

未来を切り拓く量子シミュレーション 計算物理領域 森川研究室

大阪大学大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻
精密科学コース 計算物理領域 博士前期課程2年

山内 卓矢

●はじめに

高性能な半導体デバイス、有機デバイス、高効率な太陽電池、燃料電池など、新しい材料を設計するには物質中の電子や原子の振る舞いの詳細な知識が必要です。しかしながら、それらを実験的に調べるのは容易ではありません。そこで我々は高精度なコンピュータシミュレーションを用いて、物質中の電子や原子の振る舞いの観察と予測を行っています。量子力学の原理に基づく電子状態計算手法やシミュレーションプログラムを開発し、スーパーコンピュータを駆使して物質の電氣的・磁氣的な性質や固体表面上での触媒反応の進み方などの解明に取り組んでいます。それによって新しい物質やプロセスを設計する指針を与えるとともに、実験グループと協力して理論的予測の実証を行い、産業、エネルギー、環境といった社会を支える分野への貢献を目指しています。

●研究内容

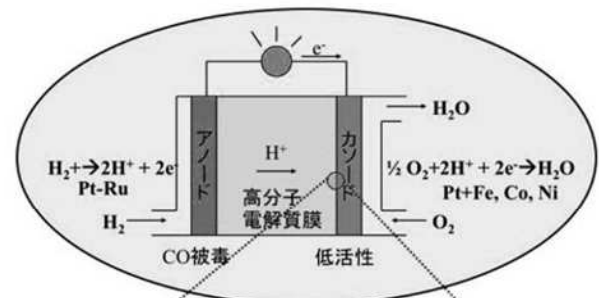
ここでは森川研で行われている研究のほんの一例を紹介させていただきます。

●燃料電池電極反応

実験的に見ることが困難な水と電極表面との界面での電気化学反応過程を、コンピュータシミュレーションにより直接見ることを可能にしました。これにより、電極触媒の反応性を支配する要因を解明し、新たな触媒設計の指針を得ることができます

●有機—金属界面の構造と電子状態

有機分子と金属電極とが接触している界面の構造や電子状態を原子レベルで明らかにすることにより、金属層から有機分子層へ電荷を注入する効率を左右する要因について明らかにします。



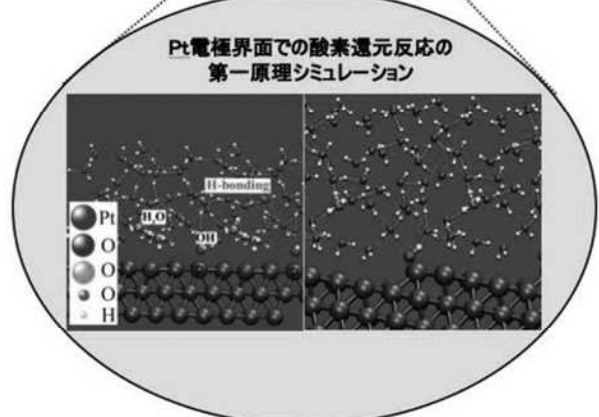
基礎となる物理 Schrödinger 方程式

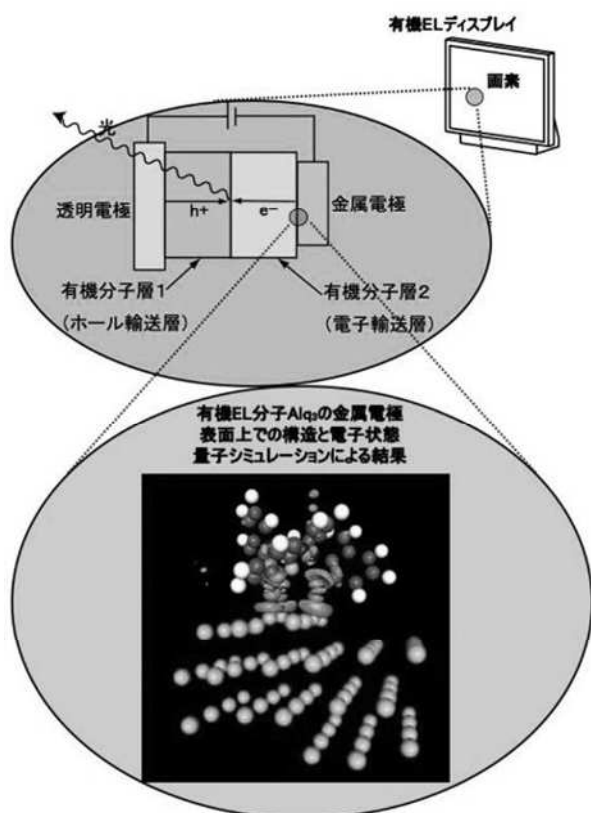
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

活用する計算機

クラスタ計算機 京コンピュータ スパコン

研究発表





●森川研の日常

森川研では研究だけではなく将棋やキャッチボールなど息抜きもしています。また、留学生がとても多く（現在12人）、普段のディスカッションはもちろんのこと昼休みなどでも交流する機会がたくさんあります。

●おわりに

ここまで読んで下さってありがとうございました！コンピューターシミュレーションや留学生との国際交流に興味のある方はぜひ森川研へ！



研究の息抜きに



留学生とランチ



集合写真