

強相関電子材料のための量子シミュレーションによる物質設計法の開発

理学研究科 物質科学専攻 草部 浩一

キーワード

強相関電子系、高温超伝導、磁性、弾性、密度汎関数法、マテリアルズ・インフォマティクス

研究概要

関数空間論と量子統計力学を活用して、従来の密度汎関数理論を格段に進展させた厳密解への収束判定技術を備える多配置参照密度汎関数理論を構築しています。この応用数学分野では、計算科学における進化アルゴリズム、機械学習等のAI技術を援用することで、強相関効果評価や反応プロセス設計の効率化を進めています。設計評価事例として、ファンデルワールス層状物質における高精度弾性評価実験とのシミュレーションデータの直接比較[1]、未合成の銅酸化物高温超伝導体における転移温度上昇の理論提案[2]、などを進めています。物質設計を通して、社会的課題解決への貢献を狙う研究を行います。

アピールポイント

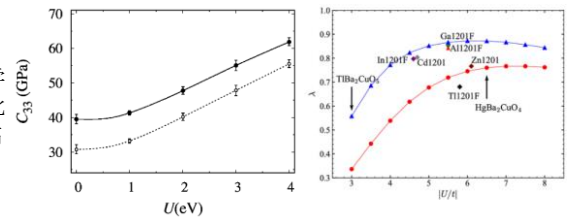
企業ご担当者様などに向けて、ファンデルワールス補正や強相関効果(+U)の実際のな活用法など、情報提供を行っております。

[1] K. Kusakabe, et al., Phys. Rev. Materials 4, 043603 (2020). [2] S. Teranishi, et al., J. Phys. Soc. Jpn., 90, 054705 (2021).

バナッハ空間中のモデル収束判定法を含む基礎技術については、特許第4918683号, 第5447674号, US patent No. 9,262,591も参照下さい。

応用分野

強相関電子材料の物質設計や、原子層物質による電子デバイス設計を進めています。強相関効果は典型的に磁気モーメント発生として現れます。スピンエレクトロニクス素子、交差相関素子、量子情報素子の設計例を提供しています。弾性特性すらも強相関効果によって変わります。



黒鉛の強相関パラメータ(U)と弾性定数[1]. $U \sim 2.1$ [eV]で実測に近い数値を与える。

1層系銅酸化物の候補物質が示す物質パラメータ[2]. λ が大きいとき T_c も大きい。