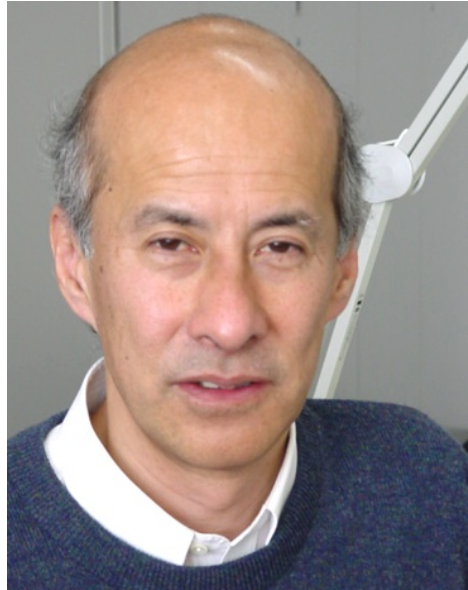


プロフィール



赤井 久純(あかい ひさずみ)

【現職】

大阪大学大学院理学研究科
物理学専攻 教授

【略歴】

1977年大阪大学大学院理学研究科博士卒

1978年奈良県立医科大学助手、講師、助教授を経て

1994年より大阪大学理学部・大学院理学研究科教授

1983年～1985年ユーリッヒ・固体物理研究所研究員

計算機マテリアルデザイン

量子シミュレーションから量子デザインへ

大阪大学大学院理学研究科
赤井久純

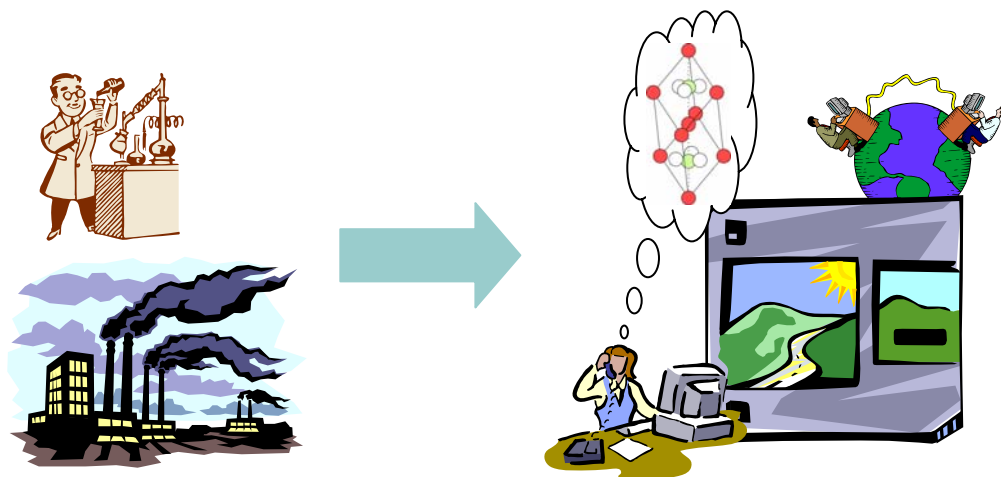
背景1

■ 計算機マテリアルデザイン

－ 計算機上の仮想実験室において

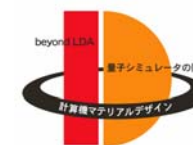
- 環境調和材料(窒化物、酸化物等)
- 高効率エネルギー変換材料(太陽電池・燃料電池材料、超伝導材料等)
- 安全・安心のためのセンサー材料(スピントロニクス材料等)
- 生体調和材料(人工関節、人工骨、歯科材料等)

等を効率良く、環境に負荷をかけず開発することのできる手法



従来型材料開発

計算機マテリアルデザイン

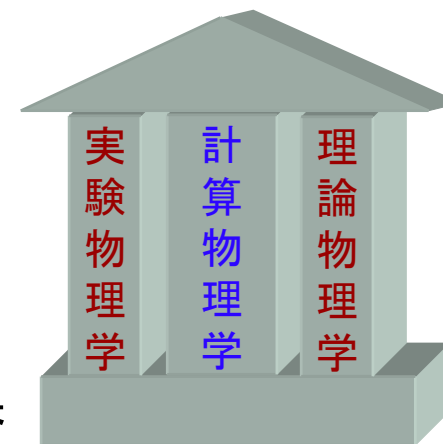


次世代量子シミュレータ・
量子デザイン手法の開発と応用

背景2

■ 現在の量子シミュレータ

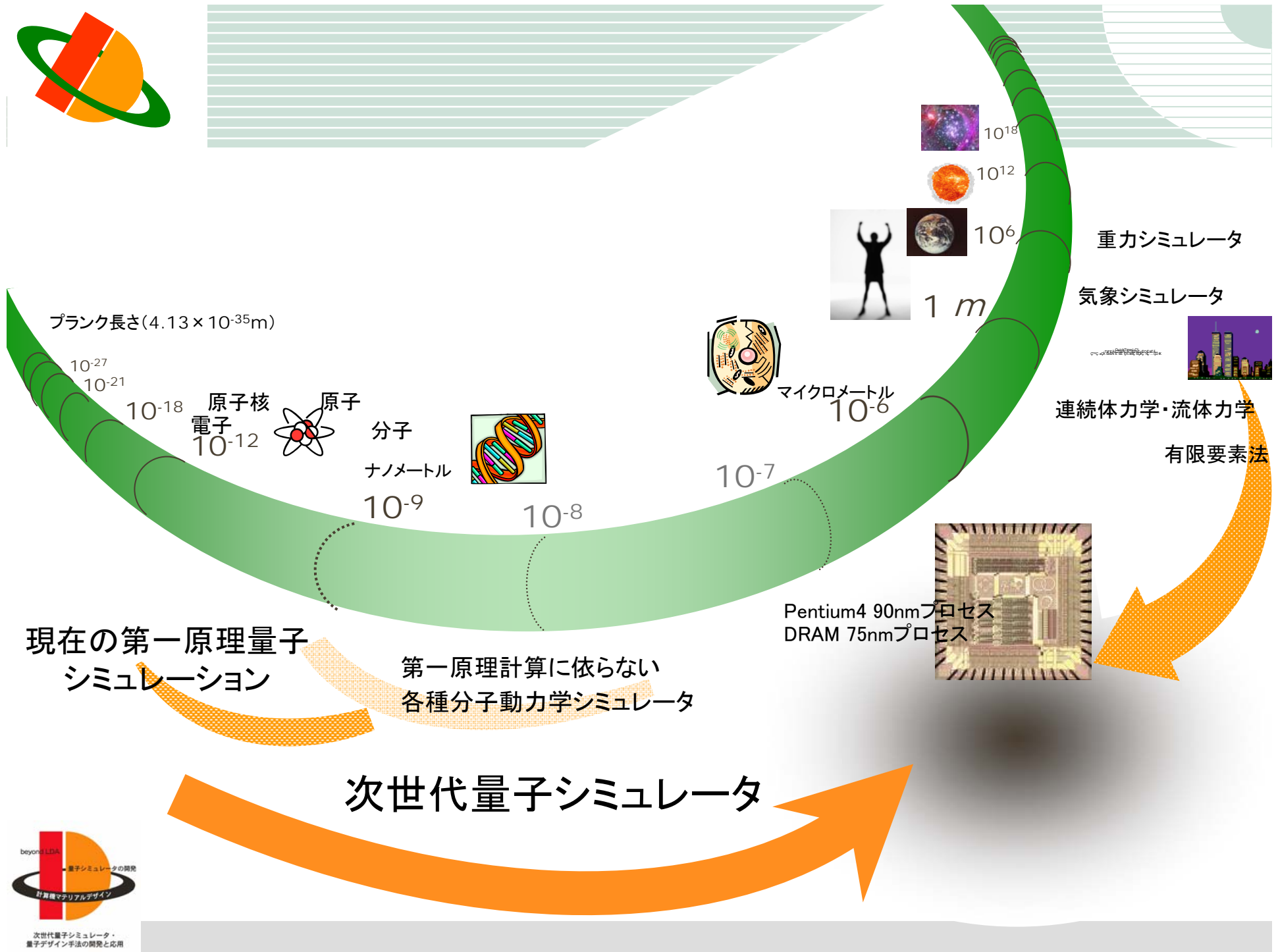
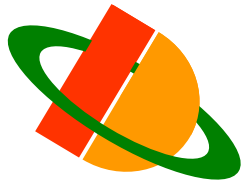
- 凝縮系物質・固体の物性予測
- 局所密度近似に基づく第一原理計算
- 物性物理学で最も成功したアプローチの一つ
- 計算機マテリアルデザインに用いられて大きな成果



■ 今後の要求 高度なデザイン

- 飛躍的に高精度なシミュレーション
- 飛躍的に大規模なシミュレーション
- 多様な電子相関・エキゾチックな系のシミュレーション
- ダイナミクスのシミュレーション

→ 次世代量子シミュレータと次世代スパコンとの出会い

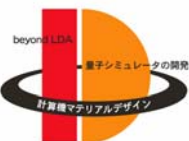


現在の第一原理量子シミュレーション

第一原理計算に依らない各種分子動力学シミュレータ

Pentium4 90nmプロセス
DRAM 75nmプロセス

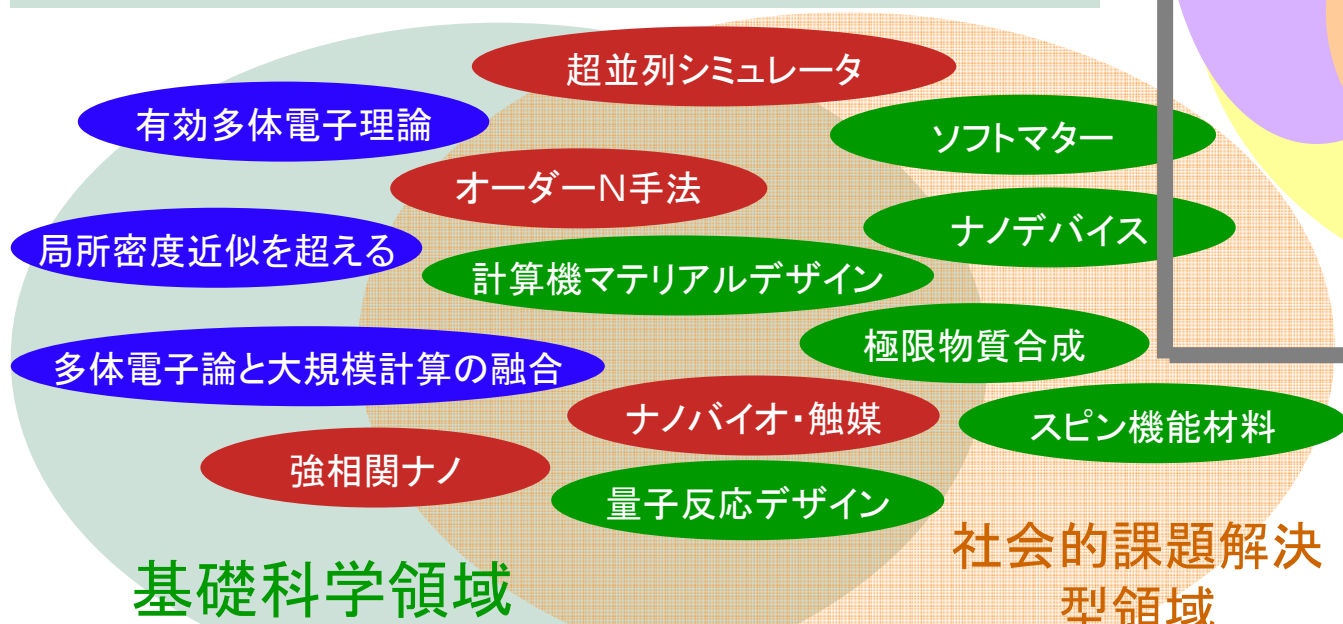
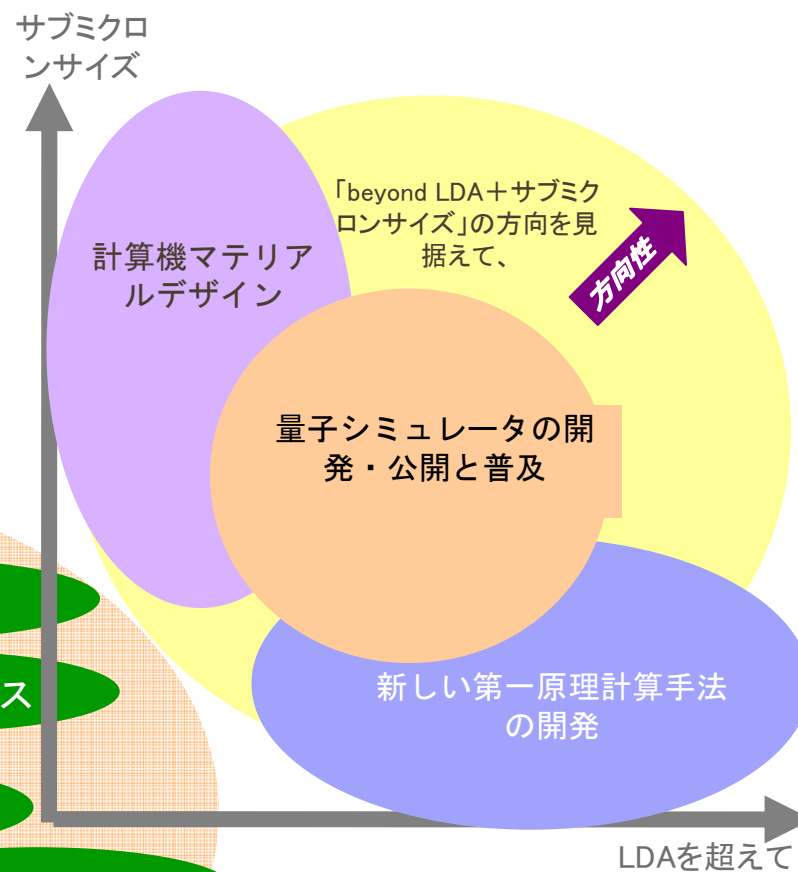
次世代量子シミュレータ



次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発と応用

研究の特性と方向性

- **基礎科学への貢献**
 - 次世代量子シミュレータは凝縮系の標準理論を提供
 - 次世代量子デザイン手法は新しい物質科学のパラダイムを切り開く
- **社会への貢献**
 - 「**計算機マテリアルデザイン**」を用いた新しい産業の創成
 - 高機能・高効率材料開発手法の提供



これまでの量子ミュレーションの実績

■ 代表的な実績

- 手法開発

- 多体電子論と量子シミュレーション
- フルポテンシャルKKR法、オーダーN法 etc.
- 実空間差分法

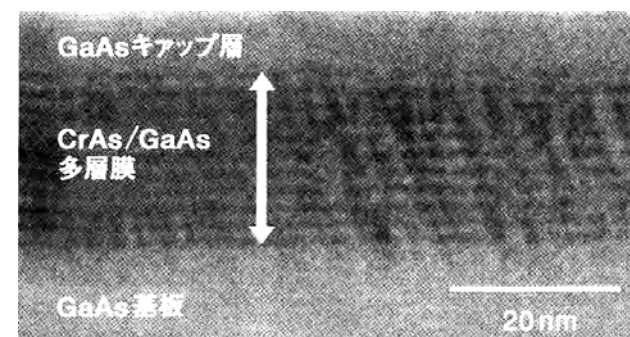
- 計算機ナノマテリアルデザインによる新物質創成

- 新物質の創成 CrAs , $(\text{Zn}, \text{Cr})\text{Te}$, $(\text{Ga}, \text{Cr})\text{N}$
- 透明室温希薄強磁性半導体 $(\text{Zn}, \text{Co})\text{O}$
- ハーフメタリック反強磁性半導体, etc.

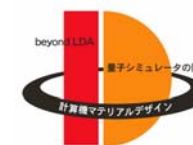
- 大規模計算

- DNA、ナノチューブ、ナノバイオ物質, etc.
- ダイナミクスシミュレーション
- 表面水素反応デザイン
- ナノ電子輸送

CrAs



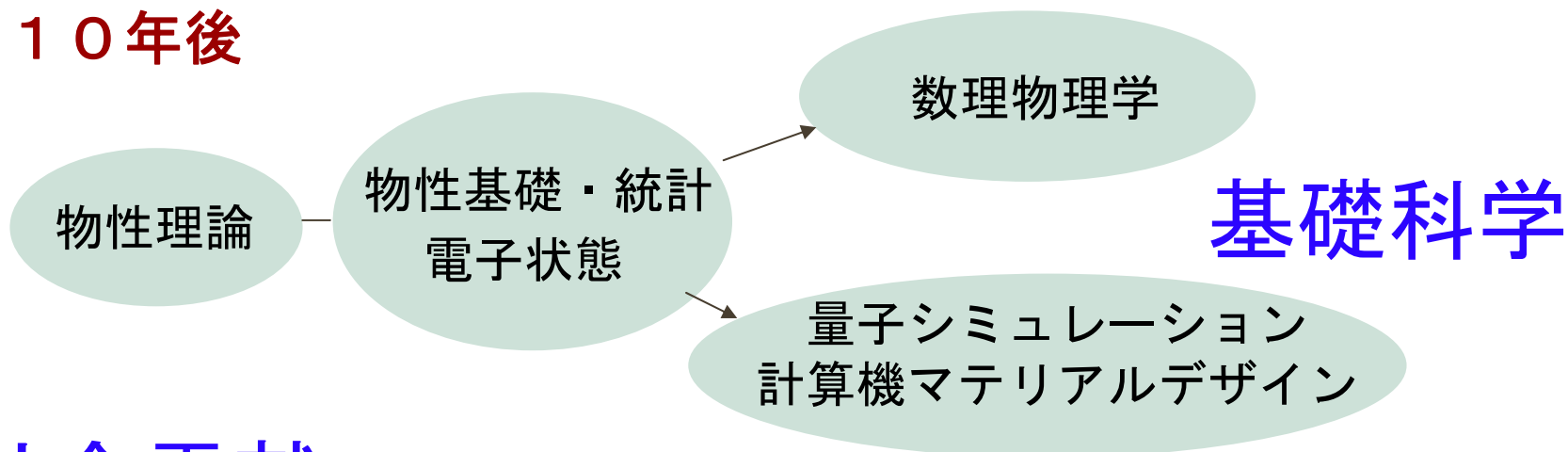
ハーフメタリック強磁性半導体



次世代量子シミュレータ・
量子デザイン手法の開発と応用

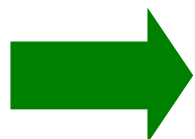
展望

■ 10年後



社会貢献

次世代量子シミュレータに支えられた
計算機マテリアルデザインは
高効率・環境低負荷の、新しい
材料・デバイス開発手法を提供



工程大分業時代における
知価創造工程の基盤技術

■ 20年後

