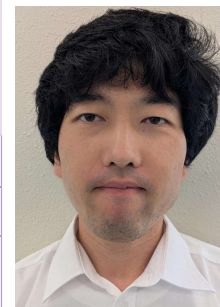


研究タイトル：

不規則系の構造的な研究



氏名： 小林 健太郎 / Kentaro Kobayashi E-mail: k.kobayashi@hakodate-ct.ac.jp

職名： 准教授 学位： 博士(理学)

所属学会・協会： 日本物理学会、応用物理学会

キーワード： 不規則系、複雑系、ガラス・液体、MD シミュレーション、第一原理計算、X 線全散乱

技術相談

提供可能技術：

- ・液体、ガラス、アモルファスなど、「複雑」な物質のミクロな構造の推定
- ・材料の合成条件を変えたときに生じる原子配列の変化の観察
- ・機能性材料の量子化学的理解の探索・提示

研究内容：

液体やガラスなどに代表される、原子の配列が乱れた材料の物性評価には、ランダム性を取り扱う解析が必要であり、結晶性材料とは異なる物性が予測されている。ここ数十年の間で量子化学計算が普及し、原子配置については高精度かつ第一原理的な予測・描述ができるようになってきている。

これまで高温高压の液体およびその他不規則系についてその電気的特性に着目してシミュレーションを行ってきた。また、関連する理論の適用によって、微視的な状態と巨視的な状態をつないだ議論の構成を開発してきた。本研究では、より広い理論を適用することにより、高温の不規則系における物性評価法を提示することを目的としている。

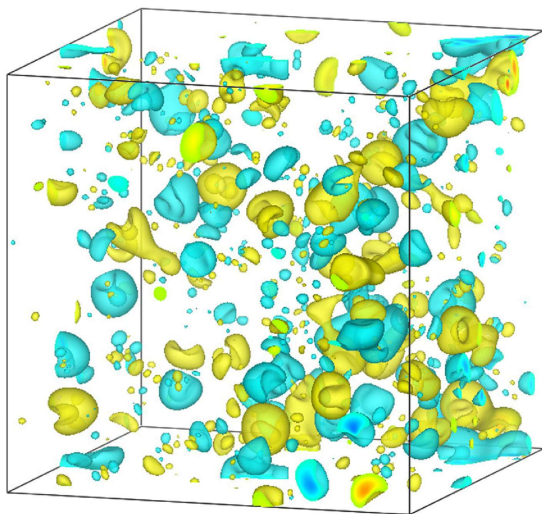


図 シミュレーションによる水銀の電子軌道。(著者ら 2021 年。Reprinted with permission from ©2020 Elsevier B.V.)

提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)	
第一原理分子動力学	cp2k・Lammps など