

# 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

職名: | 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 ・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



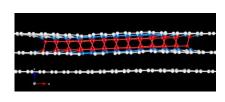
#### 研究内容:

#### 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

#### 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 近似の数値計算手法開発
- 量子コンピューティングを用いた数値計算法開発



数値計算で求めた原子の局所安定構造

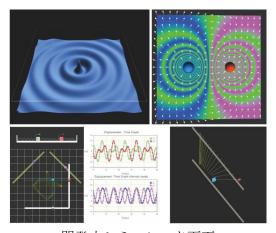
### 教育用物理シミュレータの開発

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.

Welcome to 0024 LAB

大师研

[0024lab]で検索!



開発中シミュレータ画面

#### 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

|  |  |  |        |                             | CONTRACTOR OF THE PARTY OF THE |  |
|--|--|--|--------|-----------------------------|---|--|
| Name   | Hirom                                      | asa Ohnishi  | E-mail | hohnishi@tsuruoka-nct.ac.jp |   |  |
| Status   | Profes                                     | ssor   |        |                             |   |  |
| Affiliation  | Affiliations The Physical Society of Japan |  |        |                             |   |  |
| Keyword  | s  | Photo-induced phenomena, transition metal oxides, quantum many-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. Now we are focusing on the development of the simulation-based virtual laboratory environment, which is available on the Web.

| Available Facilities and Equipment |  |  |  |  |  |
|------------------------------------|--|--|--|--|--|
|                                    |  |  |  |  |  |
|                                    |  |  |  |  |  |
|                                    |  |  |  |  |  |
|                                    |  |  |  |  |  |
|                                    |  |  |  |  |  |