

研究タイトル： 固体物性理論・シミュレーションと 教育用物理シミュレータの開発



氏名： 大西 宏昌 / OHNISHI Hiromasa E-mail: hohnishi@tsuruoka-nct.ac.jp

職名： 准教授 学位： 博士(理学)

所属学会・協会： 日本物理学会, 日本工学教育学会

キーワード： 光誘起相転移, 遷移金属酸化物, 第一原理電子状態計算, 教育用物理シミュレータ

技術相談
提供可能技術：
 ・MPI/OpenMP 並列計算
 ・物質の電子状態の計算機によるシミュレーション
 ・理論固体物理学について

研究内容： 物質の微視的理論シミュレーションと教育用物理シミュレータの開発

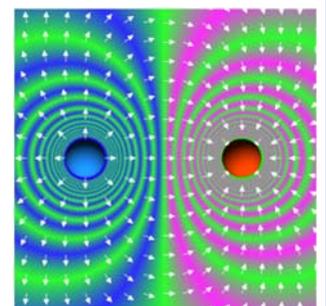
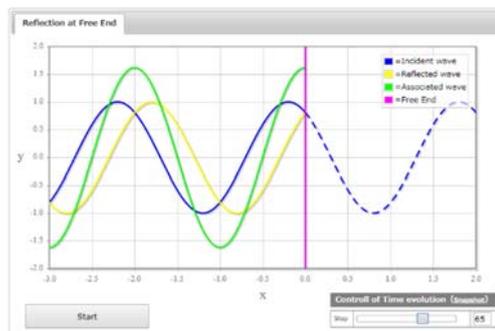
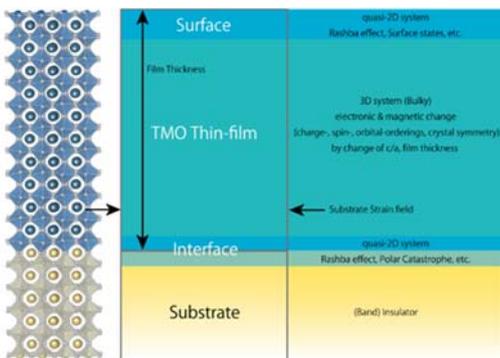
(A) 固体のもつ伝導性, 磁性, 誘電性等の機能性の発現機構やその外場による応答について, 量子力学・統計力学に基づいた理論及び大規模数値計算を通じて, 電子・原子レベルの微視的視点から研究を行っている. 近年では特に以下のテーマに注力して研究を行っている.

(1) 光誘起相転移とその動力学 - 近年, 光によって物質を励起する事で, その性質が劇的に変化する現象が数多く報告されており, 光誘起相転移と呼ばれている. この中で, 物質の格子自由度に着目した局所的安定構造の探索や, 光励起された電子と格子の動力学に関する理論研究を数値シミュレーションと並行して進めている.

(2) 遷移金属酸化物(薄膜)の第一原理電子状態計算 - 遷移金属酸化物は遷移金属の 3d 電子の局在性により, 電荷・磁荷・軌道秩序が競合し, 僅かな環境変化によりその性質が劇的に変化する. 高温超電導や巨大磁気抵抗がその最たる例であり, これらの機能性を新規デバイスに応用する試みが近年盛んにおこなわれている. 第一原理電子状態計算と呼ばれる, 経験的パラメータを含まない大規模数値計算手法により, これらの物質の電子状態の解明, 特に薄膜に特有な基板との界面, 表面等の効果にも着目して研究を行っている(下左図).

(3) 多秩序相関を取り込んだ量子多体論の構築 - (2)で述べた遷移金属酸化物では, 多くの秩序が複雑に絡み合うことで多彩な物質相が出現する. 理論的にこれらの複数秩序を統一的に取り込める手法として, Resonating Hartree-Fock-Bogoliubov (Res-HFB)法の開発を行っている.

(B) 学生が自主的, 能動的に学ぶことが出来る環境を構築するため, 各種 e-learning 教材の開発を行っている. その中で, 現象を視覚的に理解し, また仮想的な実験をいつでもどこでも出来る環境として, ウェブブラウザ上で動作する教育用物理シミュレータの開発(下中・右図)を, フィンランドの Turku University of Applied Sciences の物理教員チームと共同で行っている.



提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)

名称・型番(メーカー)	