

研究タイトル:

## 数値シミュレーションによる物性の解明



氏名: 時本 純 / TOKIMOTO Jun E-mail: tokimoto@tsuruoka-nct.ac.jp

職名: 助教 学位: 博士(理学)

所属学会・協会: 日本物理学会

キーワード: 物性物理(理論), 数値計算, 光物性, 超流動

技術相談  
提供可能技術:

- ・物性物理(理論)について
- ・数値シミュレーション
- ・大型並列計算機(スーパーコンピュータ)を用いた計算

### 研究内容:

#### 物質の光励起状態のダイナミクスに関する数値的研究

様々な物質中における電子の振る舞いはシュレーディンガー方程式を解くことにより解明されます。しかしながら、単純化したモデルにおけるシュレーディンガー方程式でさえ、解析的(手計算)に解けることはほとんどありません。そのため多くの場合、この方程式を大型並列計算機(スーパーコンピュータ)上で数値的に解くことにより新たな性質の解明や評価を行います。但し、計算機にはCPUコアやメモリに上限があるため、現実的な物質に近づけるために系を大きくして計算するにはそれなりの工夫が必要となります。そこで私は、情報学の分野で知られている、Randomized 特異値分解(RSVD)や動的モード分解(DMD)などの手法を取り入れ、物性に大きく寄与するモードのみを抽出し、計算コストを軽減することで物性の解明を行なっています。最近の具体的なテーマとしては、モット絶縁体や銅酸化物高温超伝導体を念頭に置いたモデルにおける光励起状態の解析を行なっていますが、上記の手法はこれらの物質以外にも適応できる一般的な手法であると考えており、今後は、様々な物質や外場における計算を行い、新たな物性の解明を行なっていく予定です。

4 質の高い教育を  
みんなに

7 エネルギーをみんなに  
そしてクリーンに

9 産業と技術革新の  
基盤をつくろう

光励起状態のシミュレーション → 時間依存解の固有モードへの分解 → 各モードの物理量を計算

- ・ モット絶縁体
- ・ Randomized 特異値分解
- ・ 電荷相関関数
- ・ 銅酸化物高温超伝導体 など
- ・ 動的モード分解 など
- ・ スピン相関関数 など

#### 超流動体の BCS-BEC クロスオーバーにおける振る舞いのシミュレーション

上記の光励起状態の研究の他に、超流動体に関する研究も行なっています。こちらも、スーパーコンピュータ上でのシミュレーションを基本的な手法としています。詳しくはお気軽にお尋ねください。

### 提供可能な設備・機器:

名称・型番(メーカー)	