

# 第一原理計算を用いた物質内の電子状態及び物性解析手法の高精度化に関する研究

■ 情報工学部 情報システム工学科 准教授 丸山 勲

○ 研究分野：情報工学

○ キーワード：第一原理計算、密度汎関数法

## I 研究概要

### ～従来の計算法を高精度化～

量子場の理論から導かれる密度汎関数法

任意の物質に適用される収束判定を備えた計算法を定めると「多配置参照型」の密度汎関数理論に至る。

基礎理論：モデル空間の理論

収束する電子状態計算は、密度が一定の条件のもとでアップコンバージョンモデルがクーロン多体系に向かって漸近するとき、「モデル空間」において、同一相に至っていることが保障される。<sup>[1]</sup>

[1] K. Kusakabe, I. Maruyama, J. Phys. A: Math. Theor. **44** (2011) 135305.

アップコンバージョンモデル：super process を与える

$$\left( H^1 + P_A V_{ee} P_A + H_{C,counter}^1 + P_A V_{ee} (1 - P_A) \frac{1}{H^1 + H_{C,counter}^1 - E} (1 - P_A) V_{ee} P_A \right) |\Psi_A\rangle = E |\Psi_A\rangle.$$

遷移金属酸化物の機能、  
動力学及び電子相関も設計可能

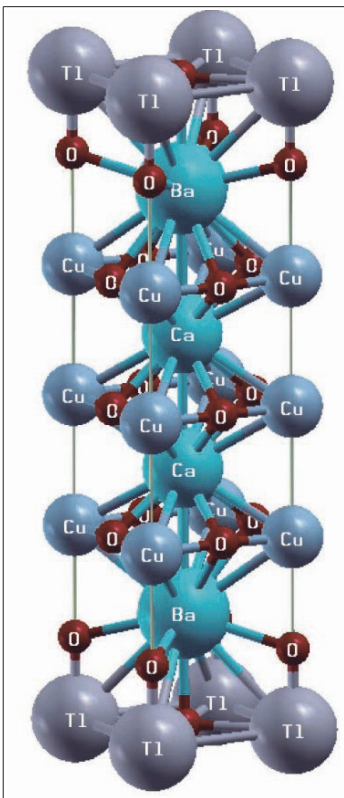


物質設計としての物質解と設計法

A space + complement



MR-DFT in A space



## I 利点特徴

- ・密度汎関数法の応用により、物質の原子・分子組成及び構造からその特徴を解析
- ・遷移金属酸化物の機能、動力学及び電子相関も設計可能

## I 応用分野

新規材料の設計、コンピュータによる物質特性予測

## I 特許

・国際公開WO2018043634、特許第6729883号、US11072524  
「自己触媒能を有する炭素系水素貯蔵材料、その製造方法、その化合物を用いる水素の吸蔵方法及び水素の放出方法、及び水素吸蔵用デバイス」



SUSTAINABLE  
DEVELOPMENT  
GOALS