

計算によって物質の性質が実験に先立って分かるかも知れない。もしそれが可能だとしたら皆さん、ワクワクしませんか。基本方程式を精密に解くことで、その様な物質設計は原理的には可能で、これは現代の錬金術と言っても良いかも知れません。100種類ほどの元素をどの様な幾何構造で配置すれば、望みの性質を持った物質を作ることが出来るのか、基本方程式にはその答えが書かれているはずですが、ただし方程式を読み解くことは簡単ではありません。そこで計算手法を新たに開発し、さらには「京」コンピュータに代表される超並列計算機を駆使して、私達はその方程式を詳細に読み解こうとしています。

ご興味のある方はお気軽にご連絡ください。

t-ozaki@issp.u-tokyo.ac.jp

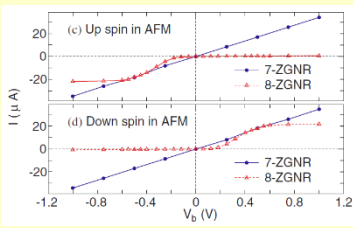
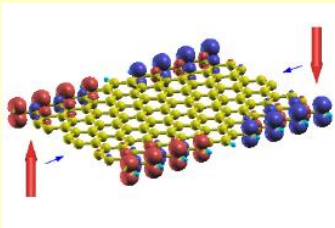
WEB: <https://t-ozaki.issp.u-tokyo.ac.jp/>

**シミュレーションの方法:** 量子力学の第一原理に基づきDirac方程式を数値的に解きます。物質の安定性、力学特性、磁気特性、電子伝導特性、光学特性等が高精度に計算することが可能です。

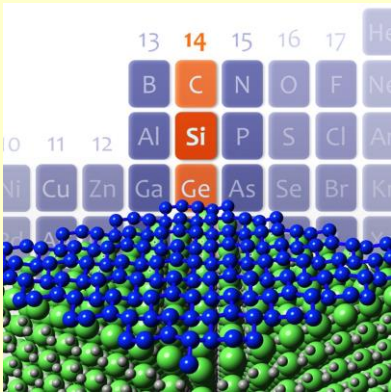
Dirac方程式

$$\begin{aligned} (\varepsilon - eV + mc^2) \begin{pmatrix} \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{pmatrix} &= c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \\ (\varepsilon - eV - mc^2) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} &= c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \begin{pmatrix} \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

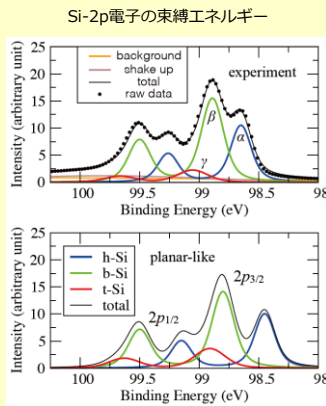
**新規スピフィルター提案:** 磁壁構造を持ったジグザググラフェンナノリボンが二重スピフィルター効果と名付けた非常に特殊なスピフィルターとして機能することを理論的に予測しました。二重スピフィルター効果とは印加するバイアスの向きに応じて、フィルターされる電子スピンの向きが反転する現象のことです。この効果はサブ格子内の炭素原子数が偶数の場合にのみ発現し、奇数の場合にはフィルター効果が生じません。実験的な実証が期待されます。



**新しい二次元シリコン構造の同定:** 実験グループと共同でZrB<sub>2</sub>上にシリコンの蜂の巣構造が形成することを発見。密度汎関数理論による大規模第一原理電子状態計算と実験事実を詳細に比較することで、最終的にZrB<sub>2</sub>上のシリセン構造の同定に初めて成功しました。



第一原理計算で得られた構造モデル



実験(上:吉信研)と計算(下)の比較

**超並列計算:** 「京」コンピュータはおよそ70万コアから構成される超大型並列計算機です。このような大規模な計算機を効率的に利用するためには計算を分散させて実行します。効率的な並列計算手法を開発することも重要な課題です。



©RIKEN

**新規方法論の開発:** 現実に近い状況を高精度にシミュレーションするためには効率的かつ高精度な計算手法が必要です。私たちは独自の方法論に基づいたソフトウェアOpenMXを開発し、シミュレーションを行っています。

Welcome to OpenMX

- Contents
- What's new
  - Wigner School in Beijing (Dec. 19-23, 2016)
  - 3rd Developer's Meeting in Gyeongju (Nov. 22-25, 2016)
  - Release of OpenMX Viewer (Aug. 15, 2016)
  - Release of OpenMX Ver. 3.8 (Apr. 3, 2016)
- What is OpenMX?
- Download
- Manual of Ver. 3.8
- Manual of Ver. 3.7
- Technical Notes
- Video Lectures
- Publications
- OpenMX Forum
- OpenMX Viewer
- Workshop
- Database of VPS and PAO
- Ver. 2013
- ADPACK
- Miscellaneous informations
- Contributors



我々の開発したOpenMXは東大物性研だけでなく、世界中の研究者に広く活用され、様々な応用研究の基盤ソフトウェアとなっています。

Website: <http://www.openmx-square.org/>

**大規模電子状態計算:** 鉄鋼材料の強度を制御する方法の1つはNbC等の炭化物を鉄鋼中に析出させることです。その際、母相である鉄と炭化物の界面構造が強度と関係しています。そこで「京」コンピュータを用いて炭化物と鉄の界面構造を最適化を実行。下図に見られるように界面付近の鉄原子は炭素原子に接近し、大きな歪が生じていることが分かります。

