

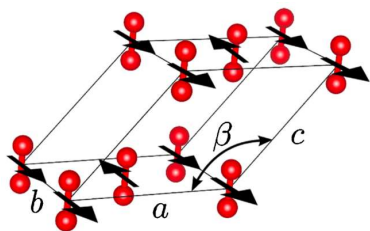
理学系
物理学専攻

杉野研究室



教授 杉野修

現代科学においては、理論と実験に加えてシミュレーションが本質的な役割を果たしています。計算機が著しい発展を遂げた結果、原子番号と原子数だけから物性を予測する究極のシミュレーション「第一原理計算」が現実のものになろうとしています。杉野研究室では、最速のスパコンを用いたら何が出来るか、計算手法はどこまで発展可能なのかという観点から研究を行っています。



固体酸素の相図と構造

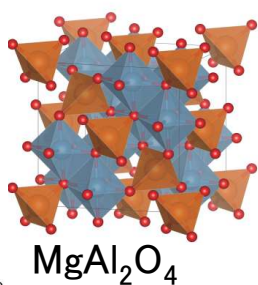
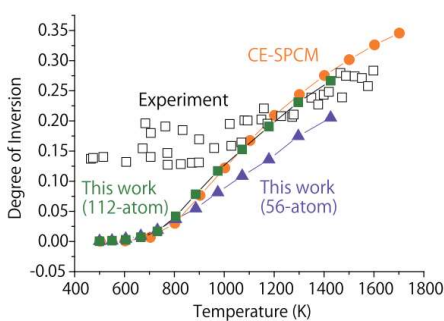
温度を下げると酸素は固化し、様々な相転移を繰り返します(左図)。その様子は、ファンデルワールス力と磁氣的相互作用を精密に第一原理計算することで調べることができます。これは、今年の卒業生がDFT+Uとよばれる最近注目手法を用いて、修士論文で明らかにしたことです。このように**計算物性物理学**では、

- 物質中の電子状態の計算手法を精密化する
- 現象を的確にモデル化する
- 計算と実験を詳細に比較して真相を究明することによって物性を解明することを目指します。

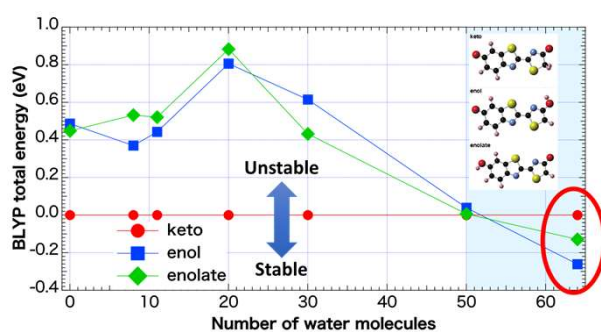
第一原理計算は、原子間の相互作用、光・素励起間の相互作用などを統一的な手法で扱うため、多くの自然科学(化学、生物学等)と繋がりがあ研究分野として発展しています。基礎から産業応用までわたる広い科学的視野が必要とされる分野です。

杉野研究室では、機械学習の方法を用いた新しい計算手法、多体グリーン関数理論に基づいた励起状態計算手法の開発等を進め、計算物質科学の最前線を開拓する研究を行っています。同時に「京」コンピュータ等を積極的に利用して、固体界面や固液界面などで起こるエネルギー変換や発光過程などこれまで計算ができなかったような複雑な現象の解明に挑んでいます。

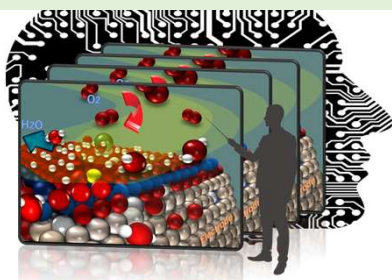
Replica exchange Monte Carlo法を用いた欠陥分布の計算



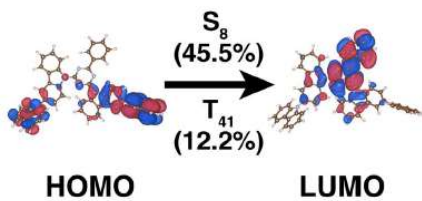
ホタルの生物発光物質(oxyluciferin)の安定性



複雑な界面のシミュレーション



有機発光ダイオード中の励起状態の波動関数と計算式(Bethe-Salpeter equation)



$$L(1,1';2,2',\omega) = i \sum_i \left[\frac{\chi_i(x_1, x'_1) \chi_i^*(x_2, x_2)}{\omega - \Omega_i} - \frac{\chi_i(x_2, x'_2) \chi_i^*(x_1, x_1)}{\omega + \Omega_i} \right]$$

$$\chi_i(x, x') \equiv -\langle \Psi_{gr} | \psi^\dagger(x') \psi(x) | \Psi_i \rangle = \sum_v \sum_c A_{vc}^i \psi_c(x) \psi_v^*(x')$$

$$(\epsilon_c - \epsilon_v) A_{cv}^i + \sum_{v',c'} \langle v'c' | K | v'c' \rangle A_{v',c'}^i = \Omega_i A_{cv}^i$$

こんな方が私たちの研究室に向いています

- 楽観的に何でも計算できると思える人
- プログラミングが得意な人
- シミュレーションが好きの人

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