

第一原理計算に基づく原子層探索

しづみ解明系領域 物理物質科学ユニット
ふりがな おの しょうた

小野 頌太 教授



Phone: (0143) 46-5680 E-mail: shotaono@muroran-it.ac.jp

<https://u.muroran-it.ac.jp/compsci/>

次世代2次元材料を目指して

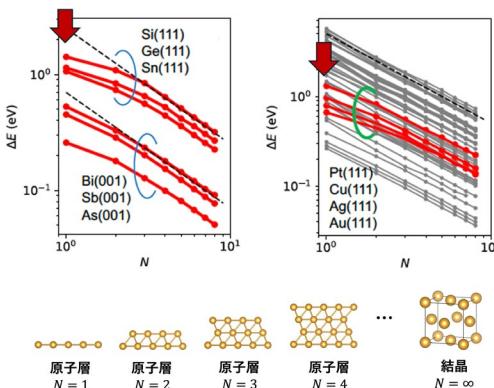
研究の目的

グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイト（MoS₂など）に代表される2次元物質（原子層）は、その低次元物性を活かした様々な応用展開が期待されている。本研究では、第一原理計算に基づき網羅的に2次元物質を予測し、新たな2次元材料を提案することを目的としている。

研究の概要

多くの2次元物質は層状物質の剥離型であり、「van der Waals (vdW)型2次元物質」と呼ばれる。一方、ダイヤモンド構造を持つシリコンや面心立方構造を持つ鉛や金などの非層状物質に対しても原子層が合成されており、「非vdW型2次元物質（非層状物質の原子層）」と呼ばれている。本研究では、非vdW型2次元物質を高精度に予測する「薄膜余剰エネルギー計算法」を世界に先駆けて開発した。非vdW型2次元物質の網羅探索を実行し、グラフェンやMoS₂の性能を超える新たな2次元材料を予測する。

参考：<https://muroran-it.ac.jp/research/info/post-26549/>



研究(開発)のアピールポイント

◆ 研究の新規性、独自性

- ・薄膜余剰エネルギー計算法 (S. Ono, Phys. Rev. B **112**, 075403 (2025))
- ・本計算手法の広範な物質群への適用

◆ 研究に関連した特許の出願、登録状況

◆ 従来研究（技術）と比べての優位性

- ・非vdW型 2 次元物質の予測が可能（従来法ではvdW型 2 次元物質の予測のみ）
- ・計算物質データベースMaterials Projectによると、合成例のある非層状物質は約 5 万種類あり、したがって、多くの非vdW型 2 次元物質が未探索であるのが現状である。

研究(開発)のビジョン・ステージ

◆ 適応分野

第一原理計算

◆ 研究のステージ

基礎研究

◆ 製品化、事業化のイメージ

新たな 2 次元材料の提案

企業等へのご提案・メッセージ

◆ 研究（開発）に関連して、あるいはそれ以外に関われる業務

第一原理計算を用いたナノサイエンス

◆ 利用可能な設備、装置など

◆ 教員からのメッセージ

2 次元物質のほか、バルク結晶、ナノチューブ、表面等も対象として、構造安定性・電子構造・格子物性・磁気物性を調べています。ご興味ありましたらお気軽にお声掛けください。