

計算機による物質設計

展示番号23 1号館 特別展示 (物理)

電気通信研究所 物性機能設計研究分野

教授：白井正文、准教授：阿部和多加、助教：辻川雅人、新屋ひかり

物質中の多電子系の状態を、量子力学の基礎法則から求める計算手法を、第一原理計算と呼びます。



基礎方程式

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$$

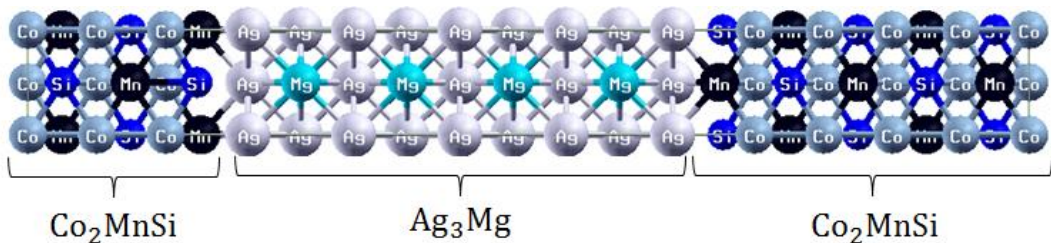
$$\Downarrow$$
$$E_v[n] = F[n] + \int d\vec{r} v(\vec{r})n(\vec{r})$$

$$\Downarrow$$
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \int d\vec{r}' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} + v(\vec{r}) + v_{xc}(\vec{r}, [n]) \right] \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r})$$

実験情報に頼らない計算手法であるため、新物質設計などに適した手法です。

私たちは第一原理計算を用いることにより、電子の電荷とスピ
ンが絡む新たなエレクトロニクス(スピントロニクス)分野で、新材
料の提案を試みています。

磁気抵抗素子の材料設計



電子の透過率

