

# 第一原理計算を用いた物性科学

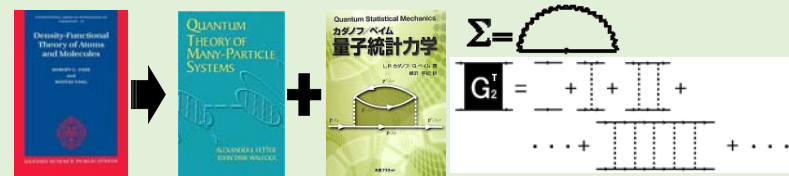
## 杉野研究室

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t)$$

- ☆ 研究内容 : Schrödinger方程式を解く⇒多様な物性現象を詳細に解明
- ☆ 特色 : (1) 自由度が大きく複雑な物質系をシミュレーションで探求  
(2) アルゴリズムの開発⇒フロンティアの開拓
- ☆ 主な研究 : (1) 界面の動力学とエネルギー変換  
超高速動力学と化学反応  
(2) Green関数法による励起状態の計算  
Tensor decomposition法による高精度電子状態計算

### 量子多体系の数値解法

一電子理論(Hartree-Fock)や密度汎関数理論(DFT)からその次へ



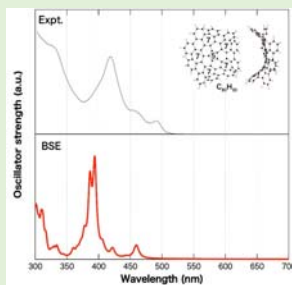
物性現象は多くの電子・原子核が関る複雑な現象です。多体問題を解くために多くの手法が開発されてきました。現実物質に実際に適用できる強力な手法として、密度汎関数理論(DFT)が有効です。しかし万能ではありません。DFTを超えて励起状態を求めること、あるいは、より相関の強い物質の基底状態を求めることは重要な研究テーマです。本研究室では新規アルゴリズム開発、プログラムパッケージ作成を行い、研究のフロンティアを広げるのに貢献しています。

### 応答と励起

#### Green関数法と物質の励起状態の研究

励起状態は、物質の応答やダイナミクスを調べるための鍵です。また、応答の計算と実験を詳細に比較することにより、物質の構造を決定することが可能になります。

本研究室では、電子励起(電子と正孔の生成)を計算するためのGreen関数法を開発し、100原子規模の物質の計算を可能にしました。これを用いて物質の構造決定のための研究を進めています。

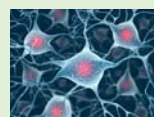


光吸収スペクトル。実験(上図)と計算(下図)の比較から構造の決定へ

炭素物質, 水のネットワーク, 生体関連物質などの研究が進んでいる

### 高精度電子状態計算

量子状態のもつれまで考慮した計算



$$\Psi = \sum A^{\lambda_1} \otimes A^{\lambda_2} \otimes A^{\lambda_3} \dots$$

波動関数の数学的構造とそれを取り入れた高精度計算

物性現象は、相関が強くなるほど複雑になります。それを計算するためにはより強力な手法が必要になります。

波動関数は多階のテンソル積で表現することができます。それを簡略化するためのアルゴリズムが複雑な波動関数を求めるためのブレイクスルーを与えるのではないかと考え、新しい計算手法を開発しています。

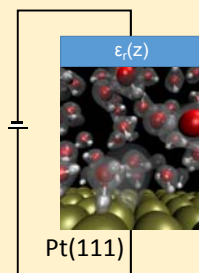
### 複雑系のシミュレーション



ぬれ、錆びといった諸々の自然現象を物理学の言葉で理解する

多くの状態がエネルギー的に密集する場合も、相関が強い多自由度系が現れます。生体系や化学反応系(触媒など)は重要な研究対象になります。本研究室では大規模なDFT計算による固体・水溶液界面のダイナミクスに関する研究を行っています。

### 界面とエネルギー変換



白金と水溶液界面に電位差を与えると酸素と水素が発生する現象は「水の電気分解」として知られています。その逆反応が燃料電池反応です。しかし、どのような動力学が展開されているのか微視的な理解はあまり進んでいません。そこで、DFTレベルでの分子動力学計算を発展させて、この反応動力学のsimulationを行っています。

なぜ白金が優れているのか、水や水素結合ネットワークがどのように働いているのか、どのような経路で反応しているのか次々に解ってきました。

会社等でこのsimulation技術を生かした研究を行っている卒業生が何人もいます。自動車のエンジンの燃焼のsimulationにチャレンジしている卒業生もいます。

Contact us: [sugino@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:sugino@issp.u-tokyo.ac.jp)

<http://sugino.issp.u-tokyo.ac.jp>