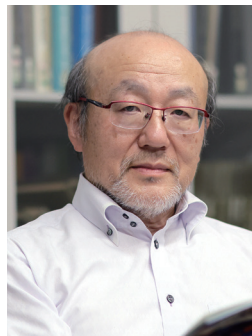


## 研究テーマ Research Subjects

- 1 非平衡統計力学的アプローチによる物質中の電子移動反応の理解  
Understanding electron transfer reactions in materials using a non-equilibrium statistical mechanics approach
- 2 物質中の水素・ミュオンの量子状態  
Quantum states of hydrogen and muon in a material
- 3 電子格子相互作用の第一原理計算  
Electron-phonon couplings from first principles
- 4 超伝導体の第一原理計算  
First-principles simulation of superconductors



教授 杉野 修  
Professor SUGINO, Osamu

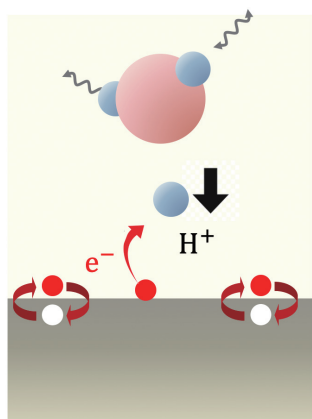
専攻 Course

理学系物理学

Phys., Sci.

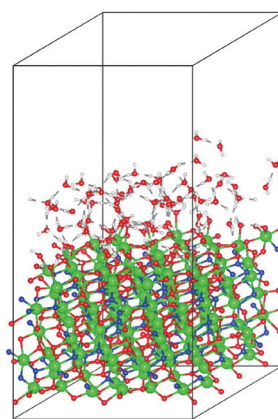
電子とイオンが運動して起こる化学反応によるエネルギー変換過程を、非平衡運動論の枠組みで捉えるための研究を行っている。今回は、プロトンが電極水溶液界面において電子およびフォノンを励起しながら運動エネルギーを失って表面に吸着する Volmer 過程を、非平衡グリーン関数法の枠組みで探った。本計算は、先行研究を拡張してプロトンの運動をあらわに考慮したものになっている。従来格子摩擦が支配的だと考えられてきたが、電極での電子正孔対を励起することで起こる電子摩擦が同様に重要であることが分かった。燃料電池等で起こるエネルギー変換を捉え直す必要性を示唆する結果である。目下、第一原理計算に基づいて現実系により忠実に反映したモデルを用いた研究を行っている。

This study explores energy conversion processes driven by chemical reactions involving electrons and ions within the framework of non-equilibrium kinetics. Specifically, the Volmer process, where protons lose kinetic energy and adsorb onto the surface while exciting electrons and phonons at the electrode-solution interface, was examined using the non-equilibrium Green's function method. This calculation extends previous research by explicitly considering proton motion. Traditionally, lattice friction has been considered dominant, but our findings reveal that electron friction, caused by the excitation of electron-hole pairs at the electrode, is equally significant. These results suggest the need to reconsider energy conversion processes occurring in fuel cells. Currently, research is being conducted using models that more faithfully reflect real systems based on first-principles calculations. This approach aims to provide a more accurate understanding of the mechanisms involved in energy conversion processes, potentially leading to more efficient fuel cell designs and other applications in the field of energy technology.



電極水溶液界面での電子移動反応の非平衡ダイナミクス。格子振動励起と同様に電子励起（電子摩擦効果）が重要であることを示唆している。

Non-equilibrium dynamics of electron transfer reactions at the electrode-aqueous solution interface. It suggests that electron excitation (electron friction effect) is as important as vibrational excitations.



ドーパされたジルコニア上の水のシミュレーション。第一原理計算と機械学習の組み合わせにより長時間シミュレーションが可能になった。

Simulation of liquid water interfaced with a doped zirconia surface. The first-principles calculation was extended to long-term simulation owing to the machine learning technique.



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/sugino\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/sugino_group.html)