

理学系  
物理学専攻

## 杉野研究室



教授 杉野 修

## 学生の研究テーマ

数値計算の方法やプログラミングなどの必要なスキルを春山助教等から学び、一人1テーマでそれぞれ研究を行っています。

## 密度汎関数理論(D3永井瞭)

エネルギー $E$ と密度 $\rho$ を関係づける汎関数 $E[\rho]$ を、多体波動関数の機械学習から構築する新たな方法を提案しました。

## 電子格子相互作用(D3石井浩平)

電子と原子核の相互作用によるバンドギャップの変化を予測するための計算手法を開発しました。

## 電極表面の研究(D2片岡佑太)

金電極の研究を行い、電極上での水素の量子拡散や燃料電池反応の様子を明らかにしました。

## 銅酸化物の電子状態(D1 A.N.Tatan)

最新の汎関数を用いて、(転移温度が高い)水銀系高温超伝導体の電子状態の特徴を明らかにしました。

## 界面の水・エタノール(M1 田部直哉)

界面のシミュレーションから非線形分極率を計算して実験の解釈を行っています。

## その他

計算物質科学の特徴は、研究対象を抽象化せずに具体的な物質を対象とします。そのためテーマは多数存在します。また、コンピュータやプログラミングが得意な研究者が多い分野です。

本研究室では、数値計算に基づく物性研究(物質の性質の研究)を行っています。計算物質科学の中の第一原理計算という分野の研究を行っています。これは、シュレディンガー方程式などの物理の基本方程式から出発して物性を解き明かすという研究で、(例えば惑星内部の高温高圧下の)未知の新物質であってもその物性を定量的に予測できるという特長があります。現行の第一原理計算はHohenberg-Kohnの定理に基づく密度汎関数理論に基づいていますが、本研究室ではこの理論を発展させると共に、それを複雑かつ機能性の高い物質に応用する研究を行っています。



助教 春山 潤

表面の第一原理計算を専門としています



杉野研究室のメンバー(正面玄関にて)

## その他の研究テーマ

## 燃料電池反応(富岳シミュレーション)

2名のポストドク(A.E.Flaviano,M.Shibghatullah)は笠松研究室(山形大)と連携して超大規模計算を行い、次世代型燃料電池の電極物質の探索を行っています。第一原理計算・モンテカルロ法・機械学習を用いた新たな手法を開発して研究を行っています。

## 酸素固体

物性研ポストドク(L.T.Anh)は高圧下での酸素の磁性や超伝導性を予測する研究に取り組んでいます。