

表面界面物性研究室

教員：大谷実、萩原聡

URL：<https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/public/otani/>

連絡先：otani@ccs.tsukuba.ac.jp

概要

我々の研究室では、第一原理電子状態計算を用いて物質の表面・界面のシミュレーションを行なっています。

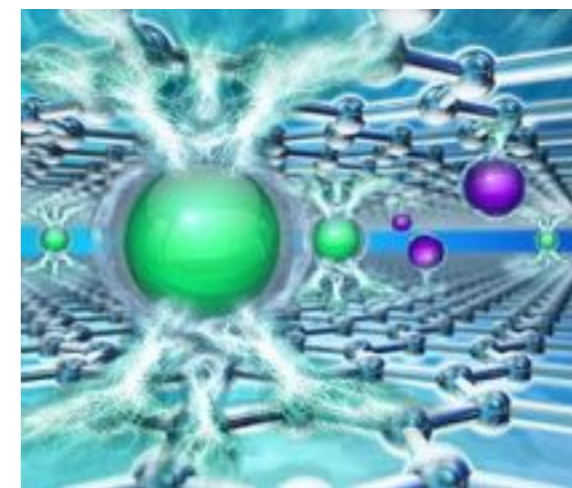
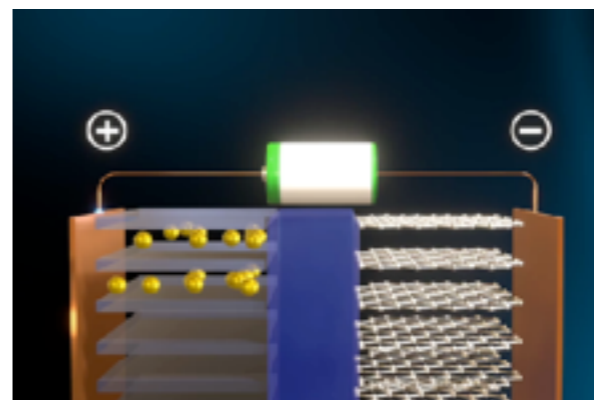
私たちが日々使っている、コンピュータや携帯電話を制御するための半導体デバイス、それらを駆動するためのエネルギー源となる蓄電池・燃料電池で用いられるエネルギー関連デバイスなどがあります。

これらの道具を高機能化・長寿命化するためには物質科学的な知見が必要となります。

表面・界面で生じる機能には、デバイスにとって有利にはたらく機能（触媒作用、保護膜形成など）もあれば不利にはたらく機能（腐食、表面被毒など）もあります。しかし、表面・界面における微視的な物理現象を直接観測して何が起きているかを知ることは容易ではありません。したがって、より良いデバイスの設計・開発のためには、信頼性の高い微視的理論に基づいた研究が欠かせません。そこで私たちの研究室では、第一原理電子状態計算に基づく独自の物性シミュレーション手法を活用して物質表面・界面で起こる物理現象を理論的に解明する研究を行なっています。

蓄電デバイスのシミュレーション

我々はミクロなスケールか蓄電デバイス内で起こる化学反応のシミュレーションを実行し、反応のメカニズムなどを量子力学の立場から明らかにしています。計算結果はデバイス設計や材料開発に利用され、デバイスの性能向上に役立ちます。



理論・プログラム開発

高精度なシミュレーションを実施するためには、常に新しい理論開発やプログラム開発も重要となります。我々の研究室では、最先端の方法論を用いた研究が行えるように、新しい理論開発やそれらを組み込むための独自のプログラム開発を精力的に行なっています。