

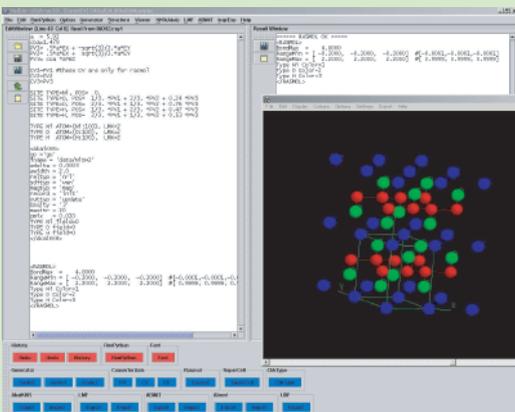
# 計算理工学研究室

Electronic Structure Calculation Laboratory

あらゆる物質はわずか百種類程度の原子が、結合あるいは凝縮したものです。原子は原子核と電子から成っていますから、「物質とは原子核が電子によって結びつけられたものである」といえます。この電子の振舞いは量子力学のシュレディンガー方程式によって支配されています。この方程式は単純に解けるものではないのですが、それを計算機を用いてなんとか解いて物質の性質を解明しようというのが我々の研究です。現在発展しつつある分野ですが、一筋縄ではいかないのが現状です。

## 結晶構造のモデリング

実験や大まかな理論予測にもとづいて計算の対象をモデリングする。



図：XtalEdit (言語Pythonなどをもちいた自家製ソフト) による例。

## 計算のアイデア

どういうアイデアで計算するのか？  
既存の方法を少しずつ改良していく。

**1. Quasiparticle lifetime  $\approx$  IMI rate.**

$$\Sigma = \frac{W}{G_0} = \frac{v}{G_0} + \frac{\chi}{G_0}$$

$\text{Im } \chi = (1 \text{ electron} + 1 \text{ hole}) + \text{Plasmon related part.}$   
At low energy, only "1 electron + 1 hole" spectrum remains.

$$\frac{1}{\text{Lifetime}} = \text{Im } \Sigma = \text{Im } G_0 \otimes \text{Im } v \chi v$$

When  $\text{Im } \chi_0$  is small,

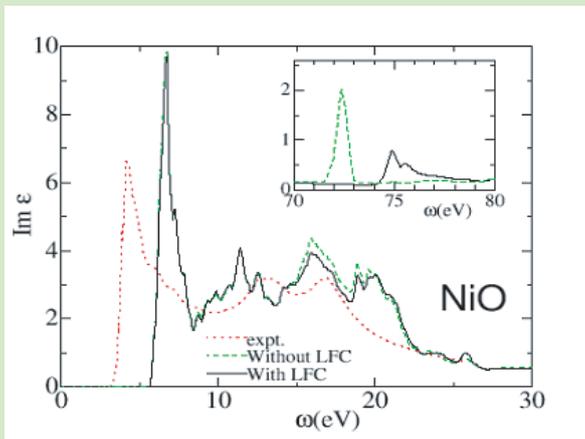
$$\text{Im } \Sigma = \text{Im } v \chi v \approx \text{Re} \left( \frac{v}{\varepsilon} \right) \text{Im } \chi_0 \text{Re} \left( \frac{v}{\varepsilon} \right)$$

図：学会発表でつけたアイデアの説明図の例。

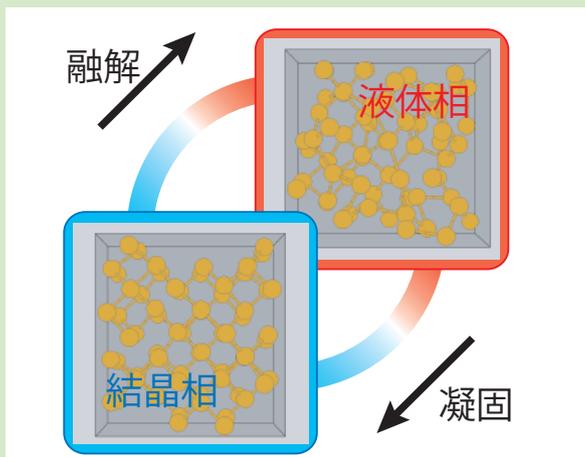
## アイデアを実践するためのコンピュータコードの開発

## 計算機がはじき出した結果と実験結果の比較

計算値(黒)と実験値(赤)にずれがみられる。  
一致を改善するにはどうするのか？



図：NiO結晶に関する計算結果。



図：物質構造の相変化 (例：シリコン)

。。。というようなことをしています。これらの方法や結果は、物質の性質を解明するのみにとどまらず、現在どんどんと進展しつつある「計算機によるマテリアルデザイン」の重要な基礎となります。

## 連絡先

ホームページ : <http://damp.tottori-u.ac.jp/~tkotani/index.html>  
 小谷 岳生 Tel:0857-31-6741, e-mail:tkotani@damp.tottori-u.ac.jp  
 吉本 芳英 Tel:0857-31-5725, e-mail:yosimoto@damp.tottori-u.ac.jp