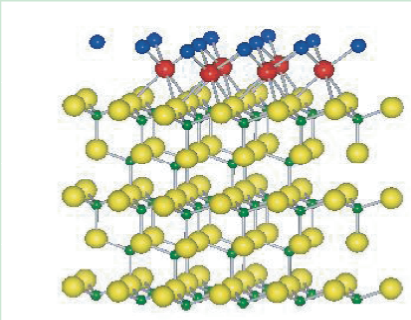


数理物性力学研究室

Computational Material Science Laboratory

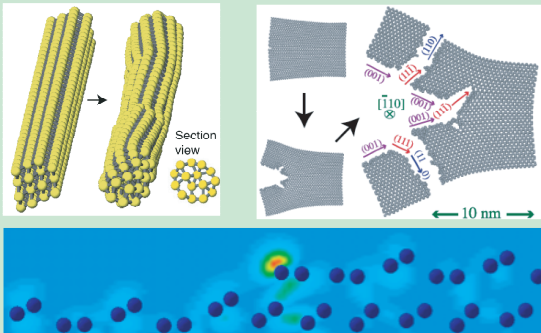
ナノテクノロジーを中心として、次世代産業の基礎となるシミュレーションを目指しています。ナノ世界は、原子1つ1つの動きが見え、電子が「波」として振る舞う、不思議な世界です。そんな不思議な世界のコンピュータシミュレーションに、量子力学を土台とする超大規模計算で挑んでいます。

科学研究費補助金と科学技術振興事業育成研究の援助を受けて創薬開発に必要な固体担持触媒の第一原理量子力学計算による設計を行っています。



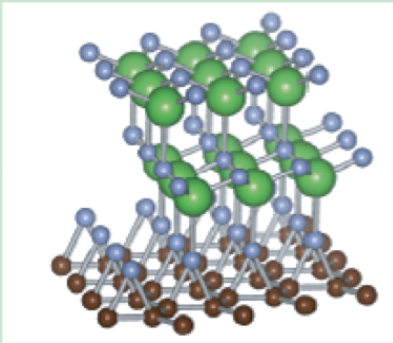
図は、窒化ガリウム上のパラジウム硫黄触媒

量子力学シミュレーションによるナノ構造プロセスと電子波 (上左：らせん型金などのワイヤ形成、上右：シリコンへき開過程、下：シリコン(111)表面ステップ構造での特異な電子波)



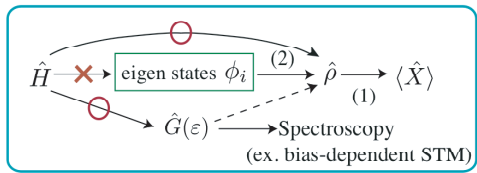
シミュレーションの基礎となる、数理的研究 (超大規模量子力学計算の数理的基礎から、高速並列計算アルゴリズムを構築)

科学技術振興事業機構CREST研究プロジェクトとして、グラファイト基板表面上に様々な物質を成長させる方法を第一原理量子力学計算で行っています。



図は、グラファイト基板表面上に窒化ガリウムが成長する場合の原子構造を第一原理量子力学計算で求めたものです

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

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

大ヒット映画はどのようにヒットするのか？ 経済物理学の分野で、ヒット現象の数理モデルを提案し、電通等と協力して研究しています。

石井晃教授 (JST-CREST研究担当者・理化学研究所共同研究員) : 第一原理計算 (精密量子力学計算) 表面科学、結晶工学、ナノテクノロジー、ヒット現象の数理モデル
 星健夫准教授 (「超大規模電子構造計算 (ELSES) 研究会」幹事 (<http://www.elses.jp/>) ・理化学研究所客員研究員) : 超大規模量子力学計算、高速並列計算アルゴリズム、第一原理計算

連絡先 ホームページ : <http://kjaro.damp.tottori-u.ac.jp/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