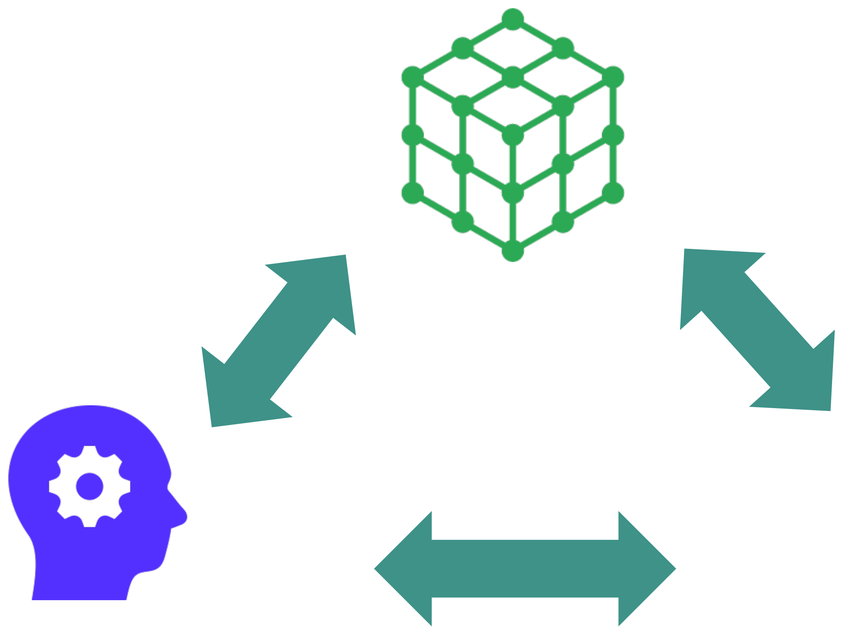
計算材料科学研究室

山下　智樹

研究内容

計算科学による物性物理，材料科学

物質探索・設計



物理機構解明　　物性予測

半導体，磁性体，二次電池材料，
スピントロニクス材料，etc

研究手法・設備

第一原理計算

マテリアルズ
インフォマティクス

CrySPY

結晶構造探索

ミーティング
スペース

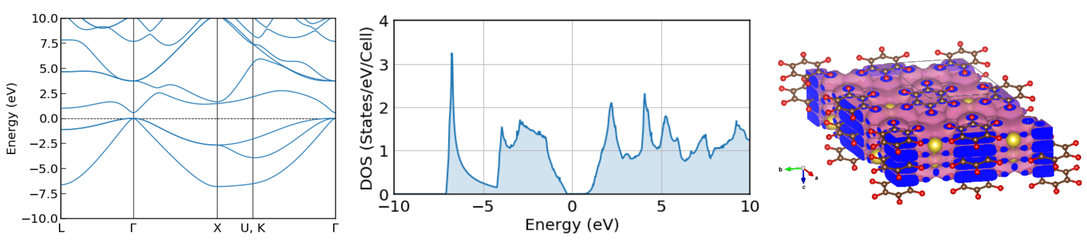
計算機
クラスター

第一原理計算

密度汎関数理論による電子状態計算

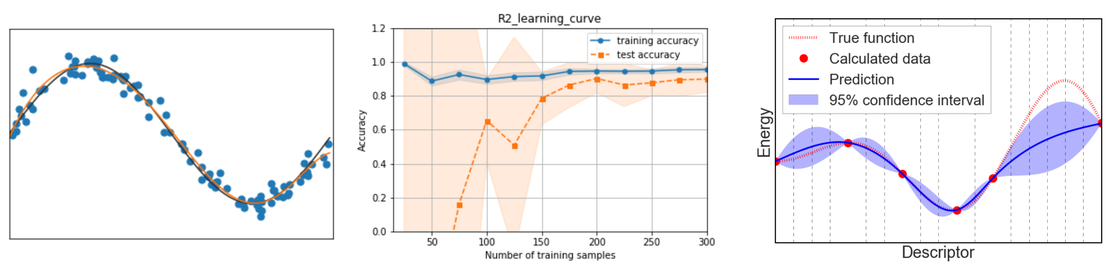
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v_{\mathrm{eff}}(\mathbf{r})\right]\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r})$$

$$v_{\mathrm{eff}}(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) + e^2\int\frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d\mathbf{r}' + \frac{\delta E_{\mathrm{xc}}}{\delta\rho(\mathbf{r})}$$



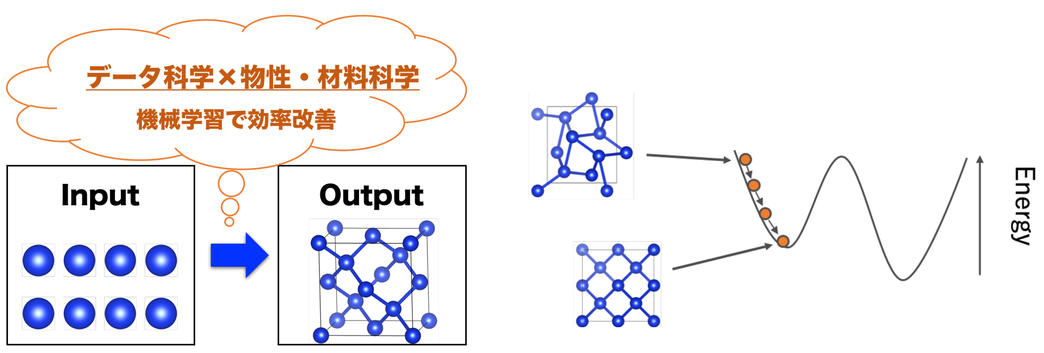
マテリアルズ
インフォマティクス

AIや機械学習などの情報科学的手法を
材料科学へ応用



結晶構造探索

- 組成（原子種と個数）から安定構造を予測
- シミュレーションによる新物質探索



ソフトウェア開発　CrySPY

- オープンソース
- 第一原理計算と機械学習による高効率探索

アルゴリズム	機能
☐ ランダムサーチ	☐ 結晶構造の自動生成
☐ 進化的アルゴリズム	☐ 構造最適化の自動計算
☐ ベイズ最適化	☐ 機械学習による高速化
☐ LAQA	