

# 研究タイトル: 固体物性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

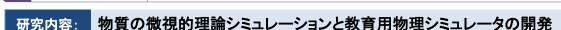
所属学会•協会: 日本物理学会,日本工学教育学会

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 ・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提供可能技術:

・理論固体物理学について



#### 固体物性の微視的理論・シミュレーションによる研究

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への応答について、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。

- 光誘起構造相転移
- 光励起キャリアの超高速ダイナミクス
- 遷移金属酸化物(薄膜)の物性解析
- Resonating HFB 法の数値計算手法開発

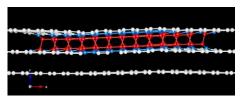


図1:グラファイト中に光誘起されたダイアモンドライクドメイン (Diaphite)の構造(数値計算結果)

### 教育用物理シミュレータの開発

スマートフォン搭載センサーを用いた実験手法の開発や、ウェブブラウザ上で動作する物理シミュレータの開発を 行い、自習環境としても利用できるデジタル物理教材の開発を行っている。開発した教材を利用し、学生が能動的 に学ぶための教育手法についても研究を行っている。

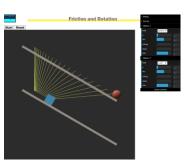


図 2: 斜面上の物体 図 3: 静電場シミュレータ

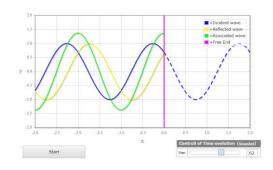


図 4:正弦波の自由端反射

## 提供可能な設備・機器:

名称・型番(メーカー)		





## Theoretical and Computational Study of Functionalities of Solids and Development of e-learning materials for Physics Education

					CON LONG	
Name	Hirom	asa Ohnishi	E-mail	hohnishi@tsuruoka-nct.ac.jp		
Status	Profes	sor				
Affiliations The Physical Society		y of Japan				
Keyword	Photo-induced phenomena, transition metal oxides, quantum many-body theory		ny-body theory			
Technical Support Skills  • Solid state physics • Open MP/MPI parallel computing • First principles electronic structure calculation						



#### Research Contents

We are theoretically studying condensed matter physics, focusing on the multi-stability of materials, which are closely related to functionality of materials such as conductive, magnetic and dielectric properties. Especially, we are interested in the following topics:

- (1) Photo-induced phase transition
  - Elucidation of structural change induced by photo-excitation
  - Study of dynamical properties of photo-excited electrons and phonons
- (2) First-principles electronic structure calculation of transition metal oxides (thin films)
  - Simulation of environment dependent electronic structure with competition of charge, spin, and orbital orders
  - Simulation of thin-film with explicit consideration of surface and substrates
- (3) Quantum many-body theory for electron correlations with multi-orders
  - Development of Resonating Hartree-Fock-Bogoliubov theory

We are also developing e-learning materials for physics education in collaboration with the Physics lab. in Turku University of Applied Sciences, Finland. Now we are focusing on the development of the simulationbased virtual laboratory environment, which is available on the web.

Available Facilities and Equipment					