

# 理論インフォーマルセミナー

日時: 2018年5月31日(木) 午後1時~2時30分

場所: 物性研究所本館 6階 A615号室

講師: **小川貴史 氏**  
(所属) (ファインセラミックスセンター)

題目: 第一原理計算を用いた点欠陥、粒界など種々欠陥の原子・電子構造解析

要旨:

材料に付随する種々様々な欠陥がもたらす物性を制御するには、その原子構造・電子状態を把握し、起こっている現象に潜むメカニズムを理解し、それを元に制御指針を探るステップが必要となる。近年、計算機性能の向上に加え、計算手法についても様々発展してきており、第一原理計算を用いた欠陥解析の有効性は高くなってきているが、「どのような解析が有効か」、「実験とどのように連携するか」という点については注目する現象・対象に依るところも大きく、まだ不確実な部分が多い。本発表では、高温構造材料であるアルミナの粒界イオン拡散に関連する解析や、半導体やイオン伝導体における荷電キャリアの熱平衡欠陥状態に関する解析を中心として、我々の最近の試みと成果を紹介する。

講師: **桑原彰秀 氏**  
(所属) (ファインセラミックスセンター)

題目: 第一原理計算によるエネルギーデバイスの材料設計

要旨:

近年のエネルギー情勢の変化に伴い、その高効率利用と低環境負荷を実現可能とする革新的なエネルギーデバイスの創出が求められている。第一原理計算は与えられた原子配置のもとで、対象とする物質の電子系のエネルギー状態や諸物性に関する定量的な情報を得ることができる計算手法であり、物性発現メカニズムの解明に有効であり、材料設計の指針を得ることもできる。本講演では、第一原理計算を用いたエネルギーデバイスの研究事例として、プロトン伝導性酸化物燃料電池材料における欠陥形成挙動の解明、リチウムイオン2次電池におけるイオンダイナミクスの第一原理計算等の内容に関して紹介する。

世話人: 笠松 秀輔 (ext. 63291)  
e-mail: kasamatsu@issp.u-tokyo.ac.jp