

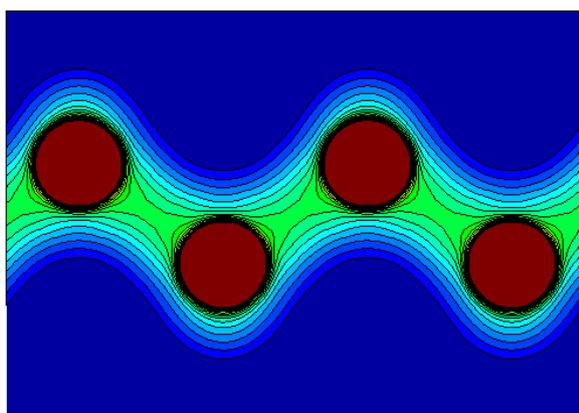


## 理論と実験の両面から詳細な電子の運動を調べ、新しい機能性材料を開発する

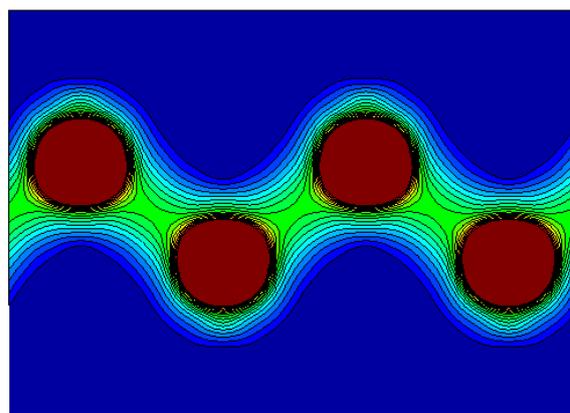
総合理工学部 教授 田中 宏志

私の研究室では、現代物理学の基礎となる量子力学に従って詳細な電子の運動を理論的に明らかにすると同時に、最大エントロピー法やスパースモデリングといったデータサイエンスの手法を駆使してX線や中性子線回折の実験データから詳細な電子構造を調べ、両者を比較検討することで新しい機能性材料を開発する研究を行っています。下の図は、理論的に計算されたシリコンの電子密度分布を実験的に得られたものと比較したのですが両者は定量的によく一致していることがわかります。

このように詳細な電子構造を調べることで、容量が大きく劣化の少ない次世代リチウムイオン電池や効率の良いコンデンサーの開発に貢献しています。これらはエネルギー問題の解決に有効です。また、最近では結晶中の静電ポテンシャルを詳細に明らかにすることが可能になりました。これにより反応活性化部位の特定が可能になり、特定の原子や分子を選択的に吸着する物質の開発に役立っています。これは、特定分子の回収や水の浄化に貢献します。



理論的に求めた電子密度



実験的に求めた電子密度