

計算物理学的手法による高温物質科学

熊本大学 大学院先端科学研究部 基礎科学部門 物理科学分野 教授 下條 冬樹

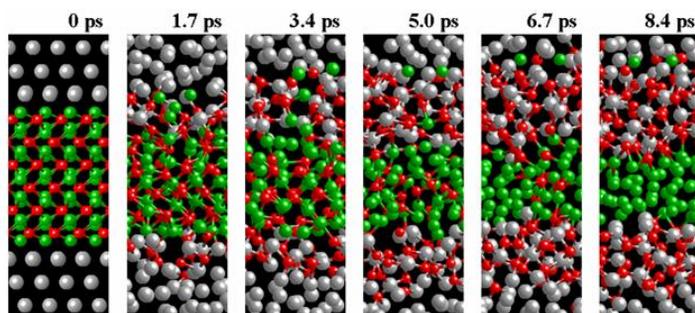
技術の紹介

●第一原理シミュレーションによる物質科学

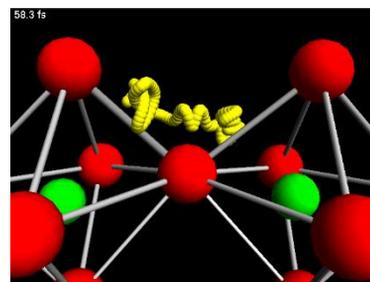
有限温度にある物質中の原子のダイナミクス、電子状態などを理論的手法、主として計算機シミュレーションの手法を用いて調べている。具体的には、機能物質中の化学反応過程、ペロフスカイト型酸化物中のプロトン伝導機構、水中の金属微粒子による水素生成機構、 dendrimer 高分子内の高速エネルギー輸送機構、亀裂破壊と応力腐食等の理論的・計算機シミュレーション的研究を行っている(下図参照)。

●シミュレーション新手法の開発と高速化

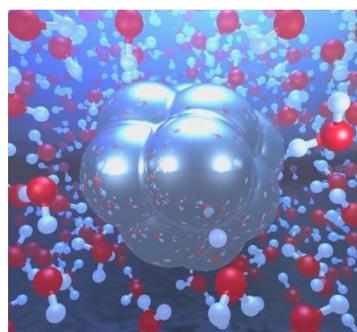
オーダーN電子状態計算法の開発、第一原理・古典ハイブリッド分子動力学法の開発、並列化分子動力学法の開発、第一原理電子状態計算の並列化、グラフィックス・アニメーションによる可視化等に関する研究を行っている。



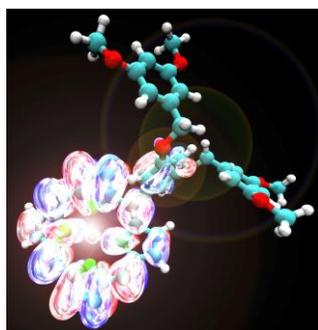
テルミット反応のシミュレーション



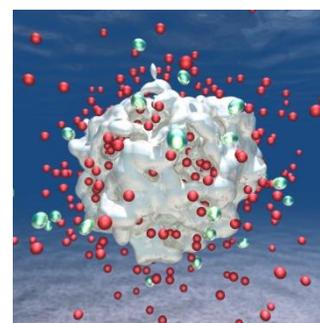
酸化物中のプロトンの軌跡



水中のアルミニウム微粒子



高分子内の電子の波動関数



水中の金属微粒子による水素生成

提供できる技術や応用例

第一原理分子動力学法による計算機シミュレーション関連技術、コンピューターグラフィックス技術、並列計算技術を提供可能。上記関連項目に関する実験的研究を行っている研究グループとの共同研究多数。

キーワード

物質科学、第一原理計算、電子状態、シミュレーション、イオンダイナミクス

