

## テーマ No. 5

### 「第一原理計算を利用した新物質・新機能材料の理論設計」

白井・阿部（和）研究室

#### 概要：

コンピュータ上の仮想実験室で行なわれる第一原理計算に基づく物質設計は、低環境負荷でかつ効率よく新物質探索や新機能デバイス開発を行うことができるため重要視されている分野である。本研修では、電子の有する電荷とスピンの自由度を同時に利用して新機能デバイスの実現を目指すスピントロニクス材料や、電気と熱の相互変換を可能とする熱電変換材料を対象として新物質や新機能材料の理論設計を行う。

研修前半では第一原理計算の原理および計算機シミュレーション手法の習得を行う。後半では下記の研修項目から希望のテーマを一つ選び、本格的な研修に取り組む。

#### 【研修項目】

1. 高磁気異方性材料の理論設計
2. 高温強磁性半導体の理論設計
3. 高効率熱電変換材料の理論設計

担当者：新屋ひかり、白井正文