に基づく第一原理計算から既知の材料を原子・電子レベルで深く理解するだけでなく、全く新しい材料の存在やその性質を高い信頼性で予測することも可能になってきました。当研究室では、このような「計算材料科学」に立脚して材料を探究するとともに、これまでにない高機能材料を見出すことを目指しています。卓越した機能だけでなく、安価で高い環境親和性を有することなど、材料開発に対するニーズはますます厳しくなっています。このやりがいのある課題に最先端の計算材料科学を駆使して取り組んでいます。電子デバイスや太陽電池などに使われる電子材料やエ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



半導体表面のバンドアライメント。高精度な第一原理計算によりバンド位置の実験値がよく再現されています。この計算手法を使えば、実験値が報告されていない物質についても信頼性の高い理論予測が可能と言えます。(Phys. Rev. Lett., 2014)

Band alignment of semiconductors at their surfaces. Experimental band positions are well reproduced by accurate first-principles calculations, implying that reliable theoretical predictions can be made for experimentally as-yet-uncharacterized materials as well as known materials.



セリウム添加窒化ホウ素単結晶における青色発光中心。結晶のカソードルミネッセンス像(左)と第一原理計算により予測されたセリウム複合点欠陥の局所構造(右)。セリウムが複数のボロン空孔を伴う特殊な欠陥構造をとることでホウ素や窒素との巨大なサイズミスマッチが緩和され、セリウムが結晶内に取り込まれることが解明されました。(Phys. Rev. Lett., 2013)

Blue luminous centers in a Ce-doped BN single crystal: A cathodoluminescence image (left) and the local structure of a Ce impurity-B vacancy complex predicted using first-principles calculations (right). Ce impurities have a huge size mismatch with the host B and N atoms. Nevertheless, they can be incorporated into the BN crystal via forming the defect complex involving a Ce impurity and four B vacancies and thereby compensating the mismatch.