

# 計算物質科学研究室

---

- 研究室について
- 計算物質科学とは？
- 研究の紹介
- さいごに

## ■ 研究室について

---

- 2024年4月に新設された理論系研究室です
- 教員はひとり



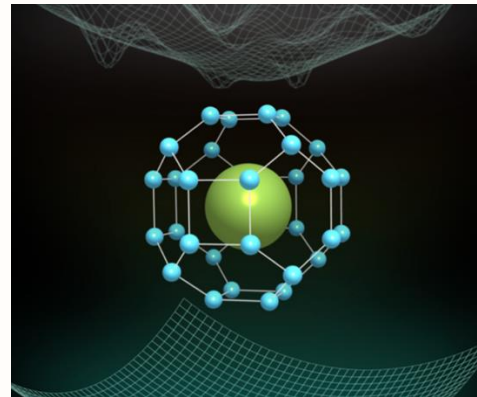
- 名前：野本拓也 (准教授)
- 略歴：京大(博士) → 理研 → 東大 → 都立大
- 居室：8号館579号室
- 研究分野：物性物理学・計算科学

# ■ 計算物質科学とは？

- コンピュータを用いて物質の研究をする分野です
- 物性や物理現象の理解だけが目的でなく、制御したり、設計したりすることも目的です
- おおきく分けて2通りの研究スタイルがあり、目的に応じて使い分けます

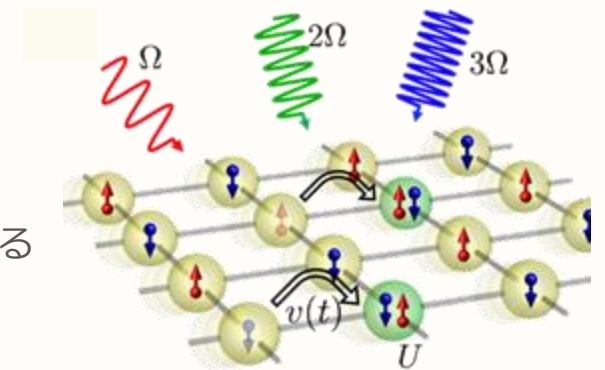
## 第一原理計算

- 現実の物質に則した計算
- 実験と定量比較が可能
- 適用できる手法は限られる



## モデル計算

- 単純化したモデルによる計算
- 高コストな手法も適用できる
- 現実物質との対応に隔たり



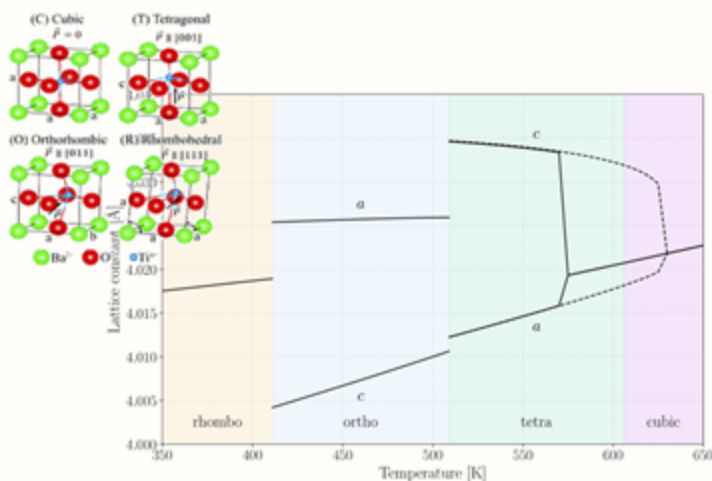
- 物質であればなんでも研究対象ですが、超伝導体や磁性体が本研究室では中心です

# 研究の紹介

## ■ 第一原理計算に基づく研究の例

### 構造相転移計算

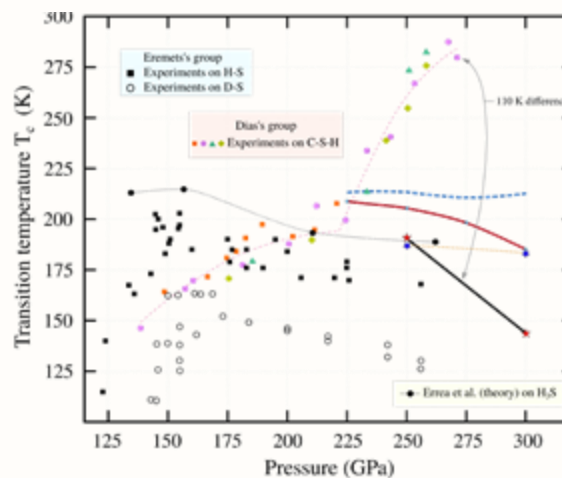
- 経路積分分子動力学法
- 非調和フォノン摂動論



結晶構造は物質の多様性の源!

### 超伝導転移温度計算

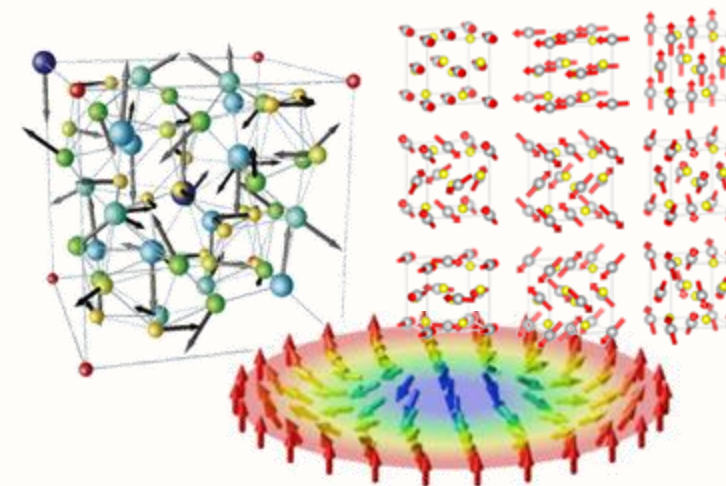
- 超伝導密度汎関数理論
- Migdal-Eliashberg理論



定量予測は第一原理計算の華!

### 機能性反強磁性体探索

- クラスター多極子理論
- Local Force Method



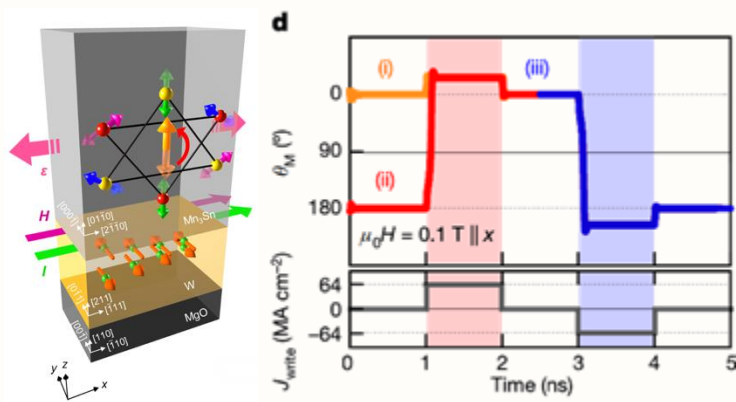
計算で新物質/新物性を設計する!

# 研究の紹介

## ■ モデル計算に基づく研究の例

### スピンドYNAMICS計算

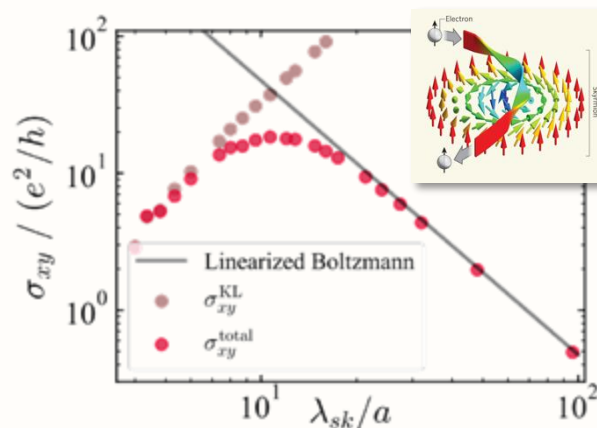
- Landau-Lifshitz-Gilbert計算



反強磁性体でエレクトロニクス!

### トポロジカル輸送現象

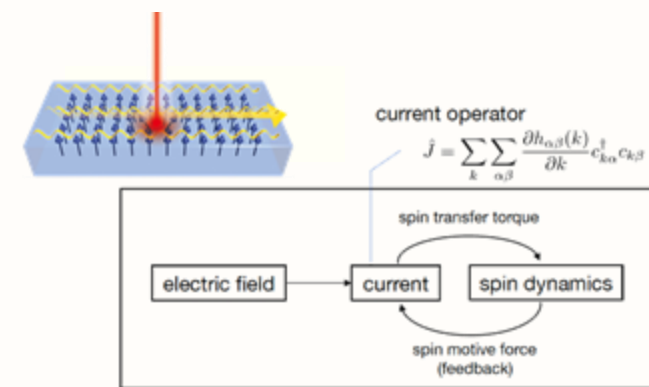
- Kernel Polynomial Method



トポロジーが物性を支配する!

### 非線形光学応答

- 時間発展密度行列平均場理論



電荷とスピン揺らぎの協奏!

## ■ そのほか

- 群論や有効場の理論を用いた解析計算ベースの研究
- 機械学習と第一原理計算を組み合わせたMIの研究

なども行っています

(マテリアルズインフォマティクス)

## ■ さいごに

---

- この研究室に向いていると思う人
  - 量子力学や統計力学の内容を面白く感じた人
  - 計算機を使ったシミュレーションやさまざまな計算手法に興味がある人
  - いろんな物質や現象に触れてみたい人
- 修士で就職を考えている方、博士進学まで考えている方、どちらでも歓迎します
- 興味のある人は、tnomoto at tmu.ac.jpまでご連絡ください
- ひとつこと

計算物質科学は、ストイックな理論物理というより、第一原理が生み出す物理の多様性を思いのままに楽しむ研究分野だと思っています。知らない物質や現象に出会ったとき、一緒になって楽しんでくれる学生さんをお待ちしています。