

理学系
物理学専攻

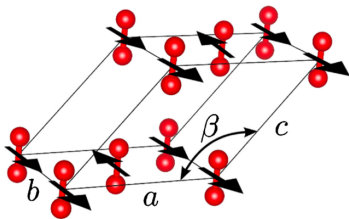
杉野研究室



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。同時に、計算手法の開発を行い研究対象を広げるための研究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。原子間力がわかれば、相転移(構造相転移)の様子を調べることができます。



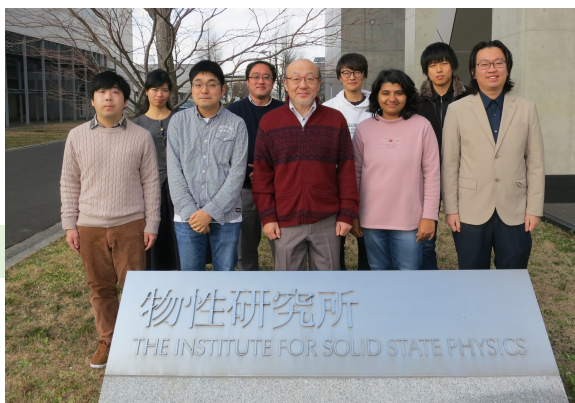
固体酸素の構造

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。電子状態計算は、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。

機械学習に基づく理論構築

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

密度汎関数理論は未完の多体理論です。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、原子核系に有効な理論を構築しています。



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

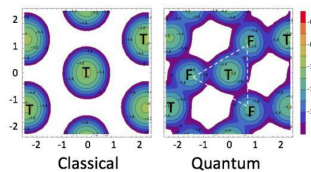
E-mail: sugino@issp.u-tokyo.ac.jp

場所: 物性研A棟A511またはA510

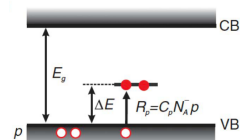
水素の量子非断熱性

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

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きます。



白金上の水素原子核の分布。
量子効果が顕著に把握できる。



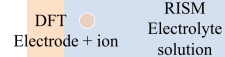
半導体中の水素不純物レベル。
電子捕獲を伴った拡散が起こる。

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などの研究も行っていきます。

燃料電池、電池への応用



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の過程を計算することができます。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。