

ナノデザイン研究室(中村・名和グループ)

中村 浩次 教授 名和 憲嗣 助教

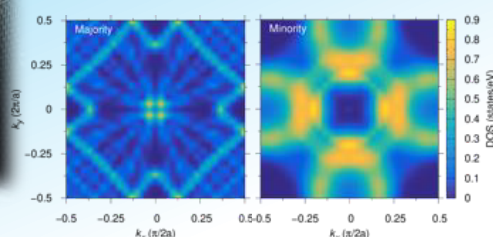
https://www.cc.mie-u.ac.jp/~ndesign-nakamura/magn_index.html

研究室概要: 情報通信・エネルギー・環境技術を支える電子デバイスの物質・材料やその物理的性質を解析・予測するための量子力学的計算手法(第一原理計算手法)とデータ科学に基づく計算機支援材料設計手法のプログラム開発を行っています。

産学連携が可能な研究テーマ: 物質・材料の物理的性質の解析・予測。各種デバイス・センサー等における材料の物性評価と設計のための計算機シミュレーション支援。マテリアルズインフォマティクスによる材料設計支援。



物質・材料の電子構造解析



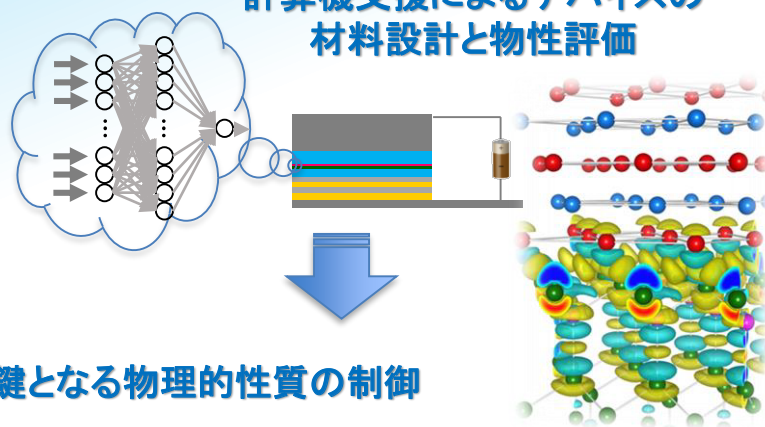
第一原理計算手法

$$[-\nabla^2 + V_{\text{eff}}]\Phi_{i,k} = \varepsilon_{i,k} \Phi_{i,k}$$

マテリアルズインフォマティクス手法

$$\beta = \operatorname{argmin}[|Y - X\beta|^2 + \lambda|\beta|]$$

計算機支援によるデバイスの材料設計と物性評価



鍵となる物理的性質の制御

電氣的性質

磁氣的性質

構造的性質

誘電的性質

光学的性質

教授 中村 浩次

電子材料の物理的性質(電気伝導特性、光学的性質、誘電的性質、磁氣的性質、構造的性質)を予測・解析するための(第一原理)電子構造計算手法の開発、デバイス性能を改善・向上するための薄膜設計や新規材料の提案を行っています。

応用・技術面において、例えば、以下の研究・相談を実施しています。

- 記憶デバイスなど磁気トンネル接合系金属薄膜における垂直磁化と電圧印加による磁化反転メカニズムの解明
- 多種センサーなどセンシング層における薄膜設計
- 第一原理計算手法の提供・支援
- 機械学習を用いたマテリアルズインフォマティクスによるデバイス材料設計

助教 名和 憲嗣

磁性体や絶縁体などあらゆる物質の電子構造や電気・磁気伝導を主に第一原理計算を用いて解析し、優れた機能性材料を設計する研究を行なっています。理論的観点から物質の特性を解明することで、素子開発の効率化が期待できます。

スピントロニクス分野における磁気トンネル接合素子の性能向上を目的とし、超薄膜や金属人工格子、磁性体と絶縁体の界面における垂直磁化や磁気輸送などのメカニズム解明や制御方法の提案を理論的に行なっています。また、最近では量子コンピュータや機械学習法の技術を第一原理計算と組み合わせながら、大規模かつ効率的な物質探索を実施しています。