

## 杉野研究室

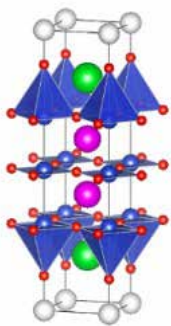


教授 杉野 修

電子と原子核の動きをシュレディンガー方程式に基づいてシミュレーションすることにより物性を研究している研究室です。シミュレーションの基礎となる密度汎関数理論(DFT)は約60年前に生まれました。それが40年前ごろからスーパーコンピュータと共に急速に発展し、今や仮想的な物質の物性予測が可能なレベルにまで発展しています。将来的には、量子コンピュータと機械学習の併用により爆発的に発展すると見込まれています。

この研究分野の基礎は伝統的な物性理論ですが、新しいハードウェアやアルゴリズムを使って新たな展開が繰り広げられてきました。特に、物性物理学の枠内だけでなく原子核物理学・生物物理学・分子化学・電気化学など多くの分野との境界領域が発展し、随所で自由闊達な研究が行われています。杉野研究室では修士の院生のみ募集していますが、研究の現場に2年間身を置き、そこでの体験を実社会で活用してみたいと考えている学生は一度訪問されることを希望します。

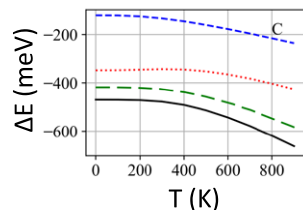
## 超伝導物質のバンド計算

HgBa<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>8</sub>  
Nonmagnetic cell

左図の銅酸化物はペロブスカイト構造を持つ超伝導体ですが、電子構造・スピン構造、フォノンなどの基本物性はDFT計算から求めることができます。超伝導性の議論に重要なデータとなります。[博士課程Tatan (2022)]



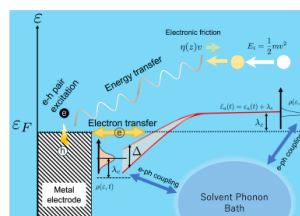
## 絶縁体のバンド計算(電子とフォノン)



左図はダイヤモンド(C)のバンドギャップの計算例ですが、電子がフォノンにより散乱される過程を考慮した先進の計算を行うと温度依存性を求めることができます。黒線が計算結果であり、緑鎖線で示した測定結果とよく一致していることがわかります。[博士課程、石井 (2022)]



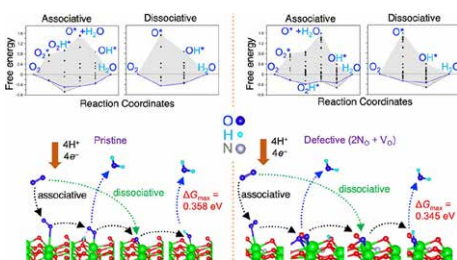
## 金属・水界面での非平衡量子ダイナミクス



燃料電池反応や水の電気分解は、金属と水溶液の界面で起こりますが、これは最も身近な非平衡量子ダイナミクスと言えるでしょう。これを物理学的手法を駆使して理解しようとするとうなるかを追求したのが本研究です。[博士研究員、Arguelles (2023)]



## 次世代電極材料の設計



燃料電池反応に関する量子ダイナミクスの計算を行い結果を解析すれば、反応がどの程度起こり易いのかを知ることができます。カソード上で起こる反応  $O_2 \rightarrow O_2H \rightarrow OH + O \rightarrow H_2O + O \rightarrow H_2O + OH \rightarrow 2H_2O$  の反応経路に沿って自由エネルギーを行ってZrO<sub>2</sub>表面が最適な電極物質かどうかを調べたのが本計算です。[博士研究員、Muhammady (2022)]

その他、単純液体、ホタルの発光、トポロジカル物性、高圧新物質、金属表面上での量子拡散などの計算、それに加えて基礎的な多体問題に関する研究など、各人がそれぞれテーマをもって研究を行っています。

— 研究室見学はいつでも歓迎です —  
E-mail: sugino@issp.u-tokyo.ac.jp  
Tel: 04-7136-3290  
場所: 物性研 A棟 A511

詳しくは研究室HPをご覧ください。  
<https://sugino.issp.u-tokyo.ac.jp>

