

# 第一原理的手法による電子構造解析

Keyword : 第一原理計算、電子物性

## 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。

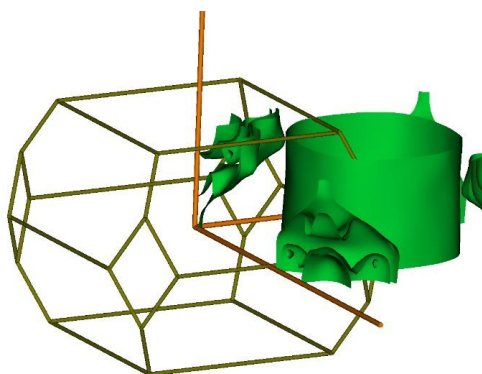
## 研究の狙い

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

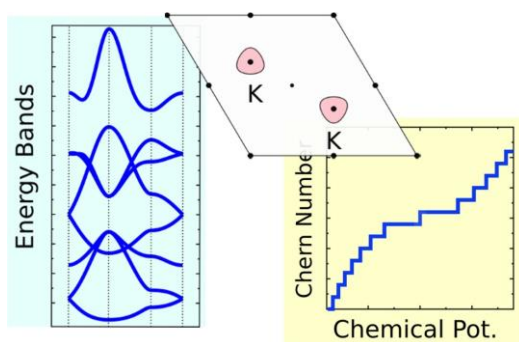
### (1) 第一原理的手法による電子構造解析

NIMSで発見された「反転対称性のない超伝導体」 $\text{SrAuSi}_3$ 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

## 実用化の目標

- 計算手法の汎用化
- プログラムコードの開発と公開



ナノセオリー分野 材料特性理論グループ

新井 正男

E-mail: ARAI.Masao@nims.go.jp