

理学系
物理学専攻

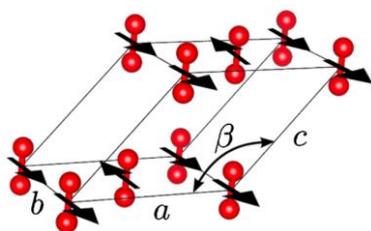
杉野研究室



教授 杉野 修

物性科学は、相互作用している多粒子系の研究です。杉野研究室では、その性質を捉えて物質機能性を予測するために、スパコンを用いたシミュレーションを行っています。また、研究対象を広げるための計算手法の開発に力を入れています。

酸素は常温常圧で気体ですが、温度を下げると固化し(左図)、様々な相転移を繰り返します。ファンデルワールス力と磁氣的相互作用がバランスした興味深い系です。これらの力(原子間力)は、電子の基底状態を計算することにより求めることができます。その計算に基づき、相転移(構造相転移)の様子を調べてきました。



固体酸素の構造

電子状態を求めながら構造を計算することにより、物質を定量的に研究することができます。そのような計算を**第一原理計算**とよびます。第一原理計算は、密度汎関数法や多体グリーン関数法に基づく方程式を解くことにより行われます。これまで固体、液体、表面界面、生体物質など様々な物質の研究を行ってきました。計算機の発展とともに研究対象はどんどん広がっています。

機械学習に基づく理論構築

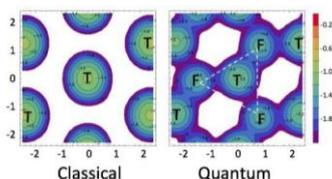
$$E[n] = F[n] + \int n(\mathbf{r})V(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

密度汎関数理論は究極かつ未完の多体計算理論です。完成させるためには、粒子密度とエネルギーを対応付ける汎関数 F を知る必要があります。 F を機械学習の方法を用いて決定するためのデータ科学的研究を行っています。これと並行して、汎関数繰り込み群の方法を用いて F を決める手法も研究しています。電子系や古典系、原子核系に有効な統一的な理論を構築しています。

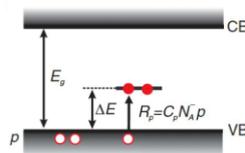
水素の量子的動力学

$$r_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \phi_j | \frac{\partial H}{\partial Q} | \phi_i \rangle \right|^2 \sum_{n,m} \omega_{nm} |\langle \chi_{jm} | Q - Q_0 | \chi_{in_i} \rangle|^2 \delta(E_{jm} - E_i)$$

水素原子は原子核の中でも特に量子性が強く、しかも容易に電子を捕獲・放出して動き回ることができます。その様子を捉えるために、電子系(ϕ)と原子核系(χ)を経路積分法等で求めるシミュレーションを行っています。また、捕獲・放出の確率(r_{ij})やメカニズムを探る研究も行っています。



白金上の水素原子核の分布。
量子効果が顕著に表れる。

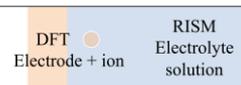


半導体中の水素不純物レベル。
電子捕獲を伴った拡散が起こる。

電子格子相互作用 $\langle \phi_j | \frac{\partial H}{\partial Q} | \phi_i \rangle$

電子格子相互作用を定量的に計算することにより、上記の確率だけでなく、バンドギャップの量子補正や温度依存性、BCS超伝導などの研究ができます。場の量子論の方法を用いた理論の拡張も行っています。

電気化学界面への応用



原子核の量子効果を取り入れながら原子間力や捕獲・放出確率を計算する手法を固体液体界面に適用することにより、燃料電池やリチウムイオン電池、二酸化炭素還元過程を研究しています。メカニズムの解明や新規電極物質の探索に貢献しています。



こんな方が私たちの研究室に向いています

- ・ 楽道家。研究に対する意欲が継続できる人
- ・ プログラミングやアルゴリズム開発が得意な人
- ・ シミュレーションが好きな人

研究室見学はいつでも歓迎です

Tel: 04-7136-3290

E-mail: sugino@issp.u-tokyo.ac.jp

場所: 物性研A棟A511またはA510