

数理物性力学研究室

Computational Material Science Laboratory

石井晃教授

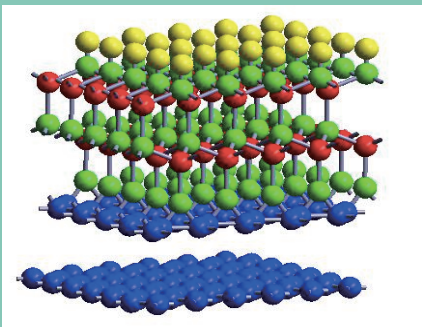
- ・第一原理計算によるナノ構造設計
- ・グラフェン上の様々な原子吸着
- ・表面担持型触媒の分析と設計
- ・鈴木カップリング触媒反応の計算
- ・マーケティング物理学
- ・ヒット現象の数理モデル

星健夫准教授

- ・大規模量子力学(電子状態)計算
- ・高速並列計算の数理アルゴリズム
- ・シミュレーションソフトウェア開発
- ・物理計算工学

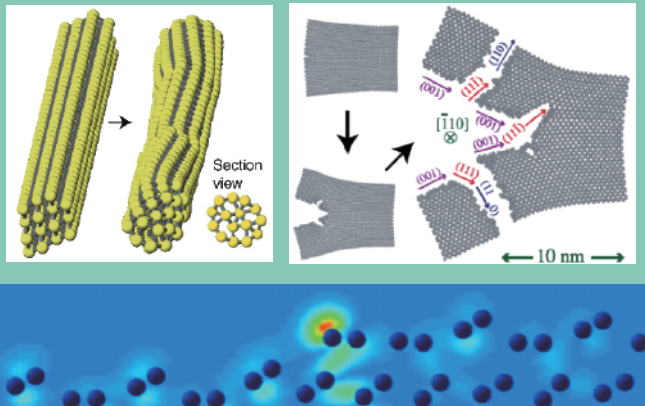
(NPO「科学技術ソフトウェア研究センター」理事;
<http://www.elses.jp/>)

グラファイト基板表面上に成長させた窒化ガリウム薄膜の第一原理計算

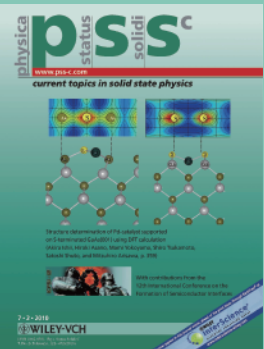


グラファイト上窒化ガリウムは、紙みたいに曲げられる発光材料になる

量子力学シミュレーションによるナノ構造プロセス
 (上左:らせん型金ナノワイヤ形成、
 上右:シリコンへき開過程、
 下:シリコン表面階段構造での特異な電子波)



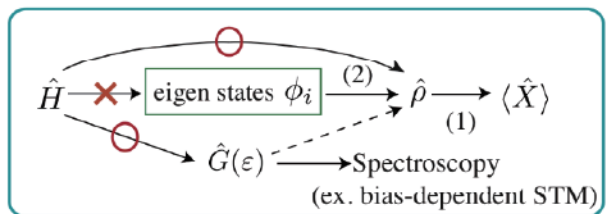
表面担持型触媒の第一原理計算による設計



いくらでも再利用できる環境調和型触媒の構造と反応を第一原理計算を用いて、量子力学で研究しています。

図は研究室の学生の論文が世界的な学術雑誌の表紙で紹介された例です。

シミュレーションの基礎となる、数理的研究
 (超大規模量子力学計算の数理的基礎から、高速並列計算アルゴリズムを構築)



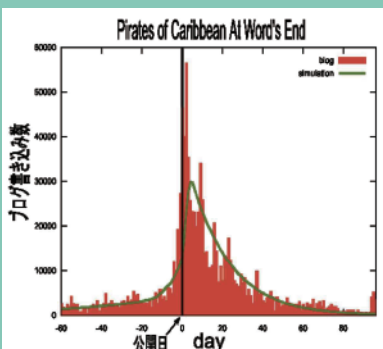
Calculating a physical quantity $\langle \hat{X} \rangle$

$$\langle \hat{X} \rangle = \sum_i^{\text{occ.}} \langle \phi_i | \hat{X} | \phi_i \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{X}] \quad (1)$$

with (one-body) density matrix

$$\hat{\rho} \equiv \sum_i^{\text{occ.}} |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \quad (2)$$

マーケティング物理学



ソーシャルメディアで情報を集め、それを物理学の方法で分析。人々がどう新製品を買うかという行動を予測出来る方程式を世界で初めて提案。図は映画の観客数を予測する計算。

連絡先

ホームページ: <http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~lab3/index.html>
 石井 晃 Tel: 0857-31-5629, e-mail: ishii@damp.tottori-u.ac.jp
 星 健夫 Tel: 0857-31-5630, e-mail: hoshi@damp.tottori-u.ac.jp