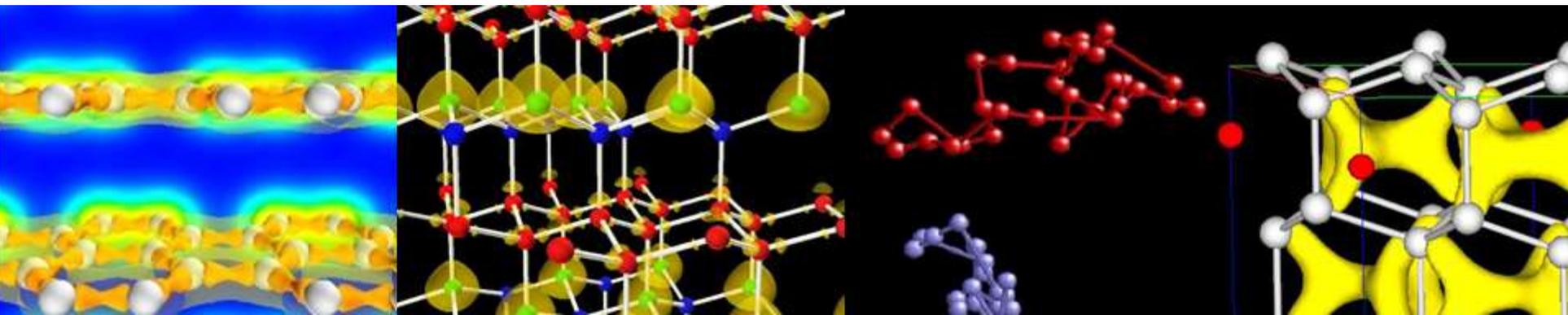


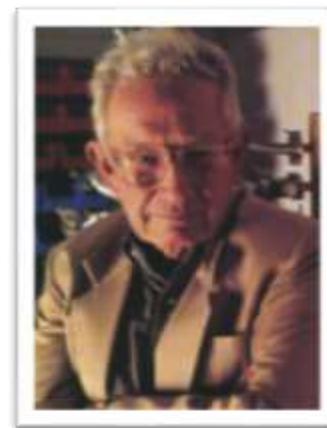
新物質・新材料の物理学

A3サブコース(物性理論) 常行真司
東大・院理・物理



物性物理学の研究対象

- (わりと身近な) 物質・材料の性質
- (わりと身近な) 空間・時間・エネルギースケール
- 何かしらの「秩序」, きわめて「多数」の粒子が集まったときに初めて現れる特徴・性質
- P.W. Anderson の言葉によれば,
‘More is different.’
(数が多いと何かが変わる)



1977年 ノーベル物理学賞
P.W. Anderson

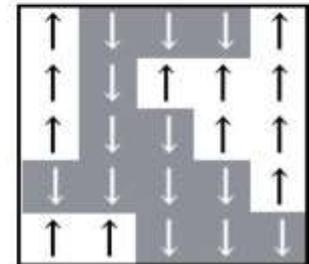
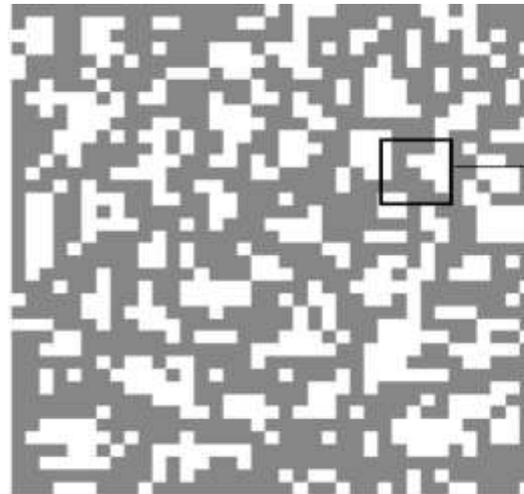
強磁性体



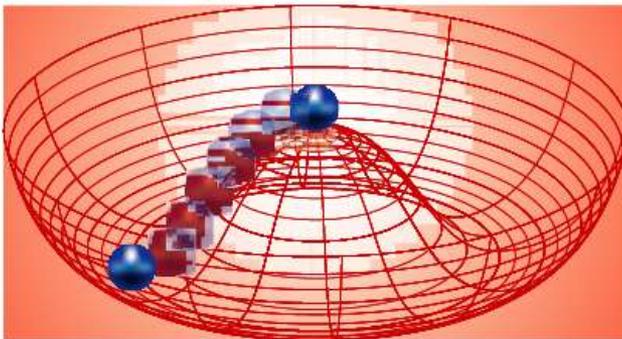
低温

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} S_{zi} S_{zj}$$

高温



‘自発的対称性の破れ’

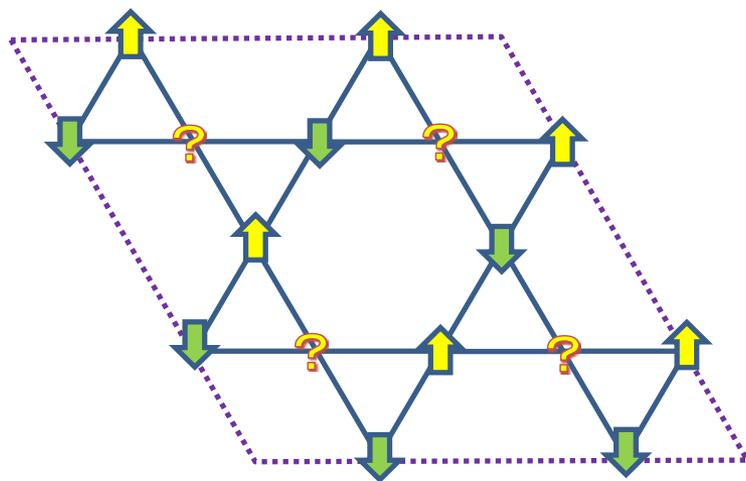


2009 ノーベル物理学賞
南部陽一郎氏

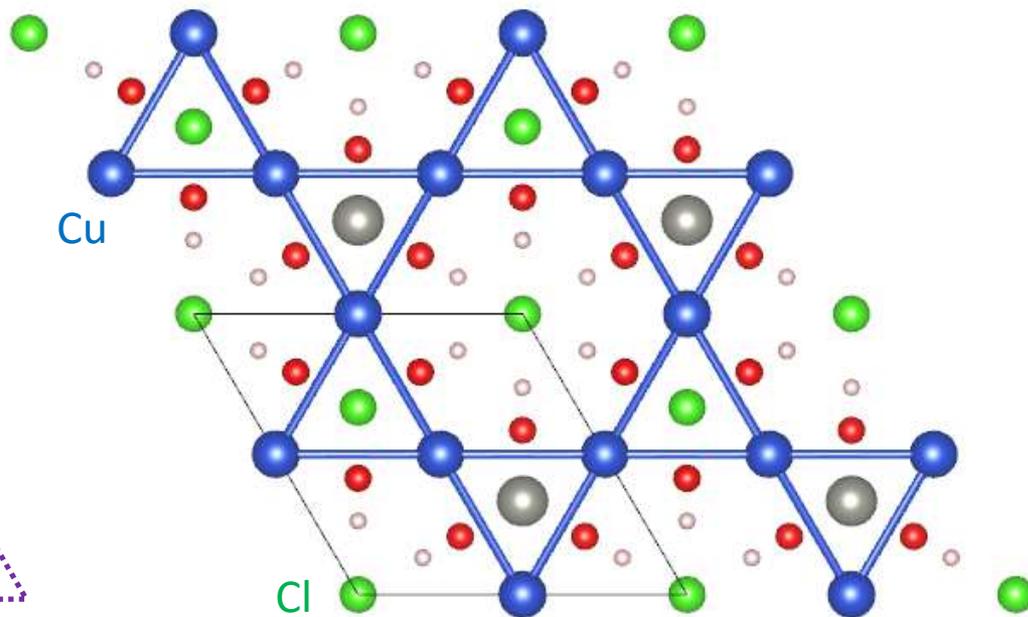


量子スピン液体

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j$$



カゴメ格子上の反強磁性スピン
フラストレーション系

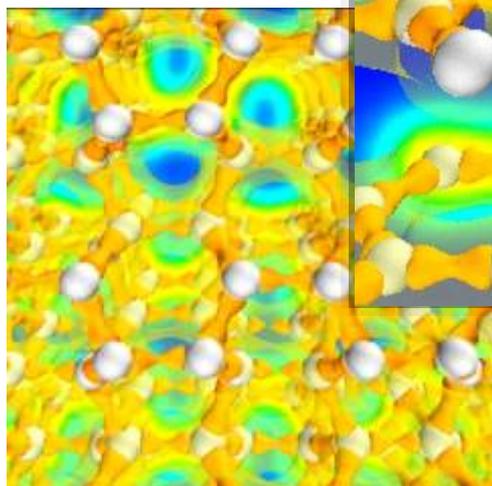
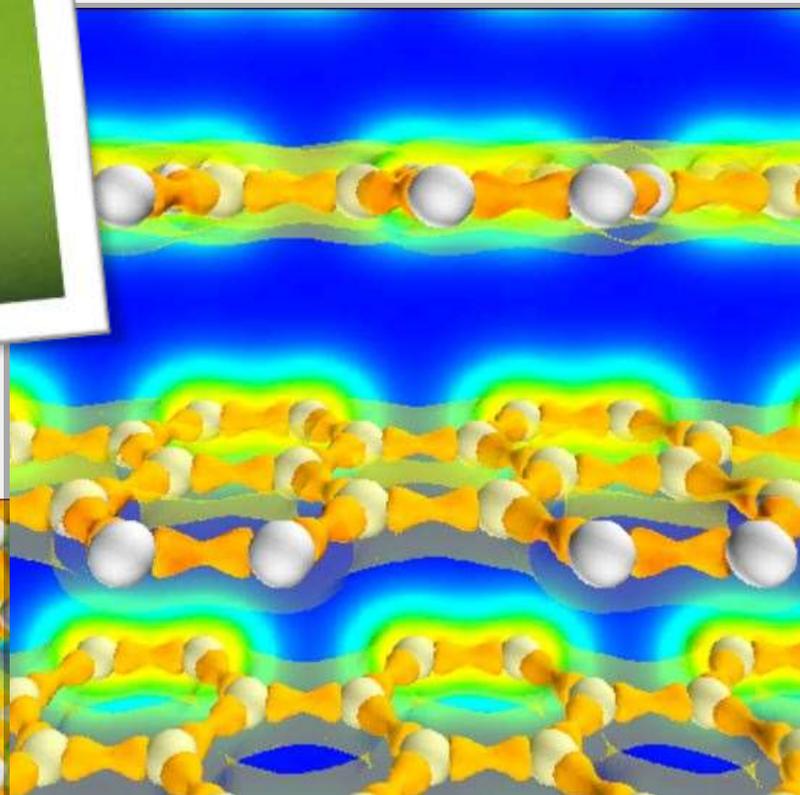


Herbertsmithite
 $\text{Cu}_3\text{ZnCl}_2(\text{OH})_6$

炭素 — 電子デバイス、電極から工具まで

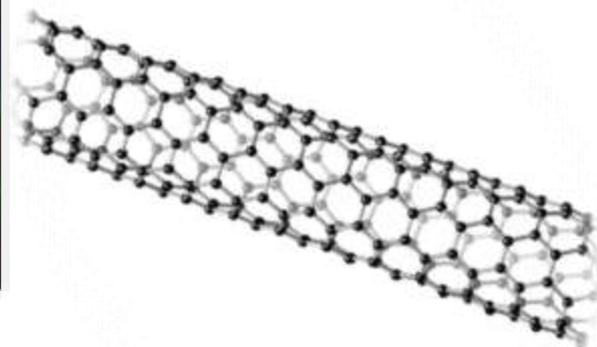
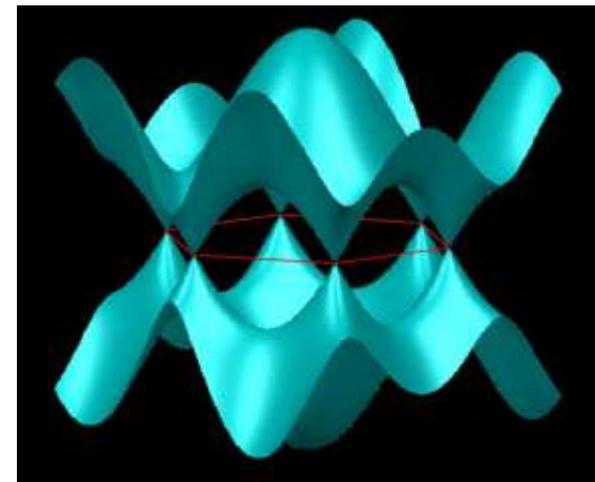


グラファイト



←ダイヤモンド

グラフェンの電子状態

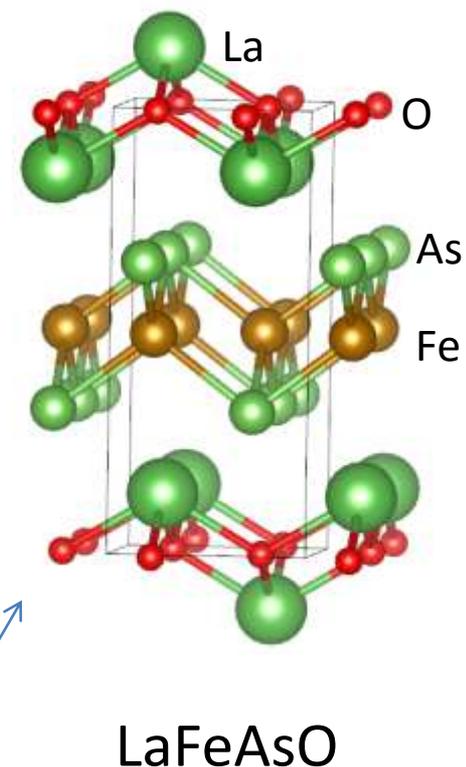
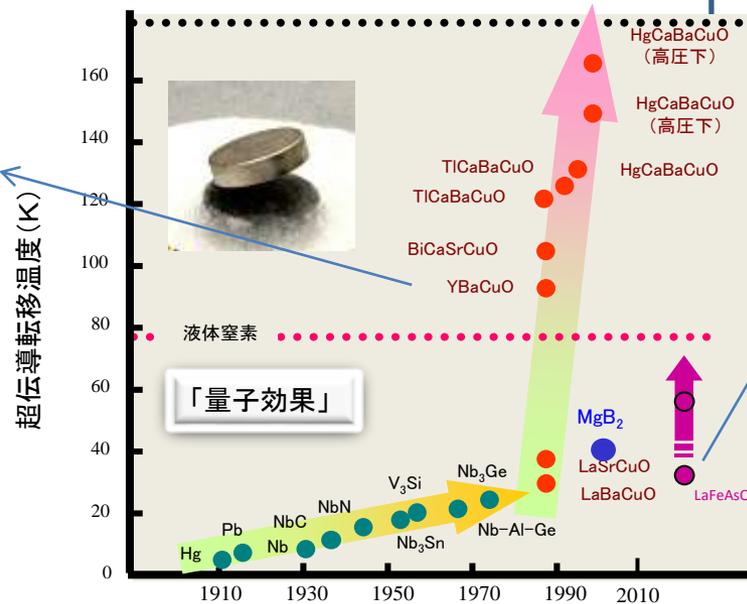
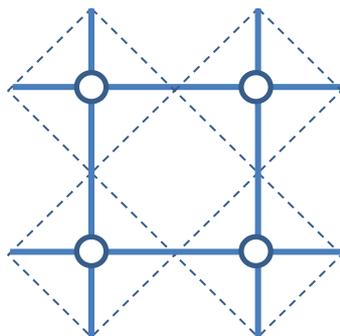
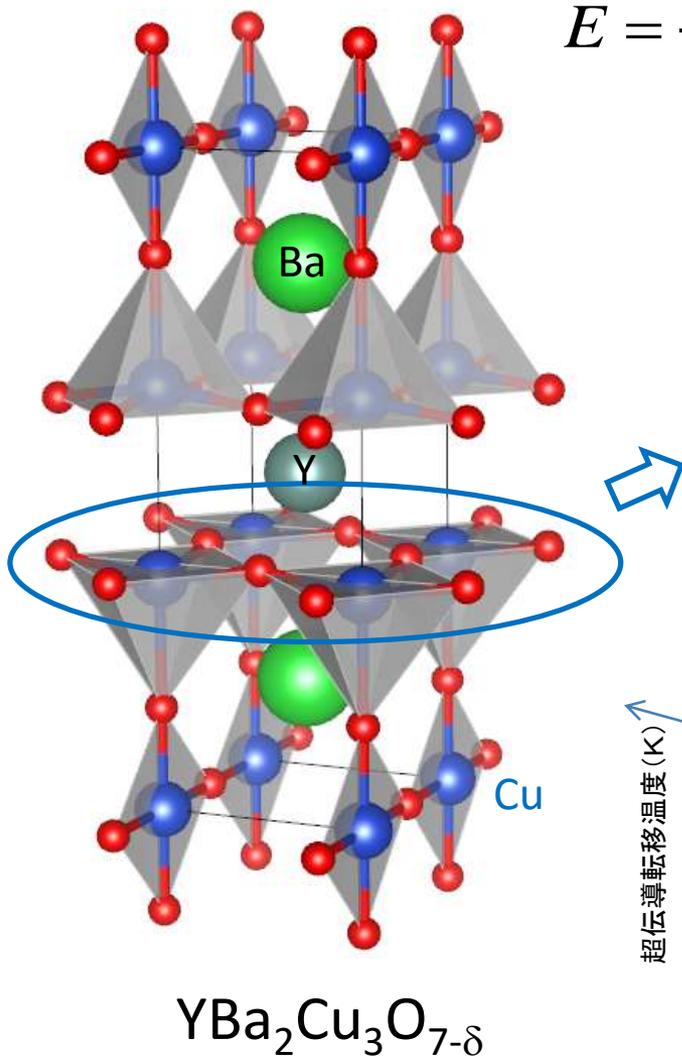


カーボンナノチューブ

高温超伝導

電子相関

$$E = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \dots$$



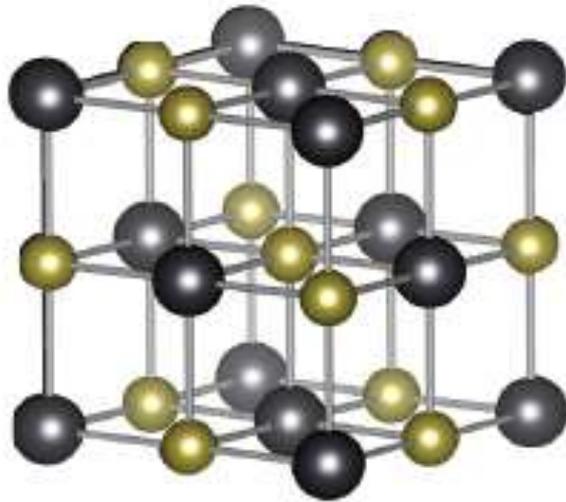
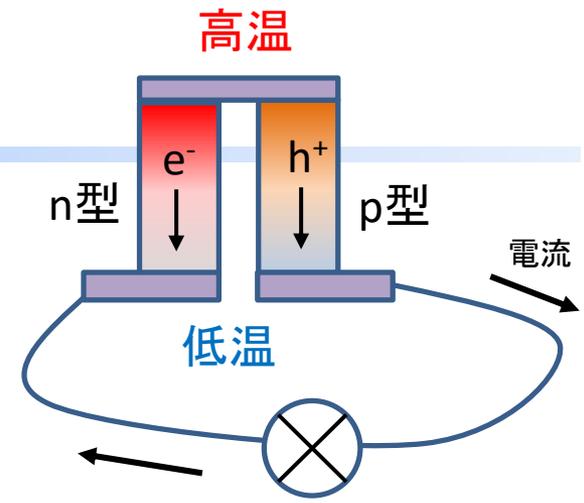
熱電材料

熱電材料の
無次元性能指数

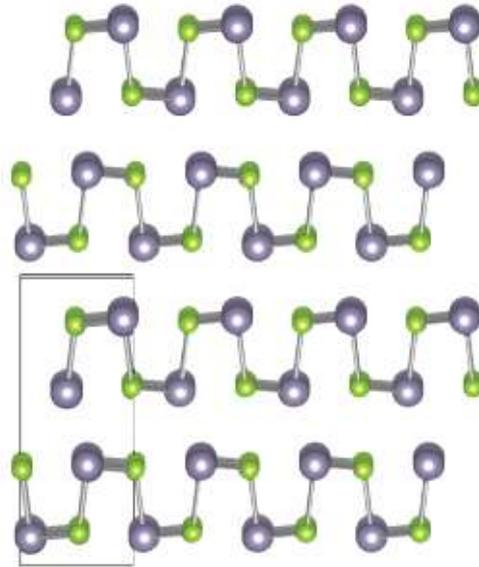
非調和効果

$$ZT = \frac{\sigma S^2 T}{\kappa_c + \kappa_l}$$

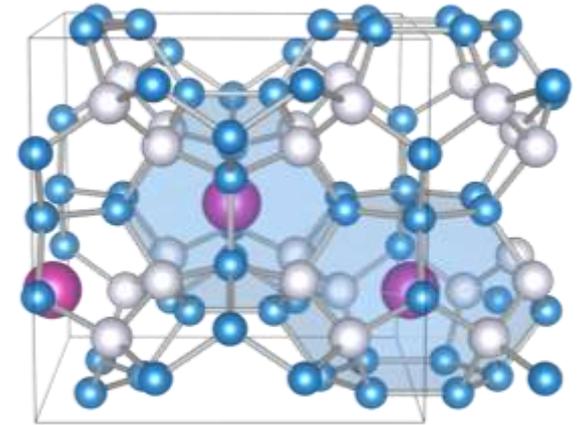
格子熱伝導率



PbTe



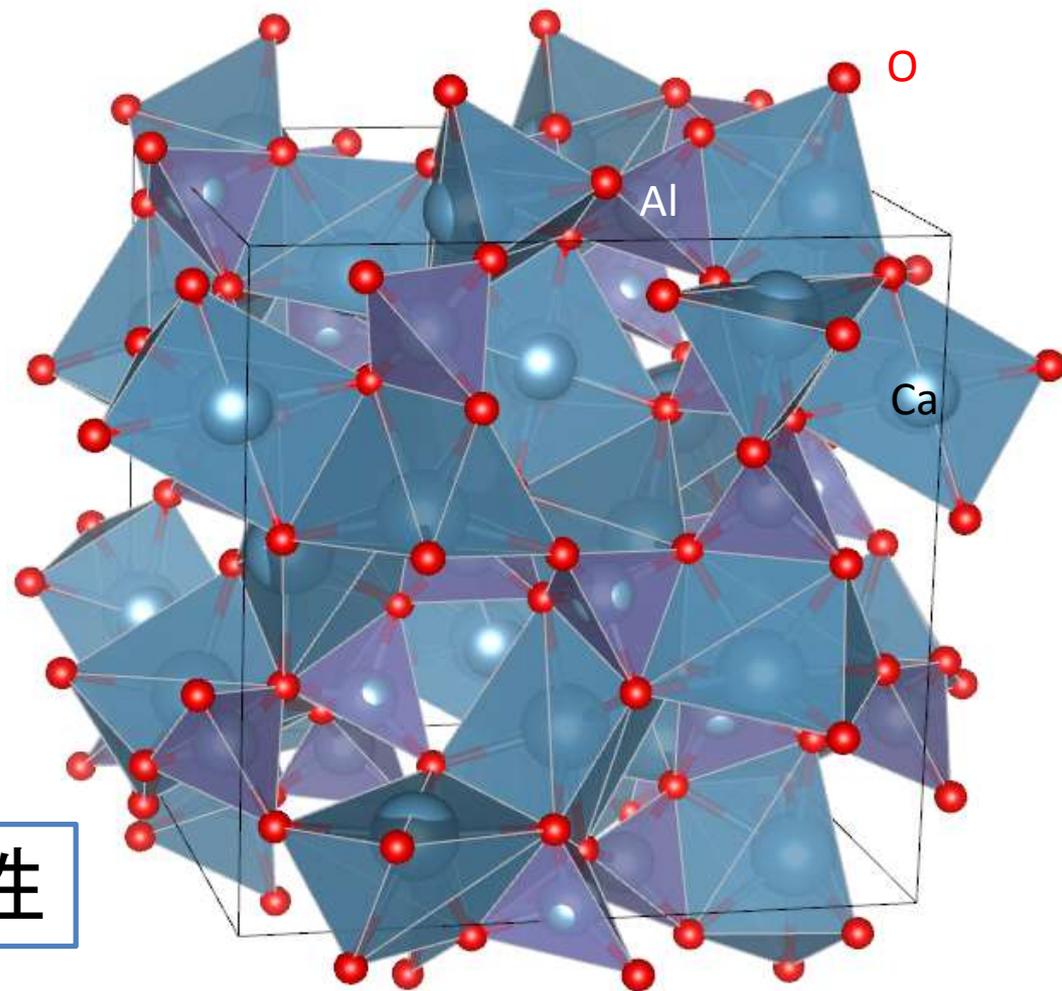
SnSe



Ba₈Ga₁₆Ge₃₀

電気を流すセメント C12A7:e⁻

- $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$
(C12A7:O²⁻)
- 酸素イオンを電子(e⁻)
に置換することで金属化
- **仕事関数 $\sim 2.4\text{eV}$**
(アルカリ金属なみ)
- Ru担持によりアンモニア合成触媒として利用可能



構造安定性 vs 反応性

第一原理からの計算機シミュレーション

原子・電子の基礎方程式

◆電子状態方程式

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r, t) \right] \varphi_i(r, t) = \varepsilon_i(t) \varphi_i(r, t)$$

The Nobel Prize in
Chemistry 1998



Walter Kohn John A. Pople

The Nobel Prize in
Chemistry 2013



Martin Karplus Michael Levitt Arieh Warshel

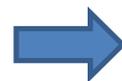
◆原子の運動方程式

$$M \frac{d^2}{dt^2} R(t) = -\nabla E(R(t))$$

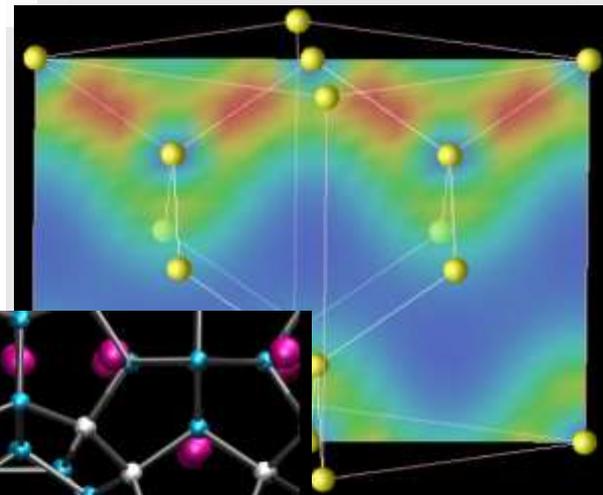


portrait of Newton
by Sir Godfrey Kneller

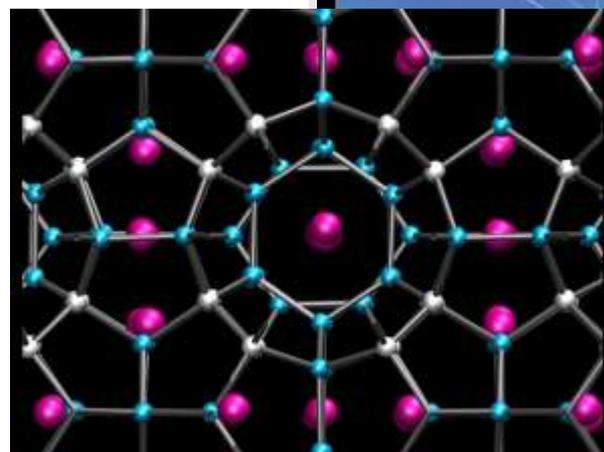
<http://www.newton.cam.ac.uk/art/portrait.html>



物質構造, 電子密度分布
電子状態, 電氣的・磁氣的・
光学的性質, 弾性,
熱力学特性などの物性



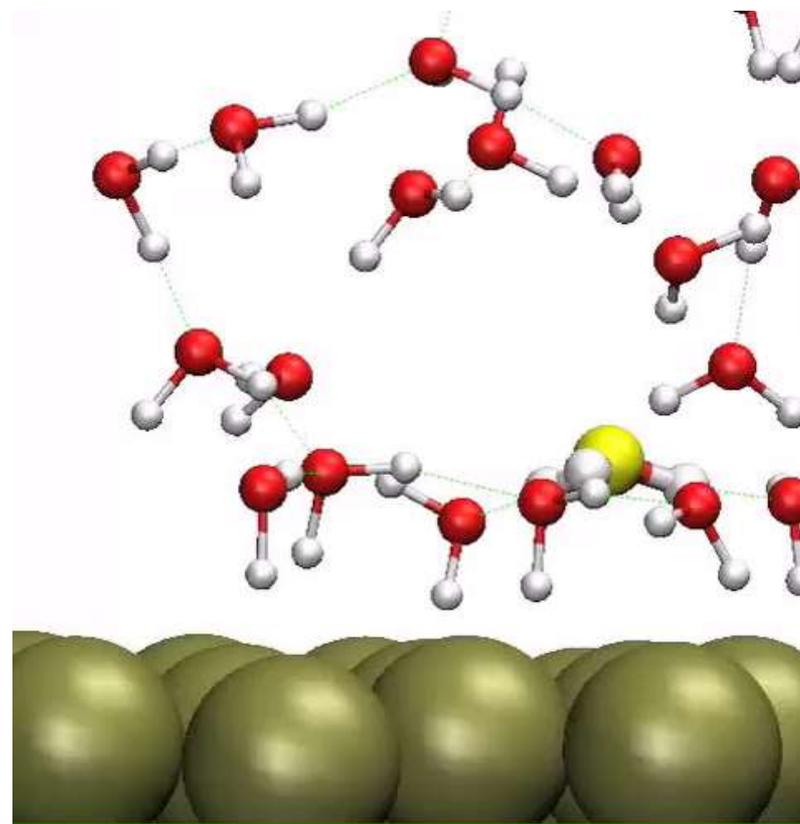
Si



クラスレート

計算機シミュレーションの役割

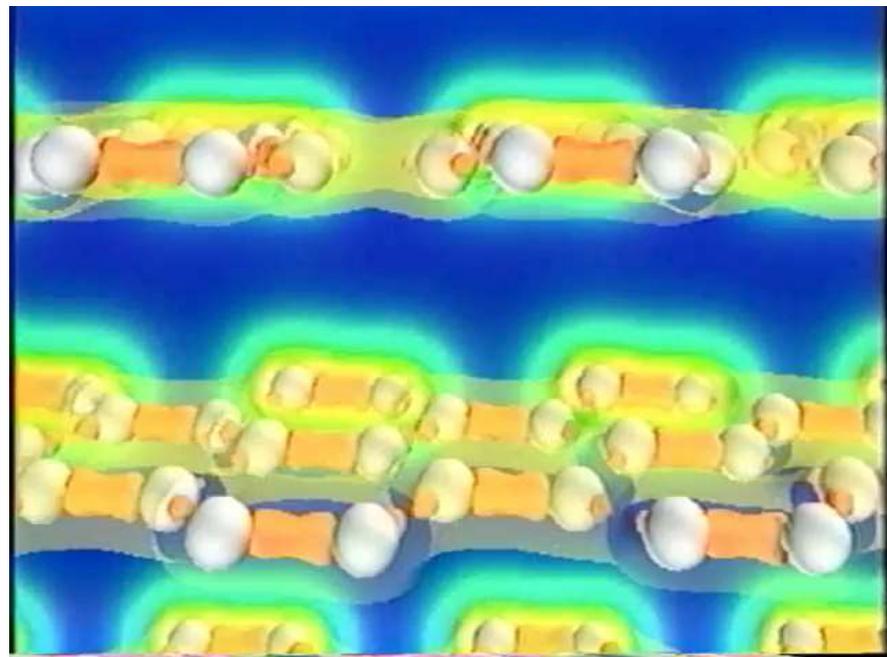
- 現実を模倣し, 実験では見えないものを「見る」
 - 例: 車の衝突シミュレーション
 - 例: 金属電極での電気化学反応



物性研・杉野修グループ

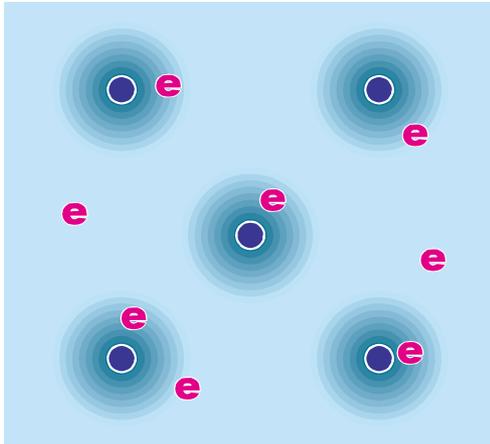
計算機シミュレーションの役割

- 現実を模倣し, 実験では見えないものを「見る」
 - 例: 車の衝突シミュレーション
 - 例: 金属電極での電気化学反応
- 実験の難しい世界を作り出す「仮想実験」
 - 例: 津波の被害予測
 - 例: 超高温, 超高压下での物質変化



Density Functional Theory (DFT)

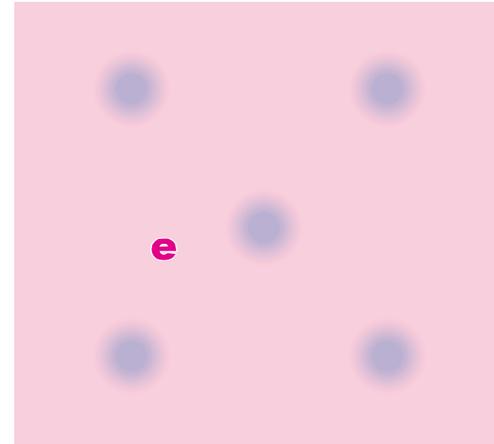
Many-body problem of interacting electrons



Schroedinger equation



One-electron problem in an effective potential



Kohn-Sham equation

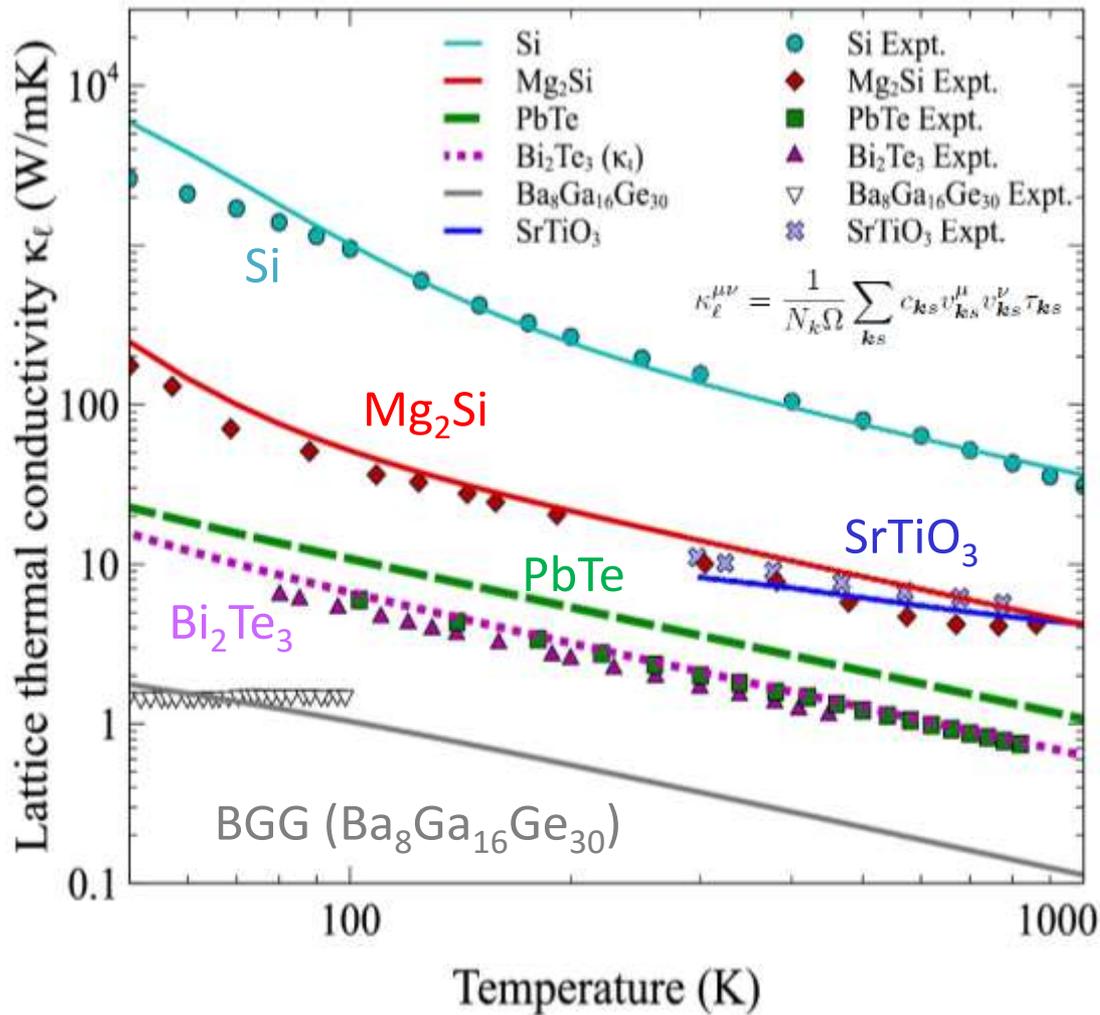
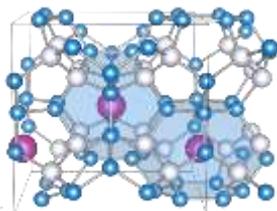
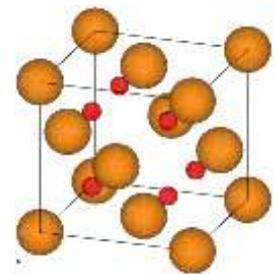
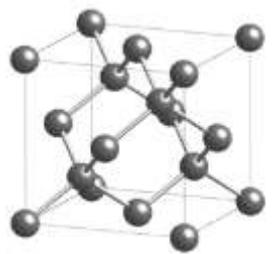
P. Hohenberg & W. Kohn
'INHOMOGENEOUS ELECTRON GAS'
Phys. Rev. 136, B864 (1964). (Cited 10,713 times)

W. Kohn & L.J. Sham
'SELF-CONSISTENT EQUATIONS INCLUDING EXCHANGE AND
CORRELATION EFFECTS'
Phys. Rev. 140, 1133 (1965). (Cited 21,565 times)

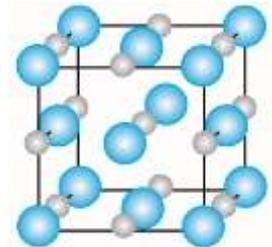
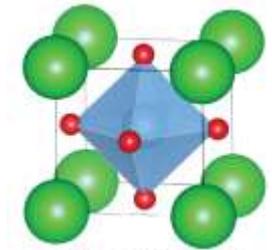


Nobel Laureate, 1998.
Walter Kohn

さまざまな物質の格子熱伝導率

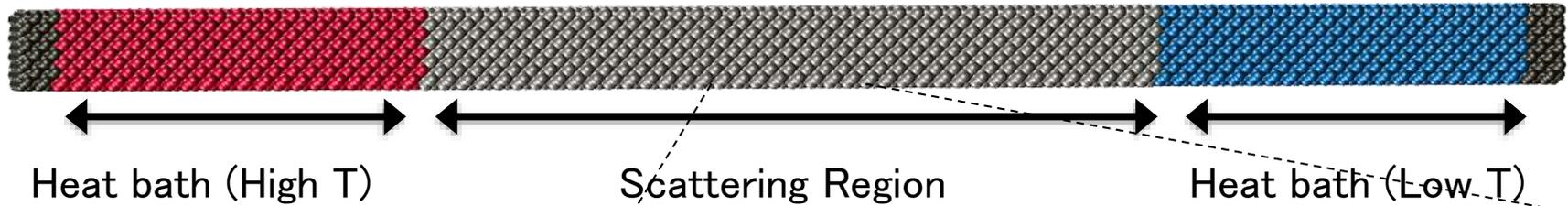


実験: シンボル
計算: 線

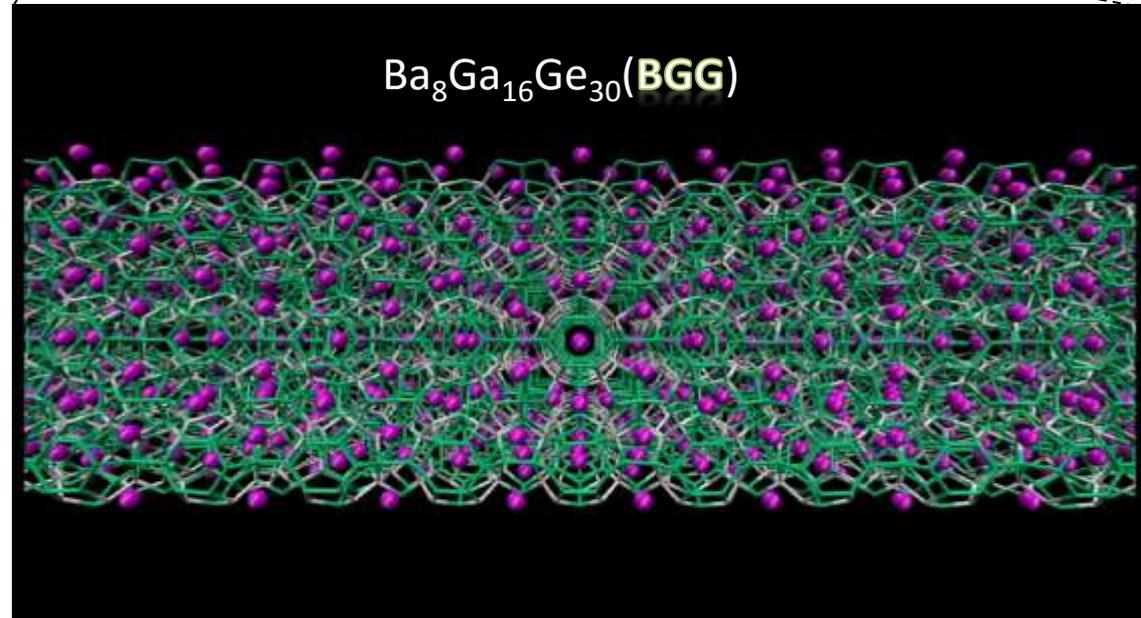
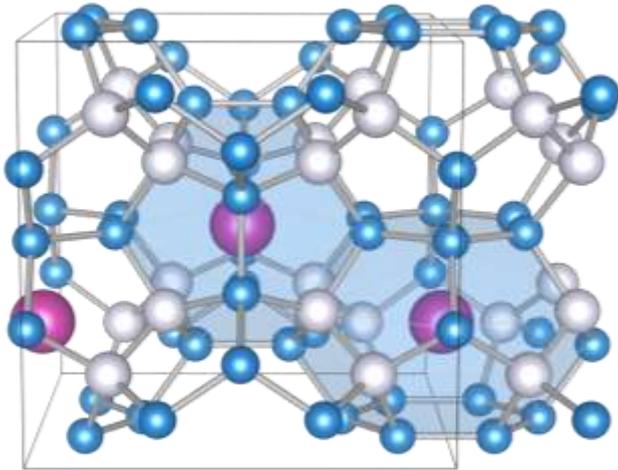


Method: T. Tadano, Y. Gohda and S. Tsuneyuki, J. Phys.: Condens. Matter 26, 225402 (2014).
 BGG: T. Tadano, Y. Gohda and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. Lett. 114, 095501 (2015).
 SrTiO3: T. Tadano and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. B 92, 054301 (2015).

Type-I Clathrate: $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ (BGG)



$$\kappa = -j / \left(\frac{dT}{dz} \right)$$

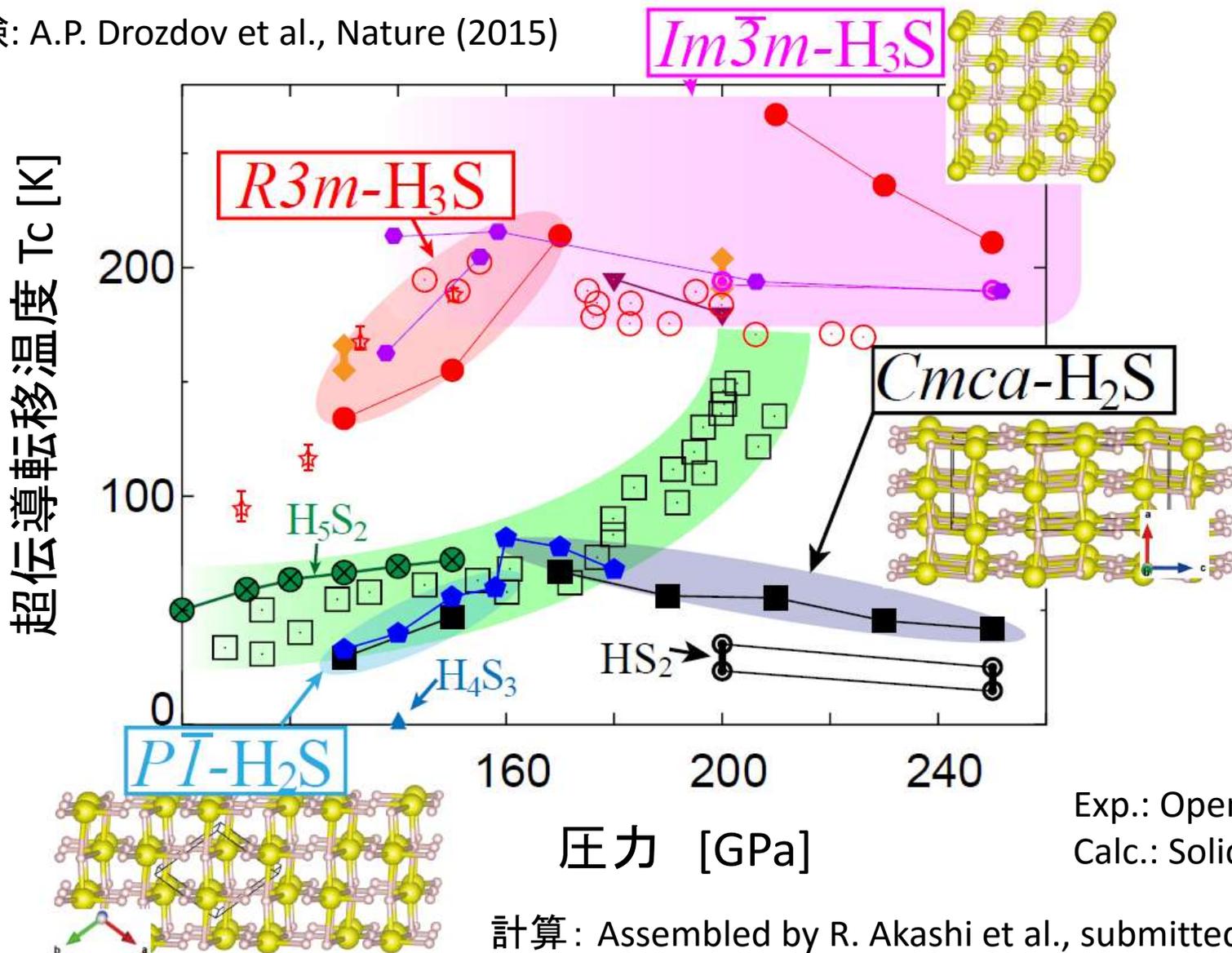


First-Principles-based MD simulation of 32076 atoms

	Exp.	Calc.
Lattice Thermal Conductivity [W/mK]	1.5-2.0	1.4 ± 0.2

硫化水素(H_xS)の高温超伝導

実験: A.P. Drozdov et al., Nature (2015)



Exp.: Open symbols
Calc.: Solid symbols

まとめ

- 新物質・新材料 \Leftrightarrow あたらしい物理

物性物理 A3,A4

- 計算機シミュレーションを使った物性研究は、
定性的な現象解明から定量的な物性解析、予測、そして物
質をデザインする時代へ

