

計算物理学的手法による高温物質科学

Computational High-Temperature Materials Science

キーワード：物質科学、シミュレーション / keywords: Materials science, Computer simulation

下條 冬樹 教授 博士（理学） / Fuyuki Shimojo Prof., Dr. Sci.

基礎科学部門 物理学分野 / Research Field of Physics

E-mail: shimojo@※ Tel: 096-342-3488

URL: <http://crocus.sci.kumamoto-u.ac.jp/physics/mdlab/index.html>

●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、半導体物質の亀裂破壊と応力腐食、化合物半導体中の圧力誘起構造相転移、ペロフスカイト型酸化物中のプロトン伝導機構、高圧化における液体・アモルファス物質の構造と電子状態、液体カルコゲン混合系の非金属・金属転移、固体電解質中のイオン拡散機構等の理論的・計算機シミュレーション的研究を行っている。

●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。

●**Materials science by *ab initio* simulation methods** : We investigate the stress corrosion cracking in semiconductors, the pressure-induced structural transformation in binary semiconductors, the proton conduction in perovskite oxides, the nonmetal-metal transitions in liquid chalcogens, and the ion-diffusion mechanism in solid electrolytes.

●**Development of computer simulation methods** : We develop an order N electronic-structure calculation method, an *ab initio*/classical hybrid molecular-dynamics simulation method, a parallel molecular-dynamics simulation method, a parallel electronic-structure calculation method, and a visualization technique for computer graphics and animation.

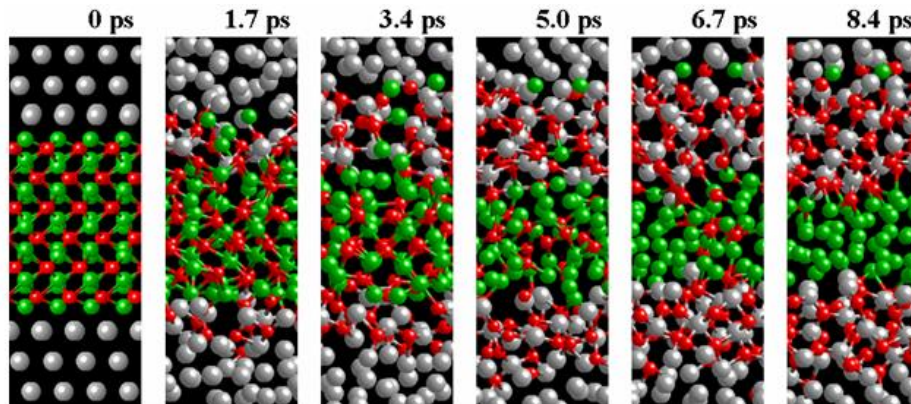


Figure 1 Simulation of the thermite reaction.

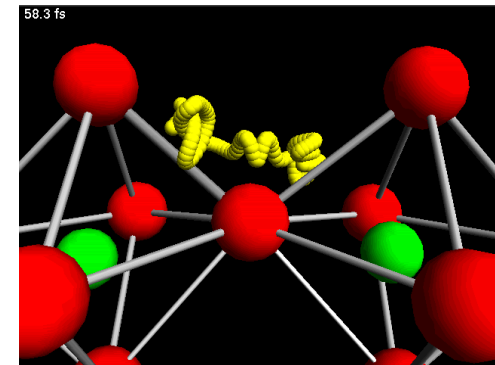


Figure 2 Trajectory of a proton in the perovskite oxide.