

# 先端科学技術セミナー

## 「計算物理の物質科学への応用」

担当 草部 浩一

(大学院基礎工学研究科・物質創成専攻・  
未来物質領域・新物質創製講座・准教授)



---

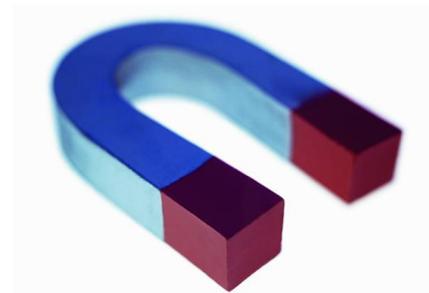
Section I

はじめに

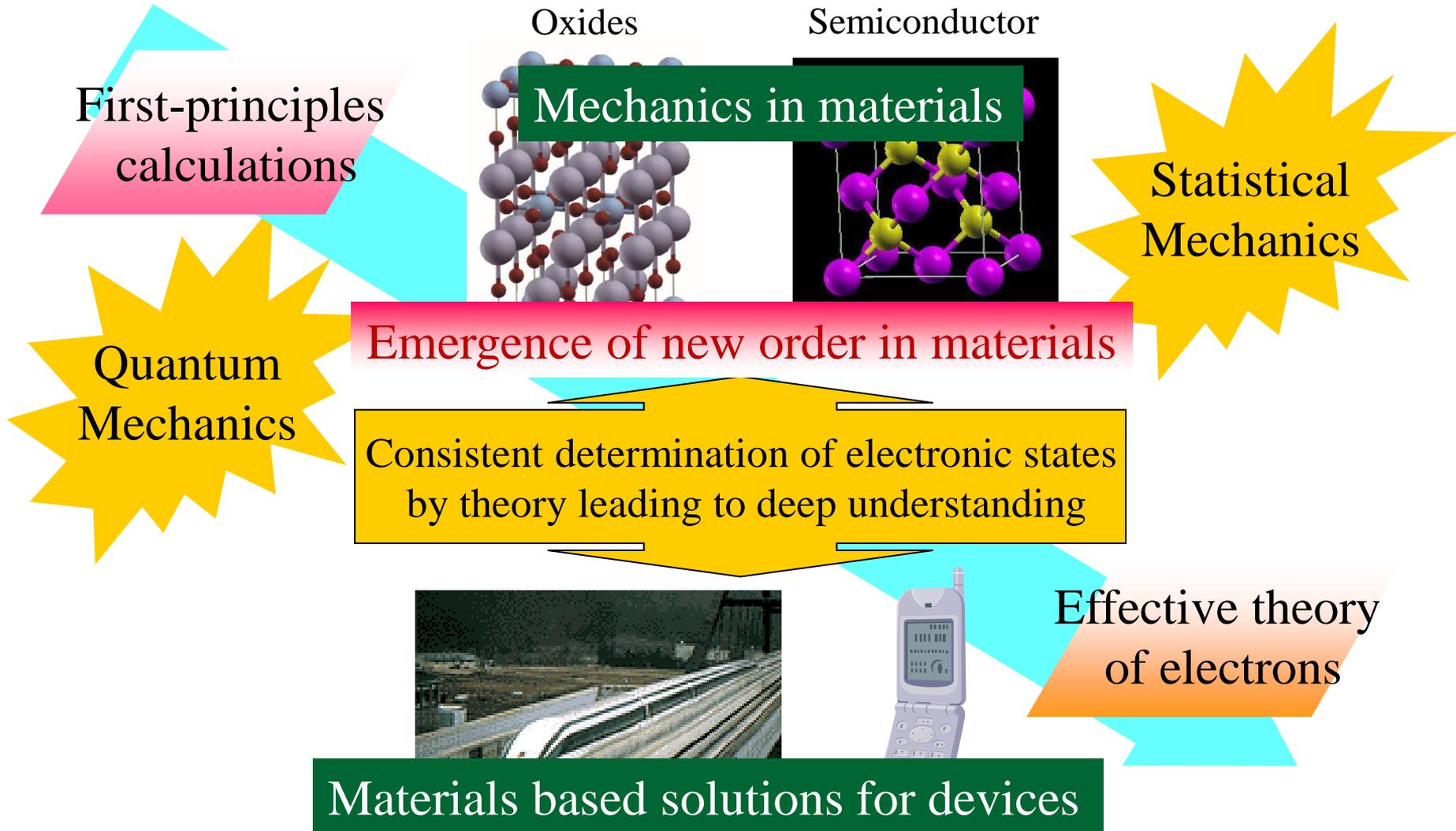
---

# 量子力学によって、何がどこまでできるのだろうか？

1. 現代の計算物理学の応用
  1. 物質を掌る力学の理解
  2. 物質機能の解明による応用
    1. 超伝導体
    2. 実用触媒
2. 応用から発する次世代計算物理学
  1. 第一原理の探求
  2. 未解決問題に解を提示

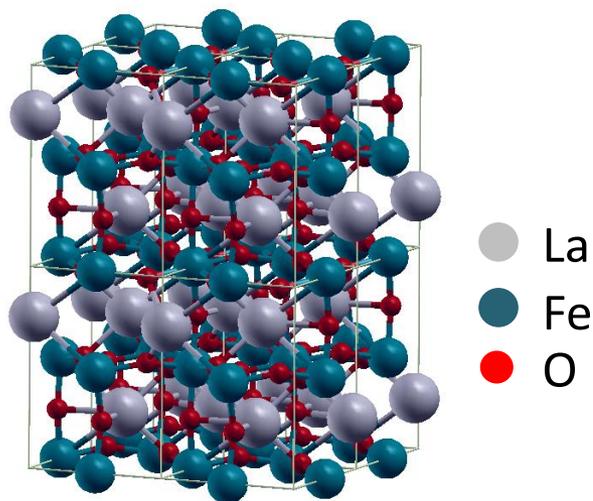


# 研究方針I



# そこで、何が必要とされている？

1. ナノ物質の構造から決めよう！
2. 強相関電子構造を知ろう！

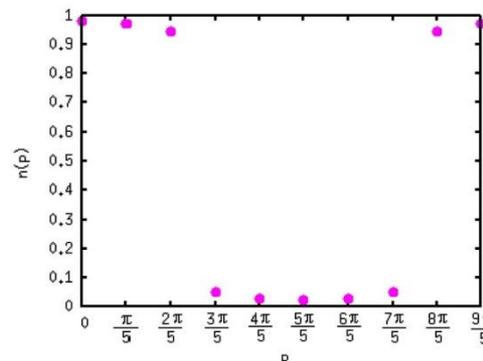
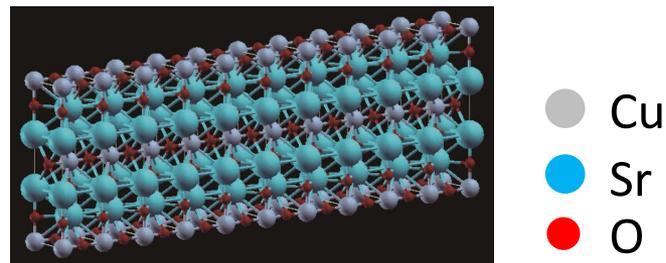


モット絶縁体  $\text{LaFeO}_3$

- 電子状態決定が難しいはずだが、
- 精度の高い構造決定が出来る。

By H. Kizaki

密度汎関数法は議論の出発点に使える！



モット絶縁体  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$

- 絶対零度でも運動量分布関数がフェルミ分布関数でない、
- これが強相関電子系の効果。

密度汎関数法の枠組みで計算出来る！

---

Section II

# 基本原理



# 電子系に対するSchrödinger 方程式

- $N = \sum_I Z_I N_I$  を満たす  $N$ -電子系の定常状態は、次式で調べる。

$$\begin{aligned} H_{el} \Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_N) \\ = \left[ - \sum_{i=1}^N \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i=1}^N v_{ext}(\mathbf{r}_i) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_N) \\ = E \Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_N). \end{aligned}$$

当然ながら、「これは何故？」という疑問にも答えよう。

例えば

身の回りに作れる定常状態では電荷中性条件が成り立つ。

# 電子波動関数がもつ性質

- 電子はスピン  $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$  をもっている。すると、磁気モーメント  $\boldsymbol{\mu} = -g\mu_B \mathbf{S}$  (真空中でのg-factor :  $g=2.0023$ ) が現れる。

そして、
$$\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_N).$$

なるSchrödinger方程式の解が「多スレータ積」だからこそ、  
「多彩な運動」が現れる。← **ここを楽しまないと損だ！**

# 難しいのだろうか？

- 世界標準で考えて欲しい。
  - 専門家の意見に見る Kusakabe theory は、
    - 説明を加えて貰えばOK出せる。(EUの専門家)
    - 表式を見れば納得。(USで多数のPD)
    - 難しい。(JPの複数の理論家、しかしこれは?????)
- 皆さんは？  
⇒ ご自身で判断してください。
- では、研究紹介を始めましょう。

# Theory of phase transitions

Cf. K.K. & Maruyama,  
arXiv:1012.2964

- Example 1. Magnetic systems:

$$G(T, h) = -k_B T \ln \left[ \text{Tr} \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} \left( \hat{H}_{spin} - h \sum_{j=1}^{N_{spin}} \hat{S}_j^z \right) \right\} \right],$$

$$\hat{H}_{spin} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad \longrightarrow \quad M = N_{spin} m = - \left( \frac{\partial G(T, h)}{\partial h} \right)_T.$$

$m$ : magnetization as the order parameter.

- Example 2. Electron systems at  $T=0$ :

$$E[v_{ext}] = \min_{\Psi} \left[ \langle \Psi | [\hat{T} + \hat{V}_{ee}] \Psi \rangle + \int d^3 r v_{ext}(\mathbf{r}) n_{\Psi}(\mathbf{r}) \right] \longrightarrow n(\mathbf{r}) = \left( \frac{\delta E[v_{ext}]}{\delta v_{ext}(\mathbf{r})} \right)_{T=0}.$$

$n$ : charge density as the order parameter.

- DFT tells us that,

$$E[v_{ext}] = \min_n \left[ \min_{\Psi \rightarrow n} \langle \Psi | [\hat{T} + \hat{V}_{ee}] \Psi \rangle + \int d^3 r v_{ext}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) \right]$$

$E[v_{ext}]$  is concave.  
It is continuous for  $v_{ext}$   
in  $L^{3/2} + L^{\infty}$ . (Lieb, 1982)

These derivatives are ill-defined in general. But,  $m$  and  $n(\mathbf{r})$  are order parameters.

# Another variational principle

Cf. K.K. & Maruyama,  
arXiv:1012.2964

- When we can divide a set of wave functions into subsets by
    - Symmetry
    - An order parameter
- we can have another variational principle.

Ex. Spatial Symmetry

electron density  $n(\mathbf{r})$  as

in an electron system

**Density Functional  
Variational Theory  
by K.K. 2009.**

The lowest state  
in  $p_x$ -waves

in  $\psi \propto 3z^2 - r^2$



---

Section III

# 計算法と応用例

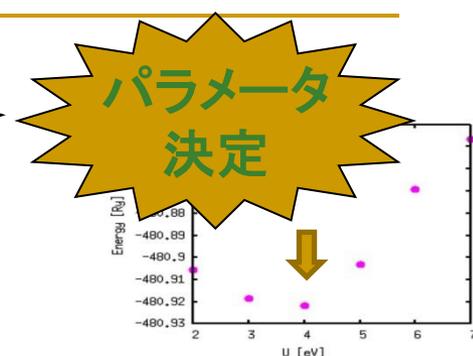
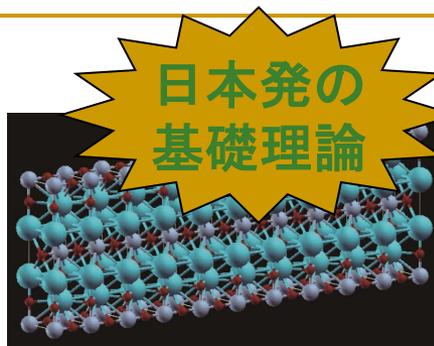


# 革新的電子状態計算

- 強相関系を含む全ての定常電子状態に適用可:
  - K. Kusakabe, JPSJ 70, 2038 (2001) による拡張コーン・シャム方程式の方法
- 揺らぎ参照型 多配置参照密度汎関数理論:
  - K. Kusakabe, et al. J. Phys. Condens. Matter 19, 445009 (2007) による参照揺らぎ一意性証明と実施例
- 密度汎関数変分理論による厳密な定式化:
  - K. Kusakabe, JPSJ 78, 114716 (2009) による、全ての密度汎関数法による実用計算に適用される変分原理による「モデル空間理論」← 本願は厳密な定理に基づく。

強相関電子系を含む物質の構造・電子状態決定と物質設計が可能

# 従来法との比較



	単配置参照 コーン・シャム DFT-LDA	単配置参照 LDA+U	単配置参照ハ イブリッド法	多配置参照ハ イブリッド法	多配置参照拡 張コーン・シャ ム法
参考文献	W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. <b>140</b> (1965) A1133.	V.I. Anisimov, et al. PRB <b>44</b> (1991) 943.	A.D. Becke, J. Chem. Phys. <b>104</b> (1996) 1040.	A. Savin, et al. Int. J. Quantum Chem. <b>56</b> (1995) 327.	K. Kusakabe, JPSJ <b>70</b> (2001) 2038; <i>ibid</i> <b>78</b> (2009) 114716.
自己無撞着性	○	△	△	△	○
パラメータの内 部決定	外挿	△ <sup>2)</sup>	パラメータ 理論	パラメータ 理論	○
変分原理提供	×	×	×	×	○

- 1) Multi-reference means that a multi-Slater determinant is used to reproduce correlation effects and quantum entanglement in correlated electron systems.
- 2) In several versions of LDA+U, ab-initio-determination techniques are proposed but suffered from the double counting problem. It is solved by DFVT in our strategy.

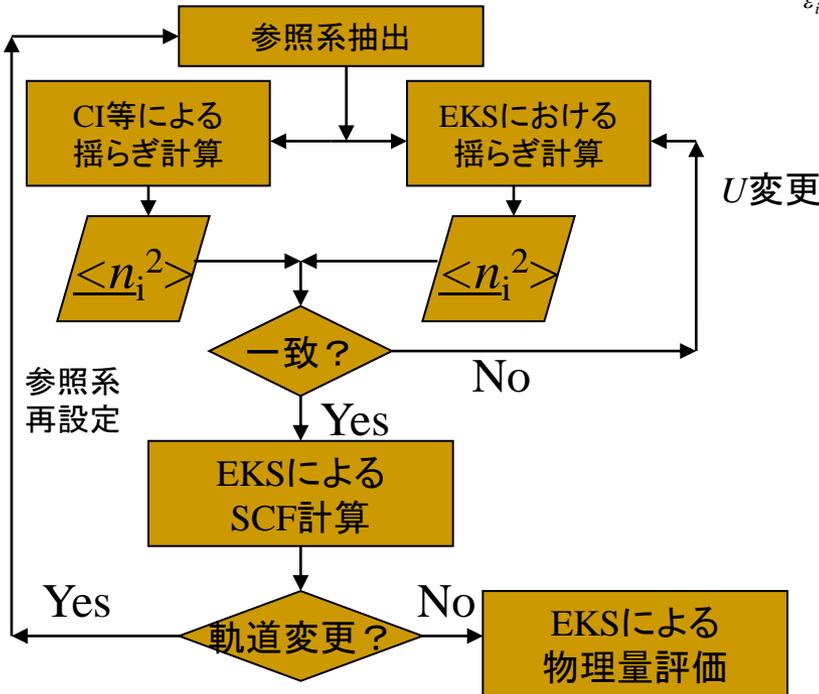
# アルゴリズム

$$E_{rxc}[n_\Psi] \approx E_{xc}[n_\Psi] \dots (2')$$

及び、参照系の揺らぎを参照

参照系の計算にCI計算等が必要

SCF(自己無撞着)計算例



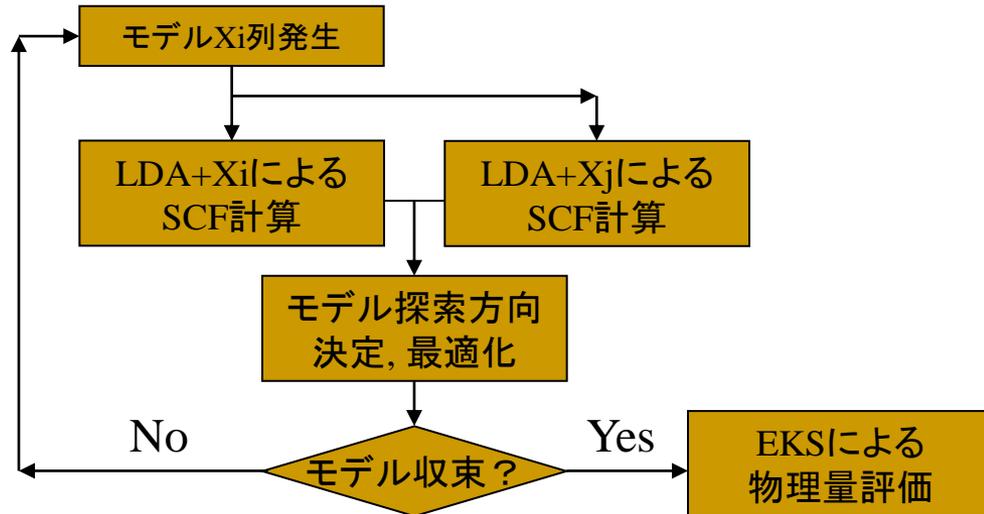
$$E_0 \leq \min_i \left\{ \min_\Psi \bar{G}_{X_i, \varepsilon_i, g_i}[\Psi] + \Delta E_{X_i, \varepsilon_i, g_i}[\Psi_{X_i, \varepsilon_i, g_i}] \right\}$$

$$\bar{G}_{X_i, \varepsilon_i, g_i}[\Psi] = \langle \Psi | \hat{T} + \hat{V}_{red}^{X_i} | \Psi \rangle + \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n_\Psi(\mathbf{r}) n_\Psi(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{\varepsilon_i}^{local}[\Psi] + E_{g_i}^{non-local}[\Psi] + \int d\mathbf{r} v_{ext}(\mathbf{r}) n_\Psi(\mathbf{r})$$

$$\Delta E_{X_i, \varepsilon_i, g_i}[\Psi]$$

$$= \frac{e^2}{2} \int d\lambda \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left\langle \Psi_{n_\Psi}^\lambda \left| : (\hat{n}(\mathbf{r}) - n_\Psi(\mathbf{r})) (\hat{n}(\mathbf{r}') - n_\Psi(\mathbf{r}')) : \right| \Psi_{n_\Psi}^\lambda \right\rangle - E_{\varepsilon_i}^{local}[\Psi] - E_{g_i}^{non-local}[\Psi] + \min_{\Psi' \rightarrow n_\Psi} \langle \Psi' | \hat{T} | \Psi' \rangle - \min_{\Psi' \rightarrow n_\Psi} \langle \Psi' | \hat{T} + \hat{V}_{red}^{X_i} | \Psi' \rangle$$

上記のモデルに関する最適化問題を解くことで、厳密解に至る。



# 適用される範囲

- この強相関電子系の設計法は、
  - 生活環境を含む通常的环境下で利用される物質の性質を電子計算機利用により理論予測する方法が適用される
    - 触媒設計、医薬品設計 (化学反応の反応活性点、遷移状態)
    - 強誘電性デバイス設計、マルチフェロイック物質設計 (電荷・軌道の強い応答)
    - 巨大磁気応答物質設計、スピン量子デバイス設計 (スピン自由度の量子効果)
    - 高温超伝導体設計 (超流体をなす量子秩序状態)

など、全ての応用分野に適用される。

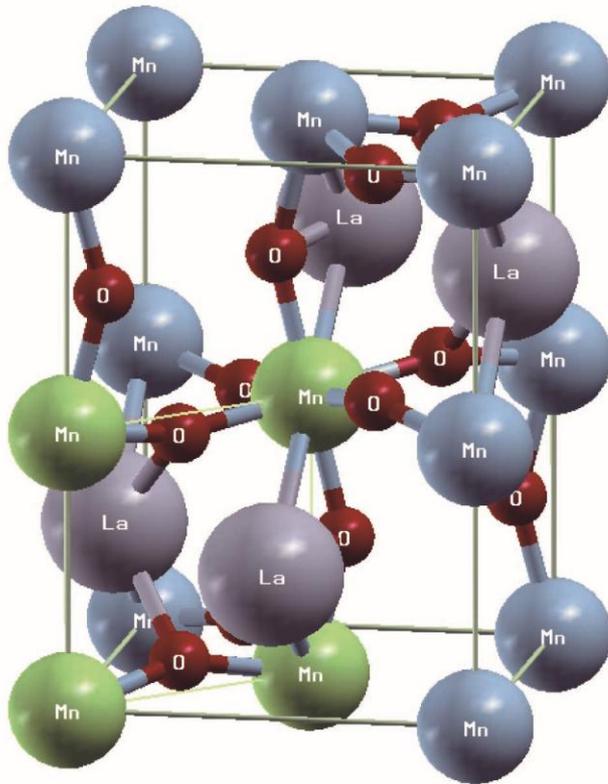
「この設計法をシミュレーションで実現する唯一の方法論」

として「密度汎関数変分理論」が位置付けられる。

# 計算事例: $\text{LaMnO}_3$ の自己無撞着計算

スピン・軌道・電荷結合系

物質設計が可能

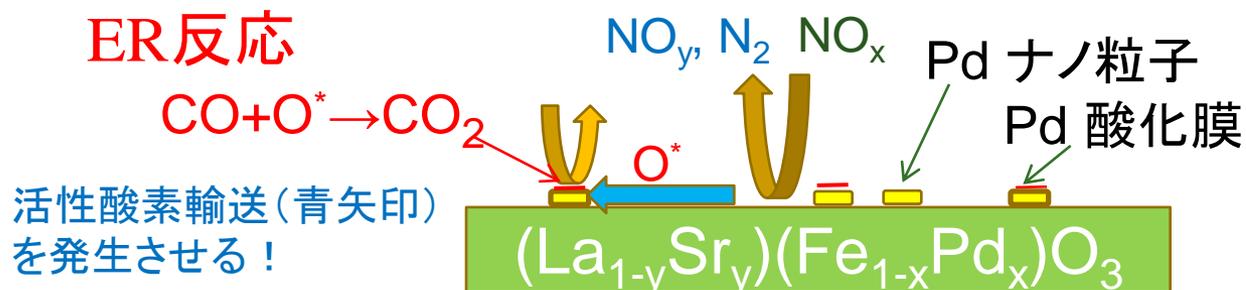


- この方法によると、
  - 多軌道系の有効相互作用
  - フェルミ準位近傍での量子揺らぎ
  - ワニエ・ブロッホ表示の双方を自己無撞着に決定可能。
- これにより原子間力・応力の決定が出来る。

# 固体遥動性触媒の設計

新規発明！

酸化物上の自己形成遷移金属ナノ粒子上のサイクル反応



活性酸素 $\text{O}^*$ の拡散において、表面拡散と基板中の固体拡散の双方が許されることが重要。

Pdナノ粒子の析出を通して構造を形成！  
Pdナノ粒子上の酸素遥動で活性向上！

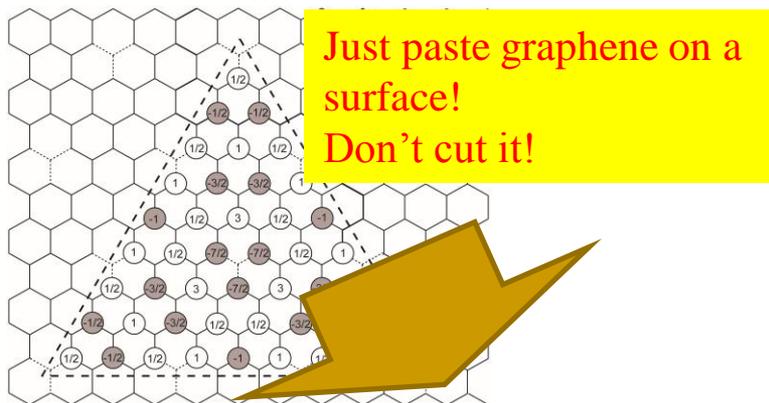
- CO, HC酸化プロセス  
金属ナノ粒子上の酸化被膜

- $\text{NO}_x$ 還元プロセス  
酸化物上の欠陥、酸素空孔

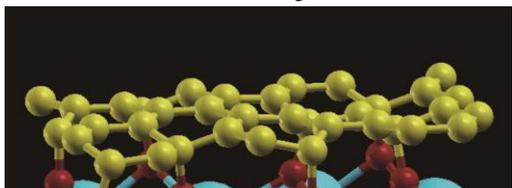
# グラフェン・量子デバイス設計

## 物質構造の決定

### ■ Process Design



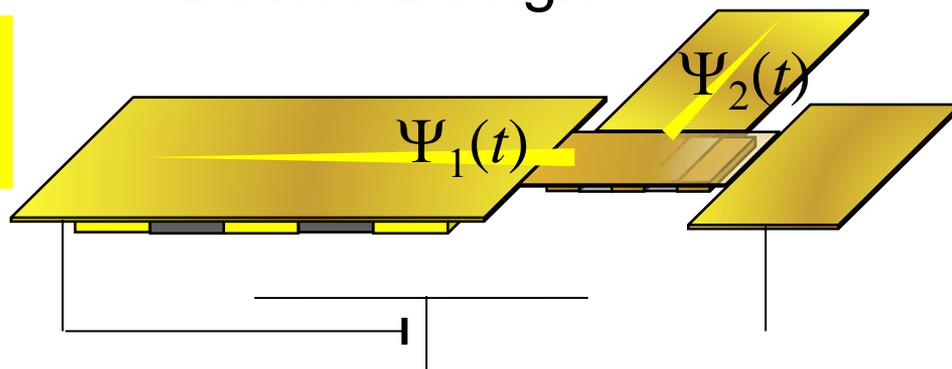
- Confirm by simulation



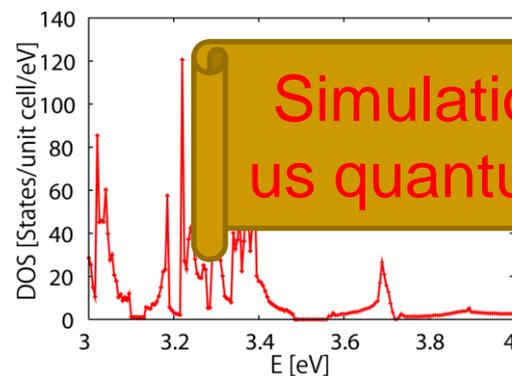
Simulation tells us  
new states

## 量子デバイス機能の設計

### ■ Device Design

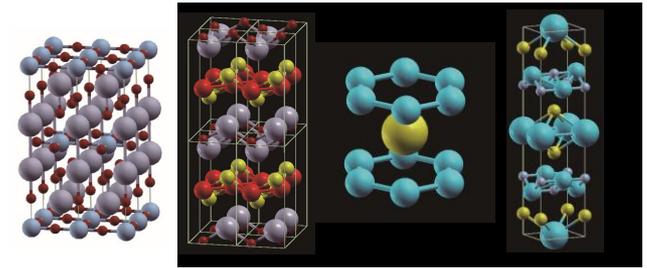


- Confirm by simulation



Simulation suggests  
us quantum operation

# 層状超伝導体設計



## 高温超伝導体の特徴

- 銅酸化物、鉄ヒ素、 $\text{MgB}_2$ 、 $\text{MnX}$ に共通の属性発見！
  - 層状高温超伝導体のバンド構造：
    - フェルミ準位に層間分散消滅バンドが存在。
    - 数eV以内の層間に渡る非占有軌道が存在。
- ⇒ 相関効果起源のペアホッピングが発生！（検証中）

## 密度汎関数変分理論により設計

- 相関効果による相転移現象を確認可能。
  - 有効2体相互作用を含むモデルが定められる。
  - 収束を判定可能。
  - 原子間力による構造最適化計算の実施が可能。
- ⇒ 「設計」を行う立場から強相関電子系の決定が出来る唯一の方法がある。（厳密な定式化を提供済み）

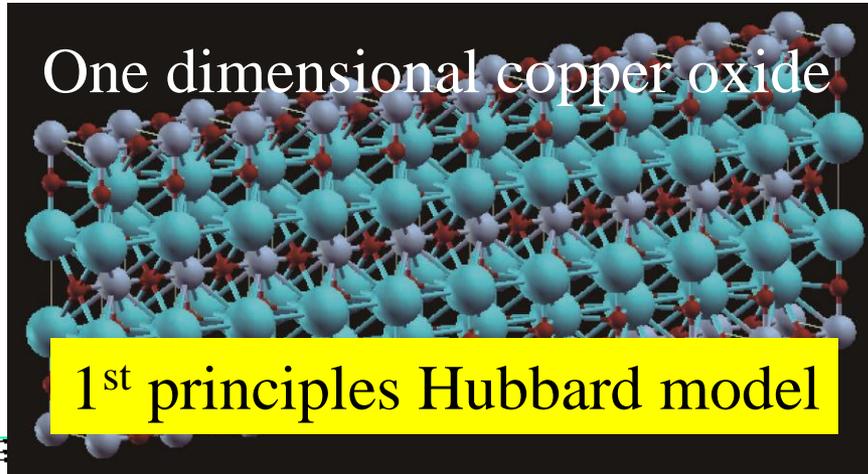
---

Section IV

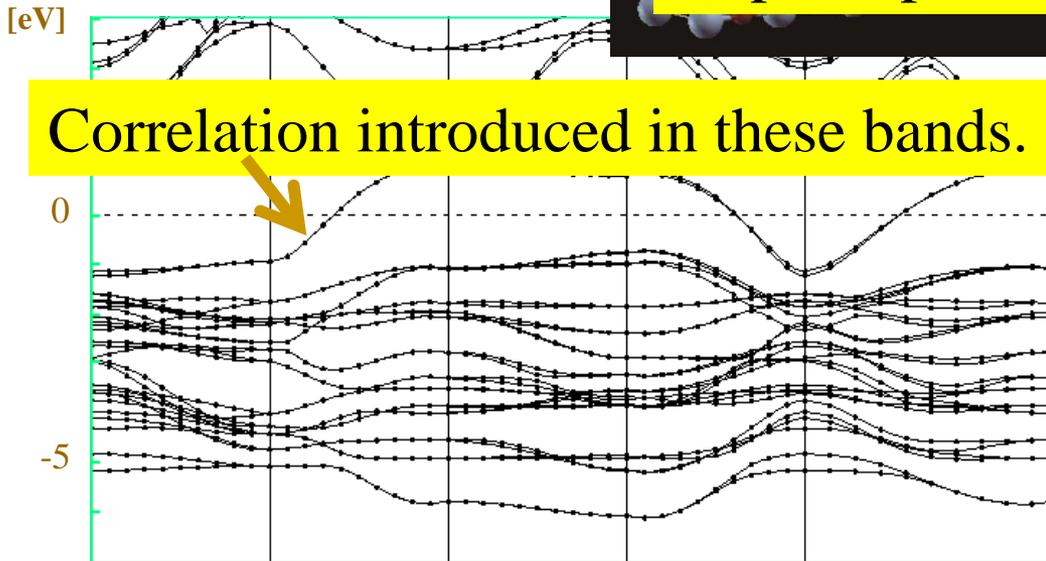
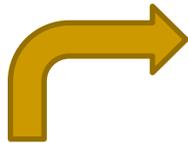
# 強相関モデルの決定



# Self-consistent determination of correlation parameter for $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$



Orbitals showing correlated motion



Correlation introduced in these bands.



Self-consistency achieved.

By S. Sogo (2009) unpublished.

$(0,0,0)$   $(1,0,0)$   $(1,1,0)$   $(0,1,0)$   $(0,0,0)$   $(1,1,0)$

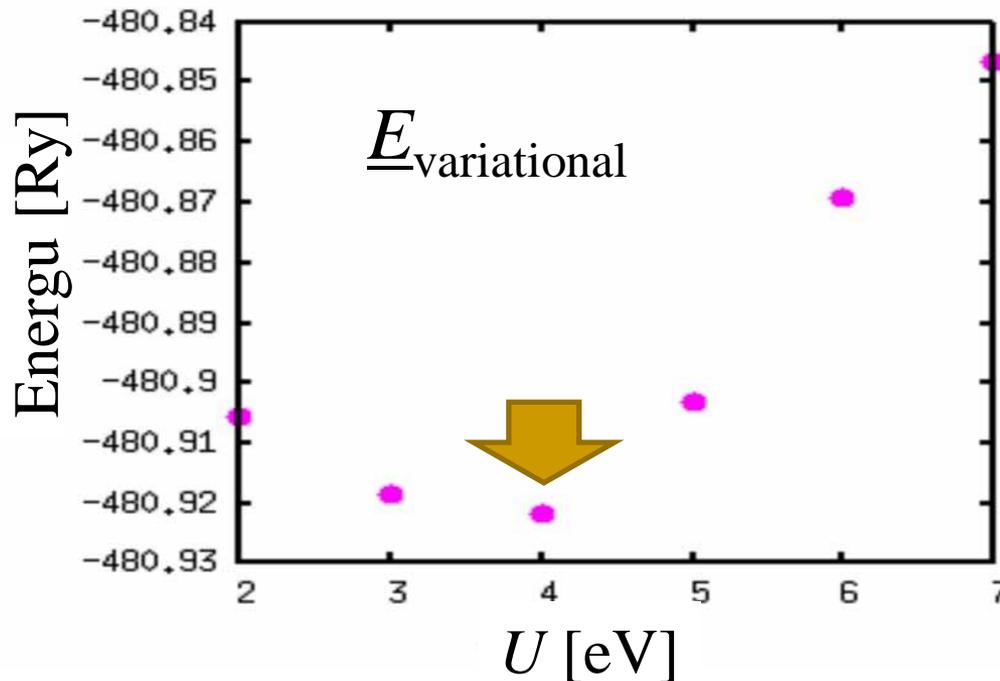
# Variational optimization of $U$

$$E_{\text{variational}} = E_{\text{total}} - E_{\text{Hartree}} - E_{\text{rxc}} + E_{\text{Coulomb}}$$



$\underline{E}_{\text{variational}}$  : we use the pseudo potential.

In this equation, there is no double counting error, since perfect subtraction is done!



This calculation is based on the density functional variational theory (DFVT).

# A theorem in DFVT

A variational principle is given by the next inequality.

$$E_0 \leq \min_{X_i, \varepsilon_i, g_i} \left\{ \min_{\Psi} \bar{G}_{X_i, \varepsilon_i, g_i}[\Psi] + \Delta \bar{E}_{X_i, \varepsilon_i, g_i}[\Psi] \right\}, \quad (33)$$

where  $E_0$  is the ground-state energy of the electron system, and  $\Psi$  inserting in  $\Delta \bar{E}_{X_i, \varepsilon_i, g_i}[\Psi]$  is the minimizing  $\Psi$  of a functional  $\bar{G}_{X_i, \varepsilon_i, g_i}[\Psi]$ . The energy functional determining the model is given as follows.

$$\begin{aligned} \bar{G}_{X_i, \varepsilon_i, g_i}[\Psi] = & \langle \Psi | \hat{T} + \hat{V}_{X_i} | \Psi \rangle + \frac{e^2}{2} \int d^3r d^3r' \frac{n_{\Psi}(\mathbf{r})n_{\Psi}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ & + E_{\varepsilon_i}[n_{\Psi}] + E_{g_i}[\Psi] + \int d^3r v_{ext}(\mathbf{r})n_{\Psi}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (34)$$



**Minimization possible!!!**

Eq. (34) gives a self-consistent determination method of first-principles models of correlated electron systems.

---

Section V

# 層状超伝導体の理論

---

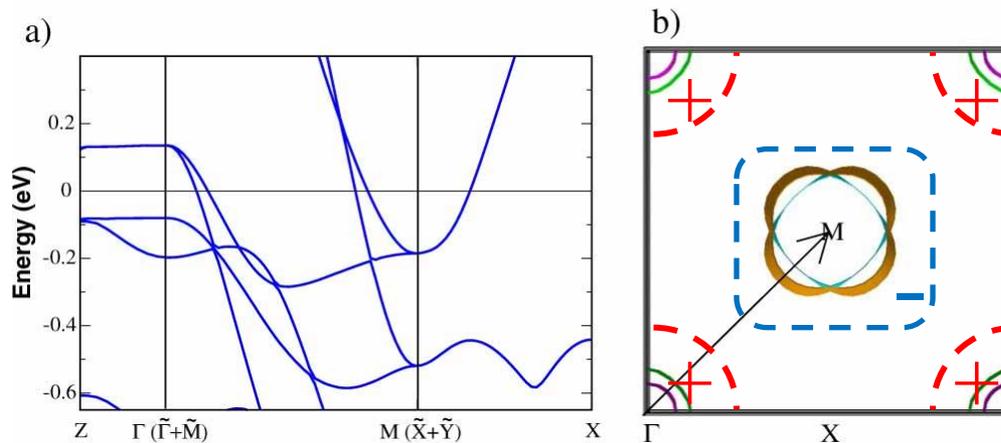
# 鉄ヒ素系超伝導体のスピン揺らぎ理論

電子間斥力から

- スピン揺らぎ → 超伝導秩序変数の符号が1st BZ中で変化すれば、超伝導状態の解が安定解として発生しうる。
- 電荷揺らぎ

Mazin, et al. PRL 101, 057003 (2008).

Kuroki, et al. PRL 101, 087004 (2008).



: S<sup>+-</sup> wave  
or d-wave

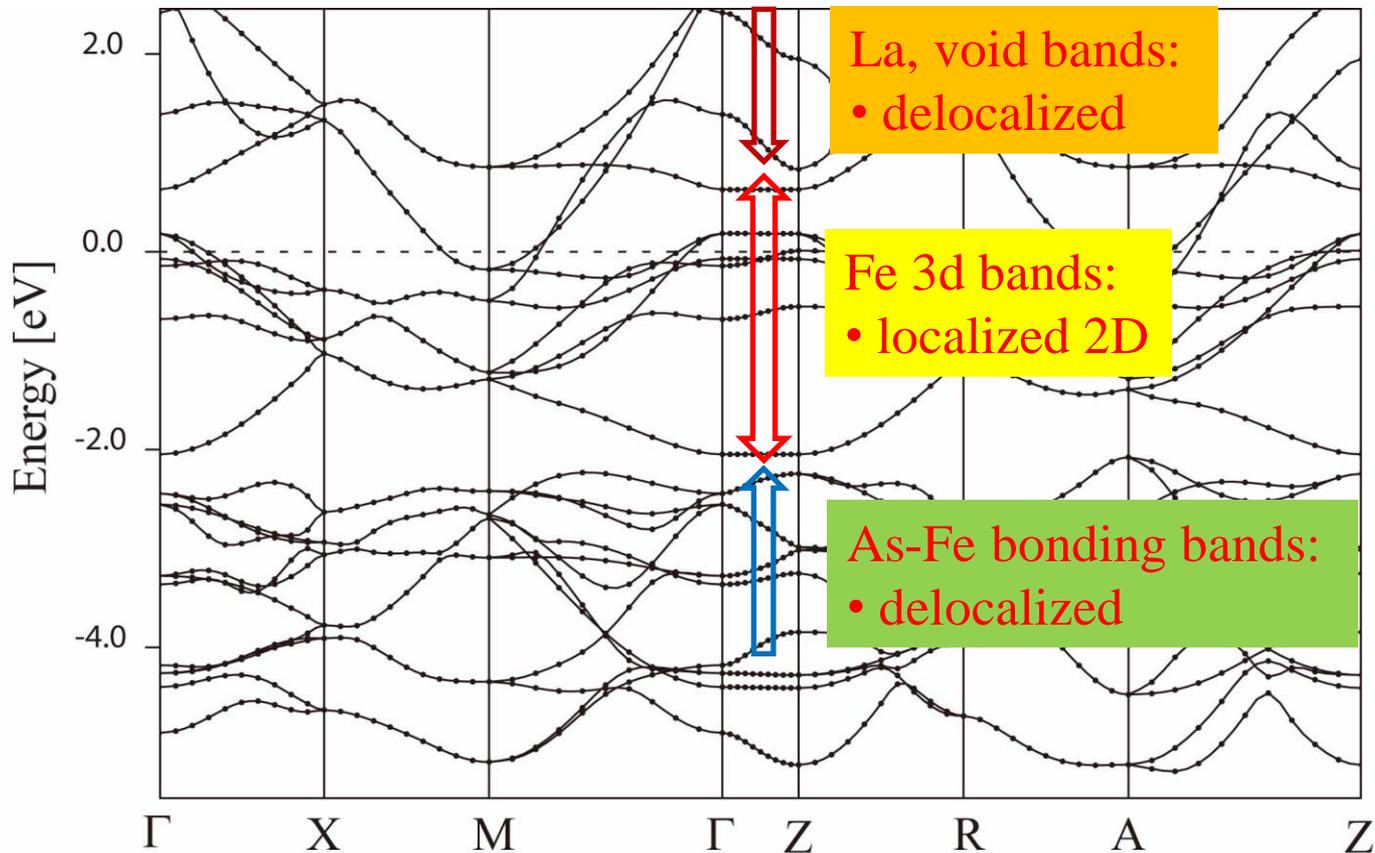


電子が同じ軌道上来ずにクーパーペアを組む。

ところが、彼らも「第三の方向」であるz方向への運動が重要とは指摘していない。

# GGA計算の与える描像

LaFeAsOのGGAによるバンド計算例  
(平面波展開・US-PP by Quantum espresso)



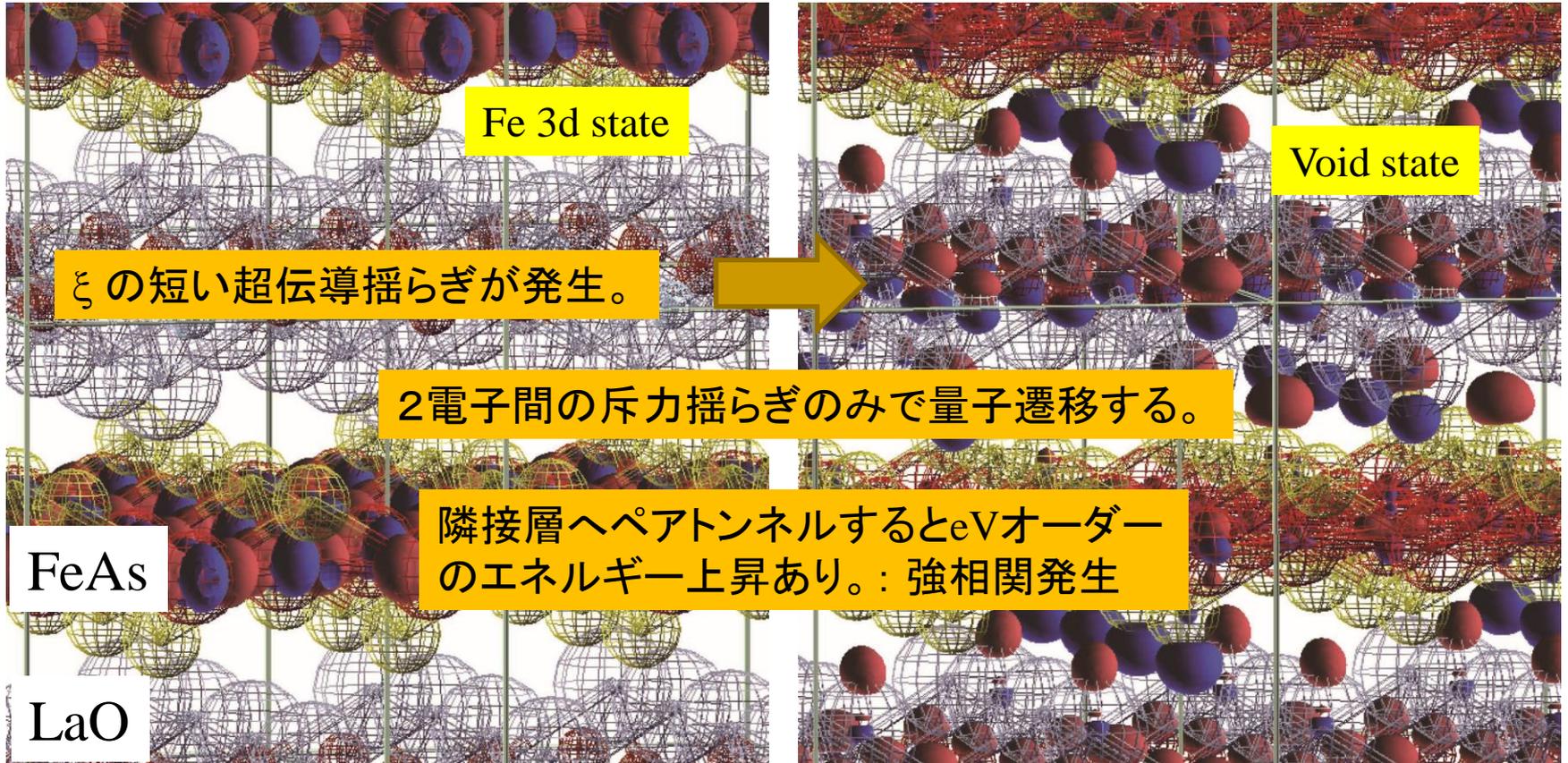
Wannier representationをFermi準位近傍でc軸平行1次元方向で作ることに意味がある。

# GGAが与える描像

LaFeAsO<sub>0.875</sub>F<sub>0.125</sub>のGGAによるバンド計算例  
(平面波展開・US-PP by Quantum espresso)

$E_F$ 直上にある状態

$E_F$ より $\sim eV$ 上にある状態



Fe 3dの完全局在バンド(Wannier状態)

Fe 3d状態とVoid stateの混成

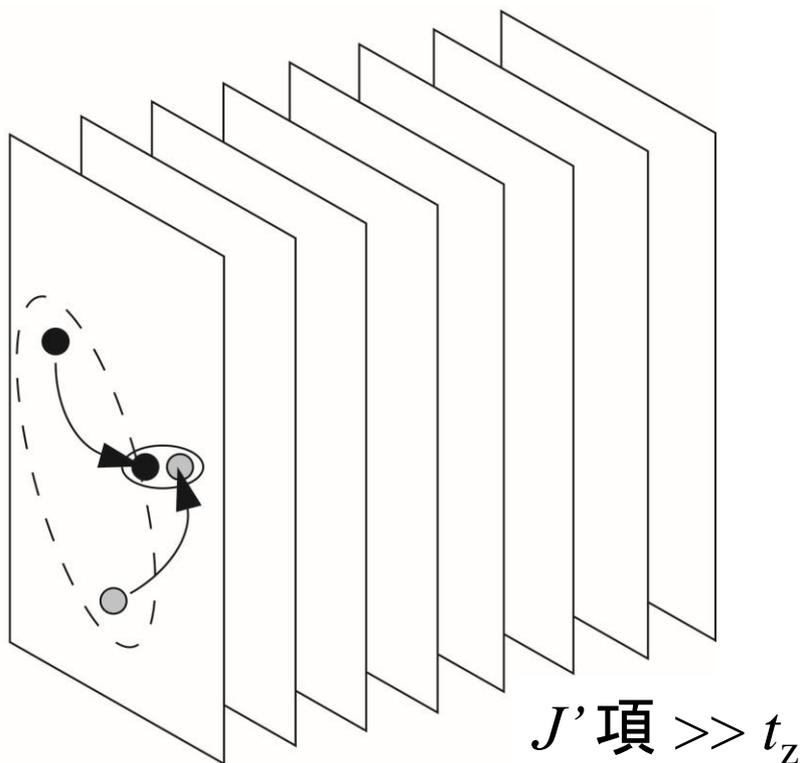
# 有効模型形成プロセス

層間荷電揺らぎによる相互作用のうち、

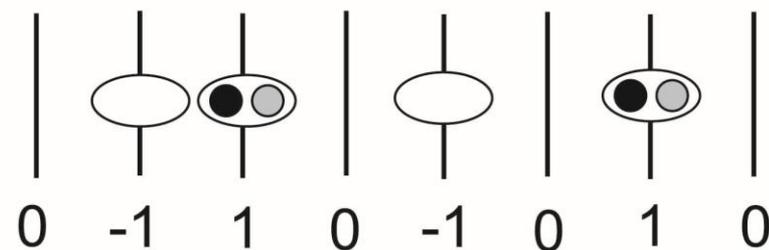
- 対角揺らぎ: GGA-バンド構造の本質を変えない。
- 磁氣的直接交換: 存在しても超伝導に効かない。
- ペアホッピング: 存在しうるだけでなく、条件が整うと隠れた秩序発生につながる。

第0条件: 層間一体飛び移り(バンド分散)が無い。

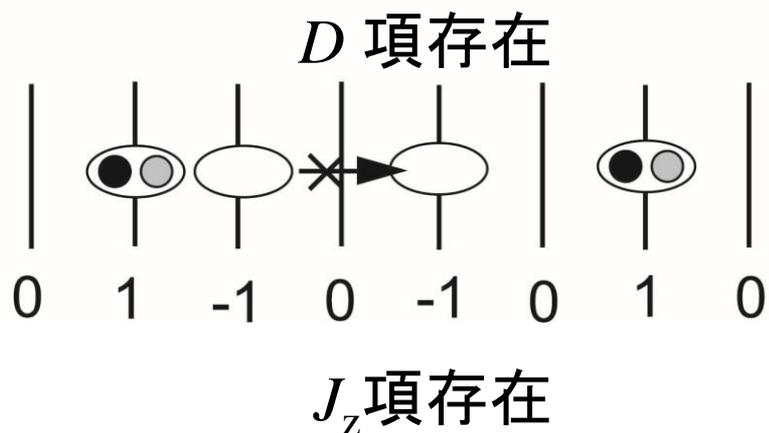
(a)



(b) 局所電荷中性条件 + 短い  $\xi$



(c)



# Valence bond solidとは

- S=1 Heisenberg model

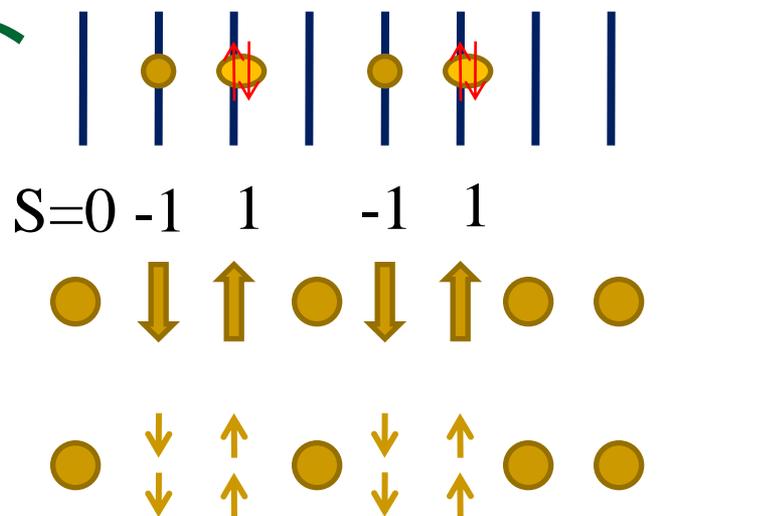
- GS: Gap full

この理由を説明する拡張型のS=1 Heisenberg model (AKLT model)を考える。

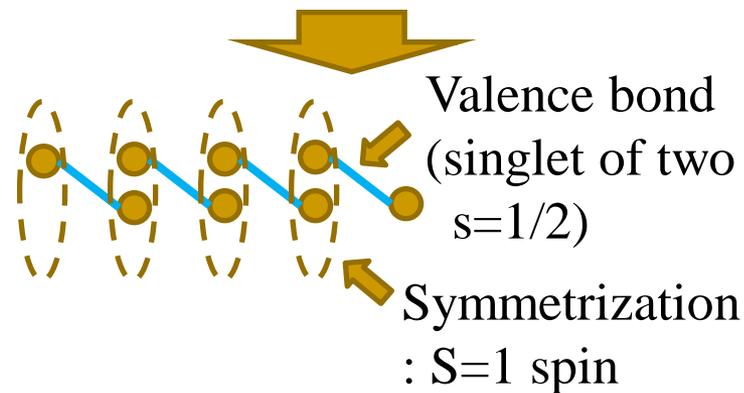
GS: singlet bondから作られる量子固体

秩序変数: 隠れた秩序

これをVBSと呼ぶ。

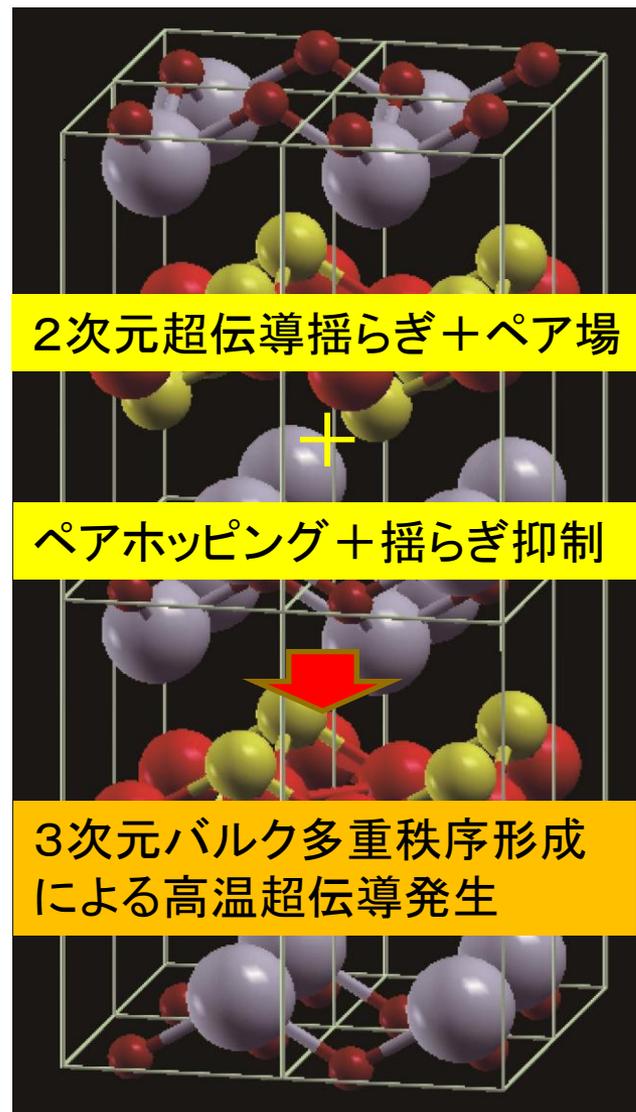


“S=1” = triplet of s=1/2



Ground state of S=1 Heis. chain  
~ VBS

# 多配置参照密度汎関数理論の与える描像



- フェルミ準位にあるFe 3d軌道の2次元電子状態に荷電揺らぎによる摂動がかかる。



ペアホッピング

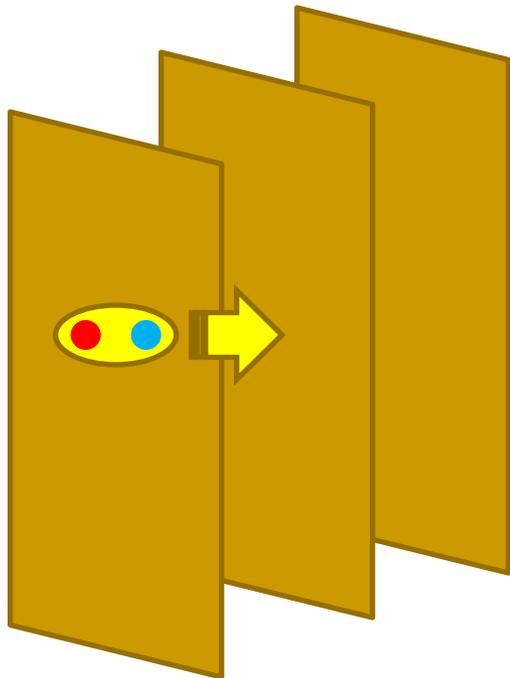
- ・1次項 ダイレクトペアホッピング: 11
- ・2次項 超ペアトンネル: 1111, 122

層間荷電揺らぎ抑制とS=1 Heis. AF  
・隠れた秩序+超伝導秩序→ $n[\Delta](\mathbf{r})$

- 結果として電子間クーロン斥力相互作用をもとに、量子揺らぎ発生に基づくエネルギー安定化が生じる。(→ MgB<sub>2</sub>, Cuprates)

# ペアホッピング機構の類型

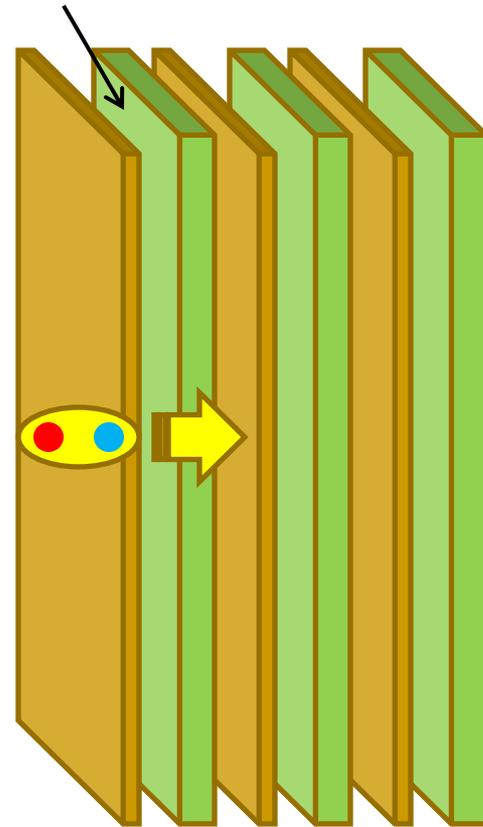
## ■ ダイレクトペアホッピング



$J'$  の1次プロセス

## ■ 超ペアトンネリング

Fermi 準位近傍の電子のみ通さない層



$J'$  の2次プロセス

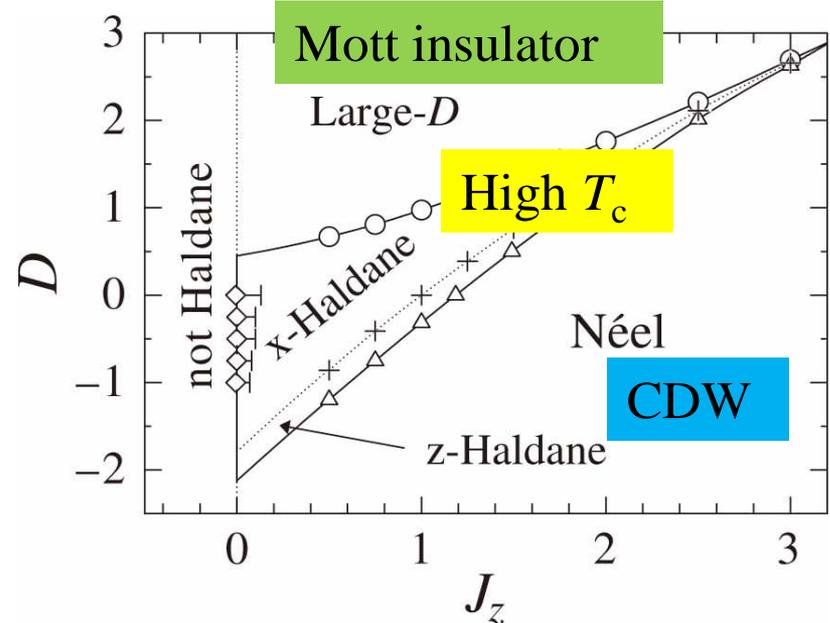
$J'$  は電子間斥力起源であることが本質です。

# 強相関係の相図検討結果

- 3次元Bulk超伝導は、量子揺らぎによるHaldane gap 形成を伴って起こる、と考えて良い。
- Haldane相に入るようにコントロールできるパラメータは、 $J_{\text{super}}'=1$ とする条件において、
  - $S=1$ に制限:  $\Delta_{\text{Haldane}}$
  - $J_z$ : 層間静電相互作用
  - $D$ : 層内エネルギー上昇 (局所電荷中性条件の破れ)



高温超伝導体設計法



Ueda, Nakano, & KK, PRB (2008).

- 知られている範囲でギャップが顕著に発生する $S=1$  Heis. AF chainとなるには、ペアホッピング状態のエネルギー量子化発生が必要。
- そこで、必要とされる相図は、一般の $S$ を許す有効モデルでの広範なパラメータ相図になる。

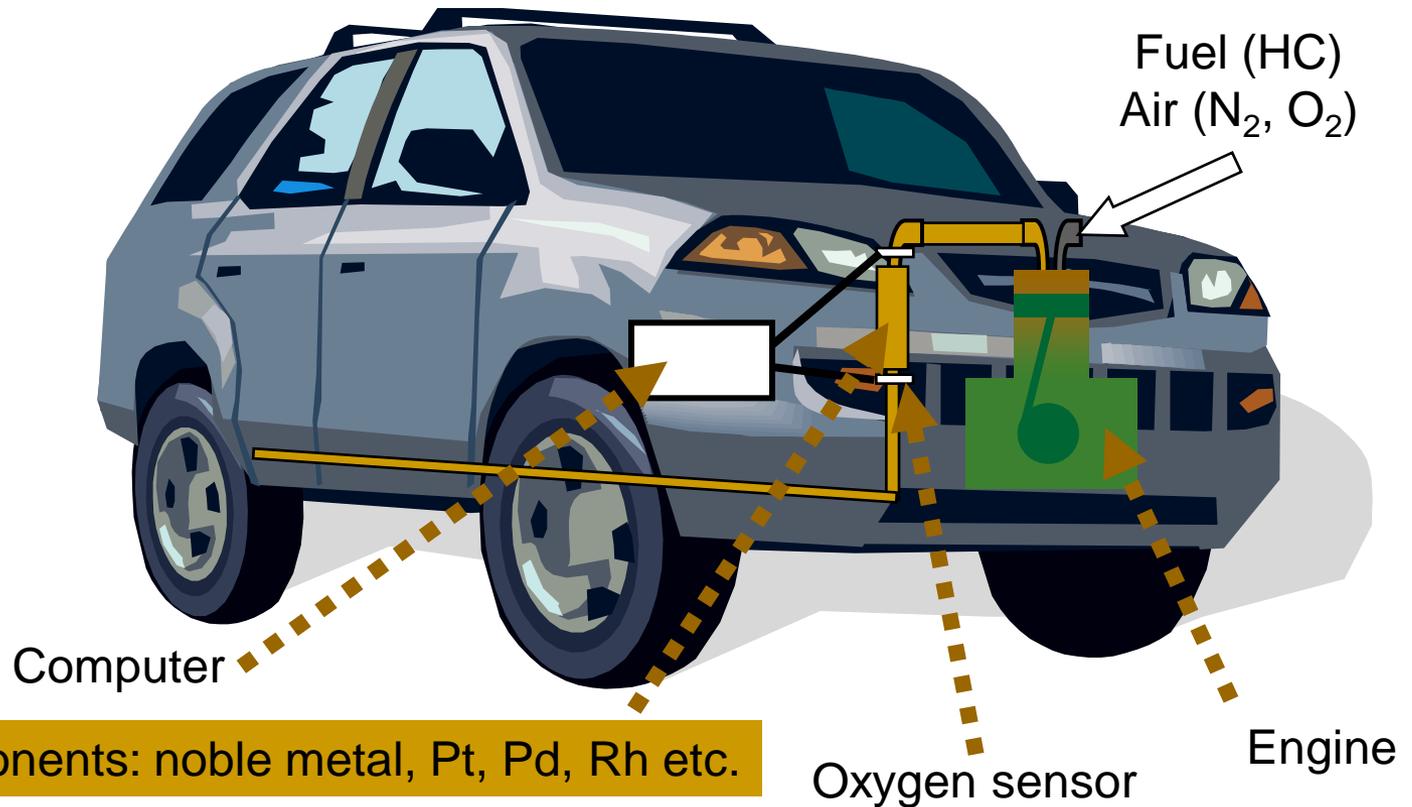
---

Section VI

# 自動車触媒



# Automotive catalyst: its function



Toxic substances in exhaust gas

HC: hydrocarbon

CO: carbon monoxide

NO<sub>x</sub>: nitrogen oxides

■■■ Oxidation ■■■ ➔

■■■ Oxidation ■■■ ➔

■■■ Reduction ■■■ ➔

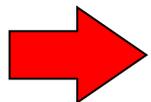
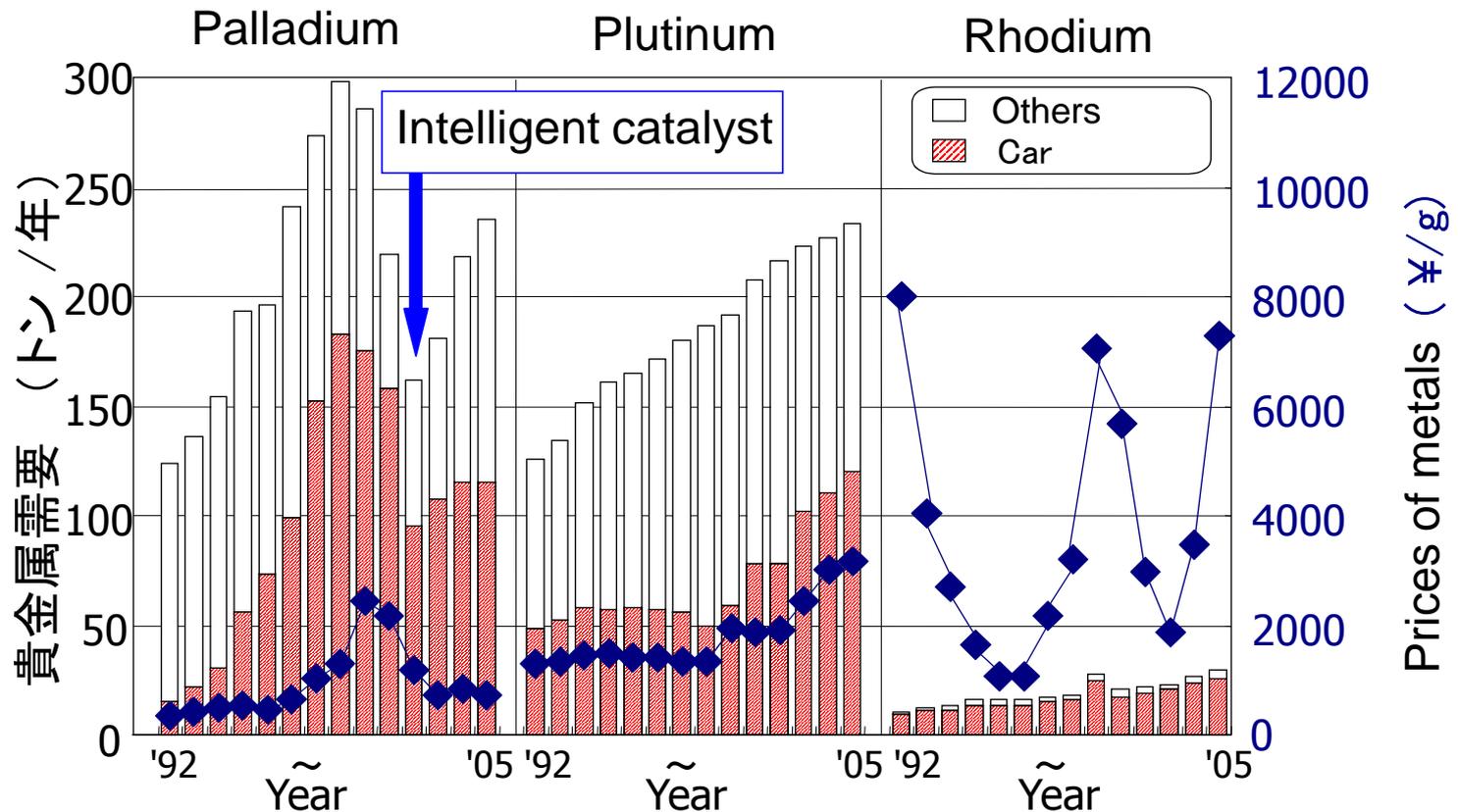
Harmless exhaust gas

H<sub>2</sub>O+CO<sub>2</sub>

CO<sub>2</sub>

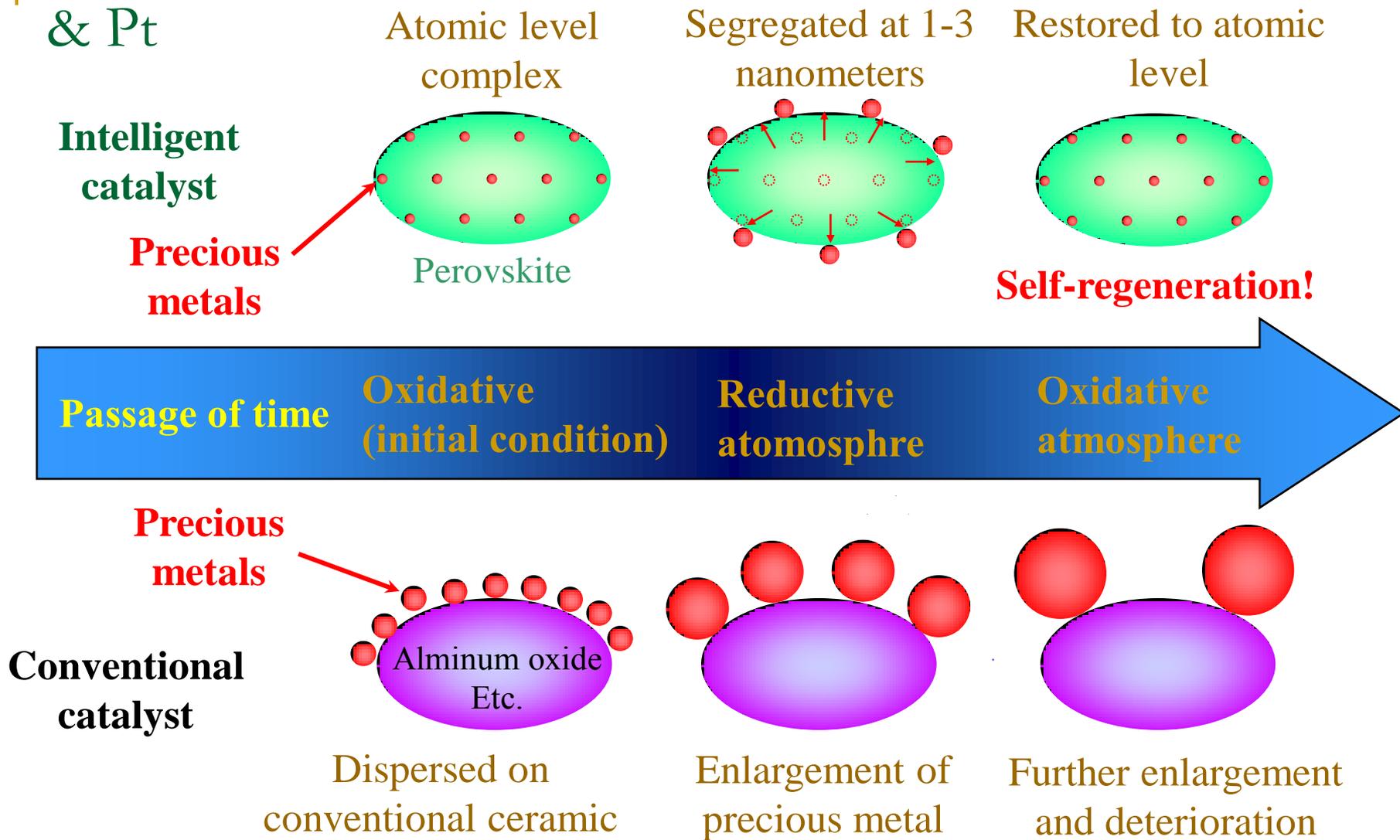
N<sub>2</sub>+O<sub>2</sub>

# World transition of demand and prices of noble metals



Reduction in consumption of noble metals is required.

# Intelligent catalyst : self-regenerative function of Pd, Rh & Pt



H. Tanaka, et al., Catalyst Today 117, 321 (2006).

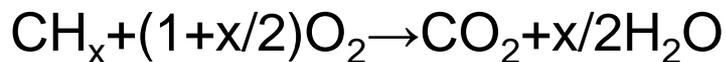
# Catalytic reaction on Pd surface

## ■ Three way catalyst

### □ CO oxidation



### □ CH<sub>x</sub> oxidation



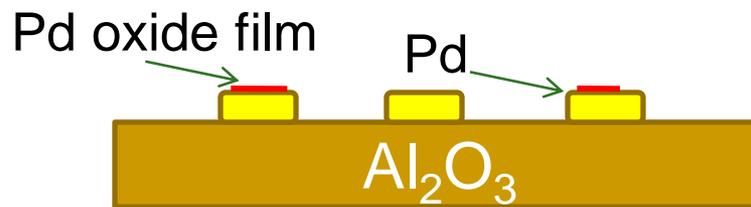
### □ NO<sub>x</sub> reduction



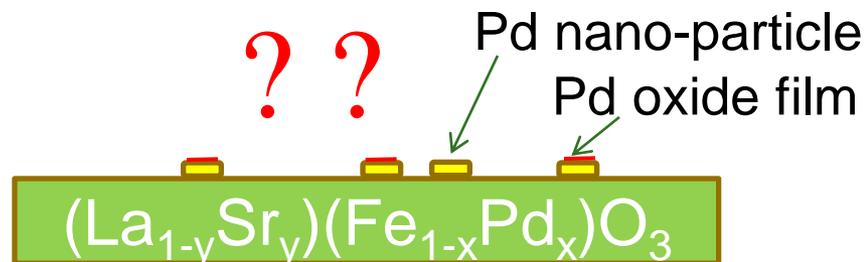
: Not necessarily on Pd

: Not necessarily on PdO

Pd catalyst supported on Alumina



Self-reforming Pd nano-particle

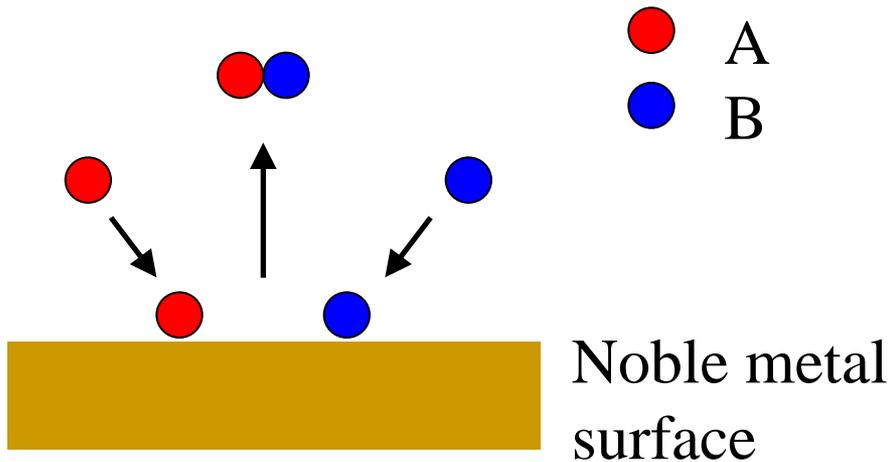


Segregation of Pd nano-particles on perovskite. (Nature 418 (2002) 164.)

Oxidation and reduction processes on Pd oxide films are keys to understand the phenomenon.

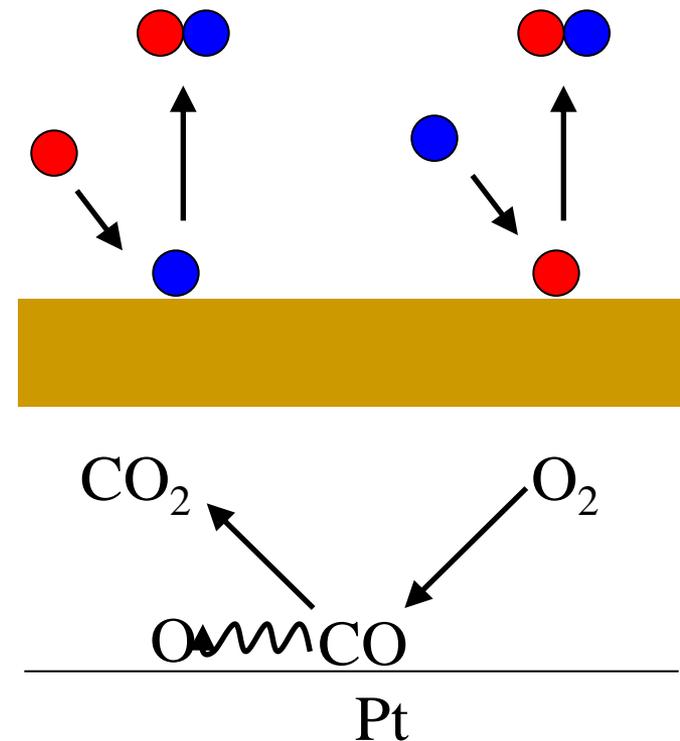
# Knowledge on O/noble metals

- Langmuir-Hinshelwood(LH) mechanism



On metal surfaces, LH occurs.  
Oxygen does not move on surfaces.

- Eley-Rideal(ER) mechanism



$\Delta E_{ER} < \Delta E_{LH}$ , but ER rarely occurs.

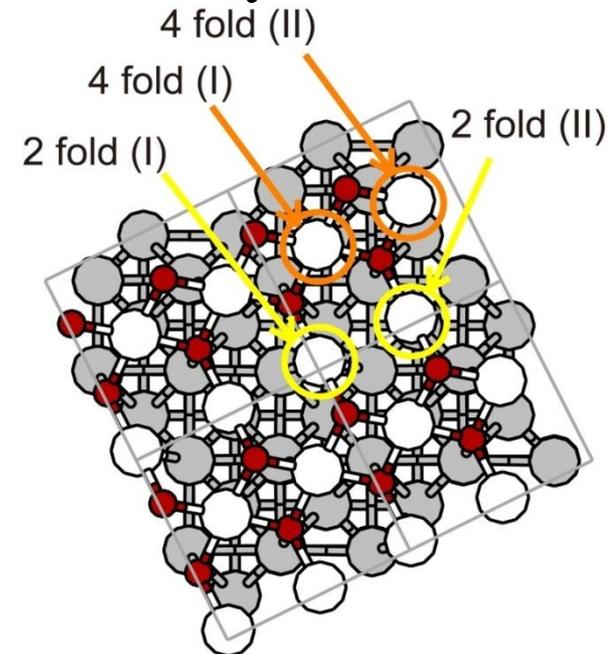
# A PdO film on a Pd(100) surface

- $(\sqrt{5} \times \sqrt{5})R27^\circ$  super lattice structure
  - Structure was determined by LEED
  - Supported by the first-principles calculation by Kostelnik[1]

[1] P. Kostelnik , et al. Surf. Sci, **601**, 1574 (2007).

Known properties are,

- Further oxidation of surface is inhibited after formation of the PdO film.
- PdO layer has 4-fold and 2-fold coordinated sites of Pd.



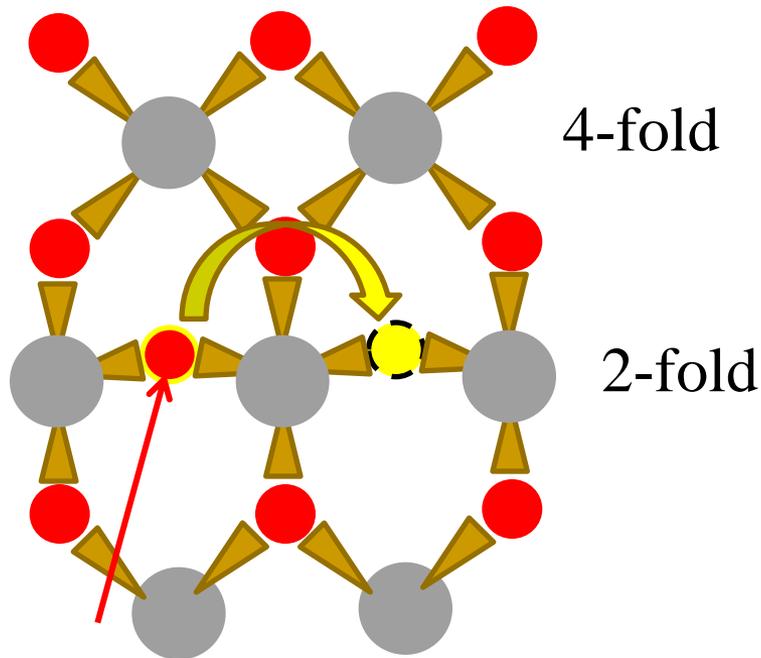
Other references on theoretical calculation.

[2] J. Rogal, K. Reuter and M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. **98**, 046101 (2007).

[3] J. Rogal, K. Reuter and M. Scheffler, Phys. Rev. B **75**, 205433 (2007).

[4] J. Rogal, K. Reuter and M. Scheffler, Phys. Rev. B **77**, 155410 (2008).

# Fluxionality of $O^*$ around O-M-O

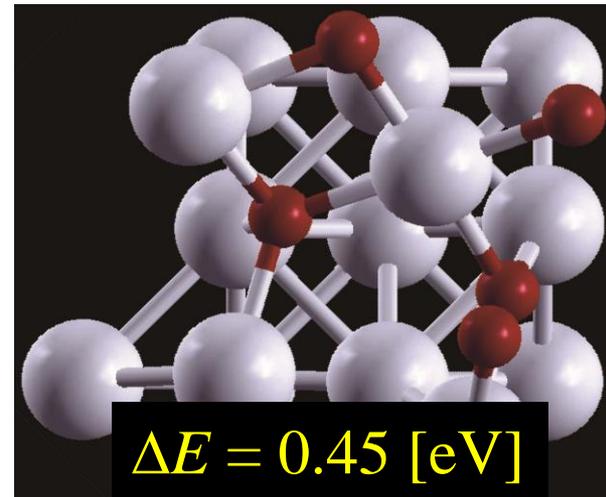
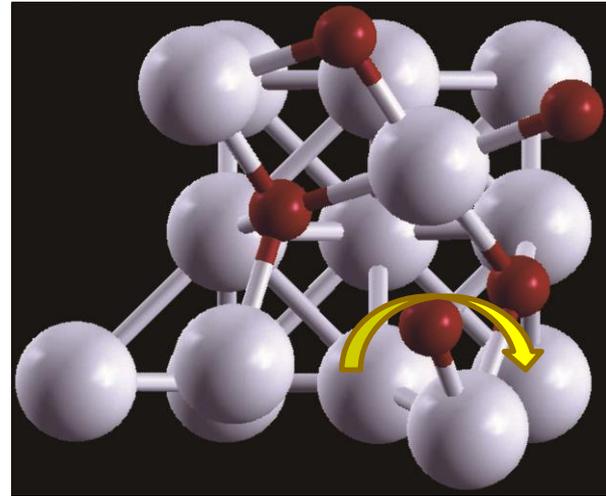


Extra oxygen:  $O^*$   
(function group)

Similar structures are seen in

- 3d : Cu (Cf.  $Cu_2O$ )
- 4d, 5d: Pd, Pt, Ag

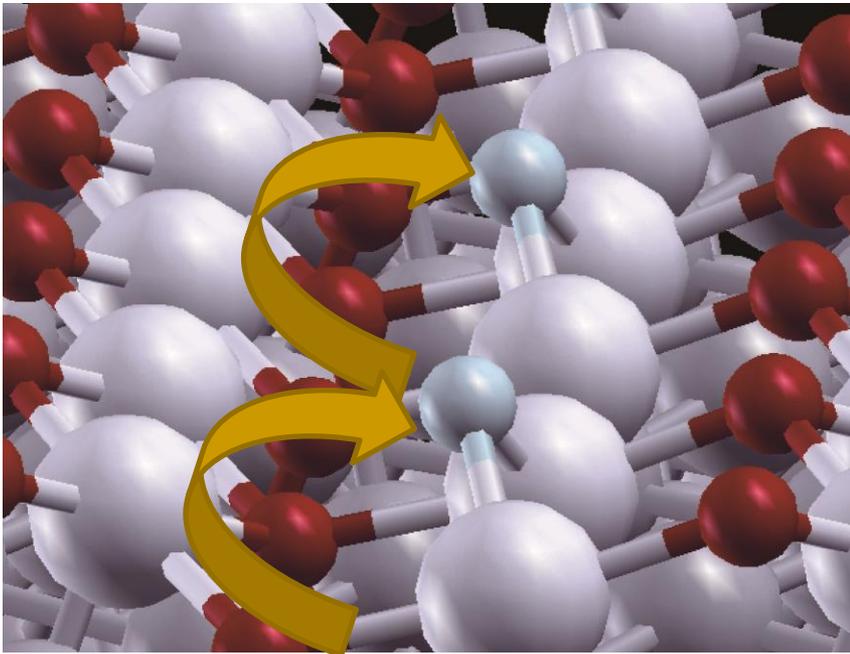
$O^*$  on PdO/Pd(100)



# Fluxional oxygen

## Solid-state nano catalyst

**PdO on thin soft Pd layer:  
reactive for CO oxidation**



Oxygen is given by  $\text{NO}_x$  reduction process on another surface structure.

## Designed catalytic surface

- Dynamical process in non-equilibrium
  - O-M-O structure in homogeneous catalyst
  - The structures are expected in oxide film of Pd, Pt, Ag, Cu
- ⇒ Strategic solution for element selection

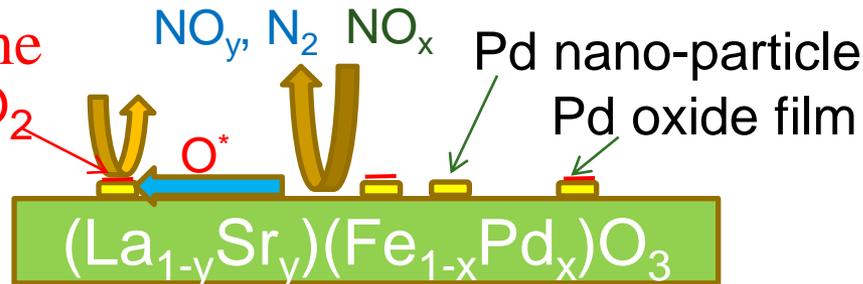
Element science and technology project:  
“New development of self-forming nano-particle catalyst without precious metals.”

# Fluxional heterogeneous catalyst

*Open now!*

Self-reforming Pd nano-particle in an oxide

The ER scheme



Segregation of Pd nano-particles and Oxygen-fluxionality on Pd nano-particle!

In  $\text{O}^*$  migration, both migration on surface & diffusion in substrate are allowed.

Oxidation and reduction processes on

- precious-metal-oxide films or
- transition-metal-oxide films

with an oxygen-buffering system showing activity on  $\text{NO}_x$  reduction are keys to design a new heterogeneous catalyst.

(K.Kusakabe&H.Kizaki:Japan patent submitted #2009-204665)

---

Section VII

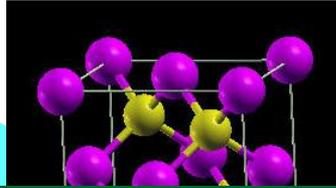
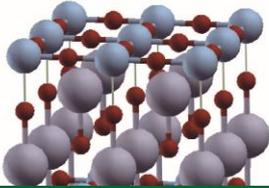
まとめ

---

# 研究方針II

Oxides

Semiconductor



Stable quantum state in materials

Emergence of S.S.B. in order

Quantum Field theory

Standard theory of quantum field theory  
Gauge fixing, Quantum gravity

Theory of Phase transition

Time-dependent Current DFT

Dynamical functions in devices

Quantum mechanics of many-body systems



# 物質の個性を表わす様々な秩序変数

外場と相互作用する秩序変数

電子密度 (←外部スカラーポテンシャル)  
電流密度 (←外部ベクトルポテンシャル)  
スピン密度 (←外磁場)  
分極 (←外部電場)

外場と直接相互作用しない内部秩序変数

軌道占有数の揺らぎ (二重占有密度)  
超伝導揺らぎ (クーパーペア密度)  
ストリング磁気秩序  
荷電量子揺らぎ

現在の大きな課題:

隠れた秩序変数の発生が外場と相互作用する秩序変数を変えるか否か?

この課題が解けると次のことが出来るようになります。

モット絶縁体とその周辺の磁性体、超伝導体、強誘電体の設計 :  
巨大な応答をする磁性体、室温超伝導体、  
新型エレクトロニクス素子、エネルギー変換材料

有機錯体・無機有機コンポジットなどの機能性材料の設計、反応経路解析:  
生体反応の解明と生体模倣物質の設計、医薬品開発、触媒開発、

# 理論系の研究

## 計算物理

- 論理学
  - 数学
  - 計算機科学
- の力を用いて
- 量子力学
  - 量子統計力学
- を操る。

## 物質科学

- 合成プロセス
  - 計測過程
- を「論理的に再構成」し
- モデル形成
  - 理論シミュレーション
  - 論理証明
- によって「存在」を示す。

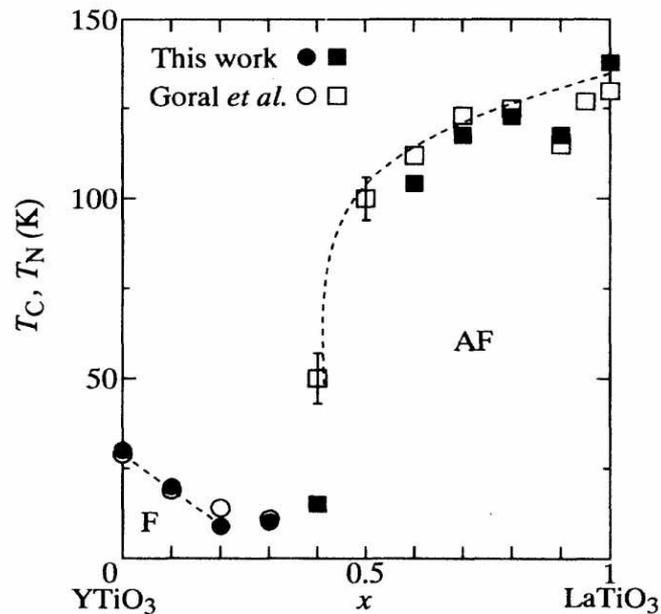
先ほどの例をどのように実現しようとしているのかで説明しよう。

# 課題：以下を実現する指針は？

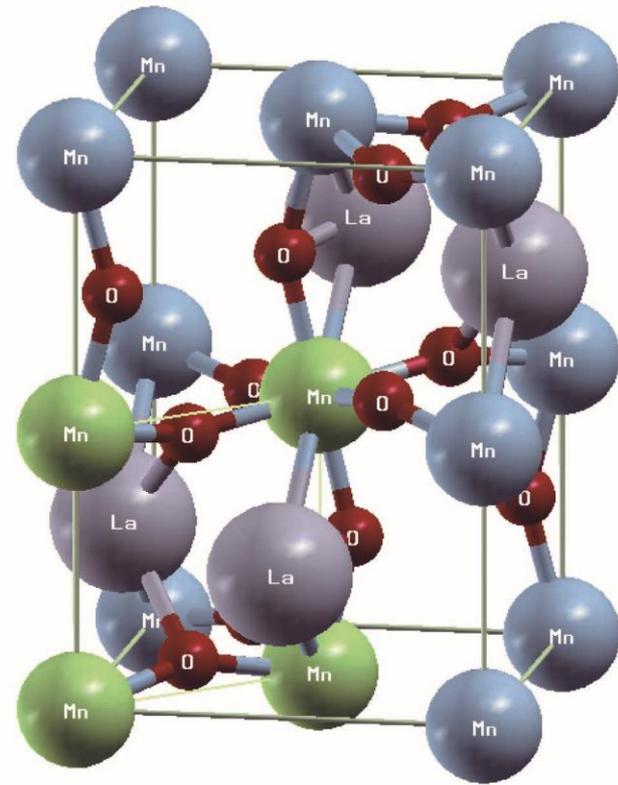
- 巨大な応答をする磁性体
- 室温超伝導体
- 新型エレクトロニクス素子
- エネルギー変換材料
- 生体反応の解明と生体模倣物質の設計
- 医薬品開発
- 触媒開発

# 巨大な応答をする磁性体

- Transition in orbital order = transition in  $n(\mathbf{r})$ .



Magnetic phase diagram of  $\text{La}_y\text{Y}_{1-y}\text{TiO}_3$   
Okimoto, et al. PRB (1995).



# 室温超伝導体

- Au, Ag, Cu (normal at mK) then C (at 300K).

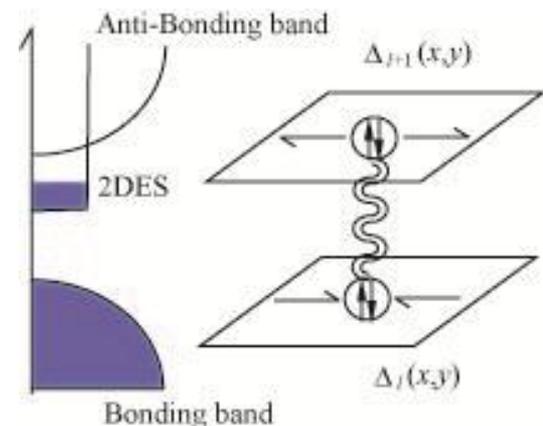
J Supercond Nov Magn (2011) 24: 401–405  
DOI 10.1007/s10948-010-0947-x

ORIGINAL PAPER

## Superconducting Behavior of Interfaces in Graphite: Transport Measurements of Micro-constrictions

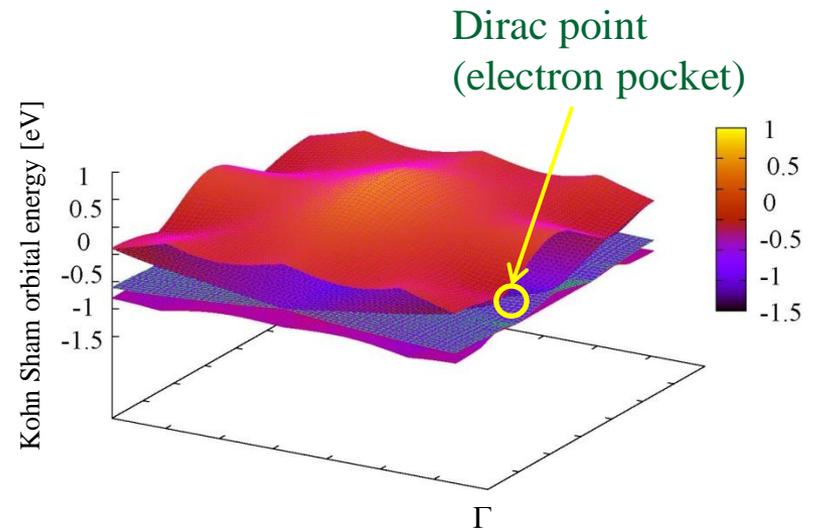
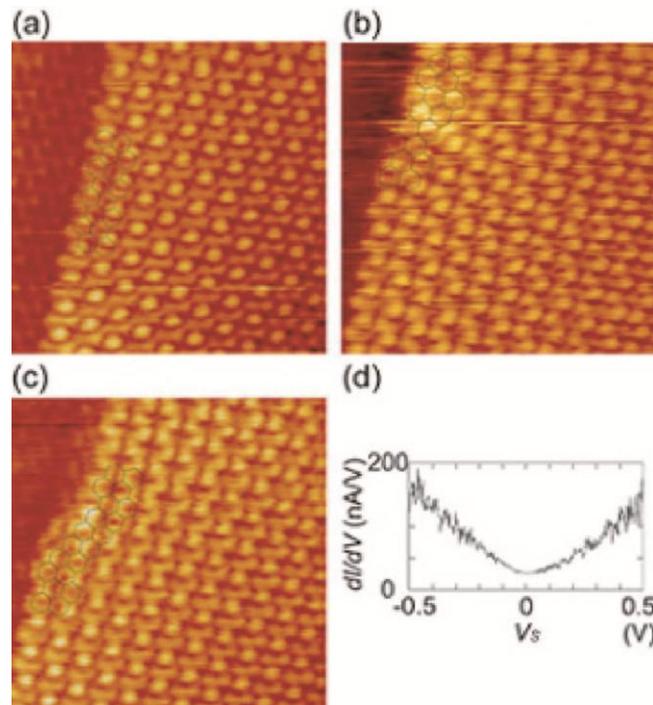
S. Dusari · J. Barzola-Quiquia · P. Esquinazi

Super pair-hopping!



# 新型エレクトロニクス素子

## ■ Graphene & FeSe: Dirac electrons.

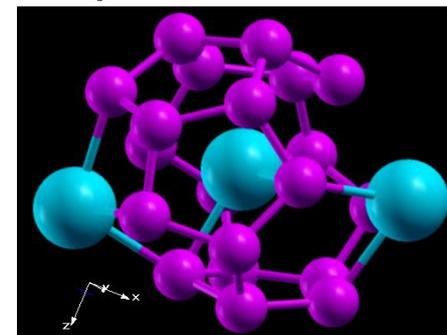
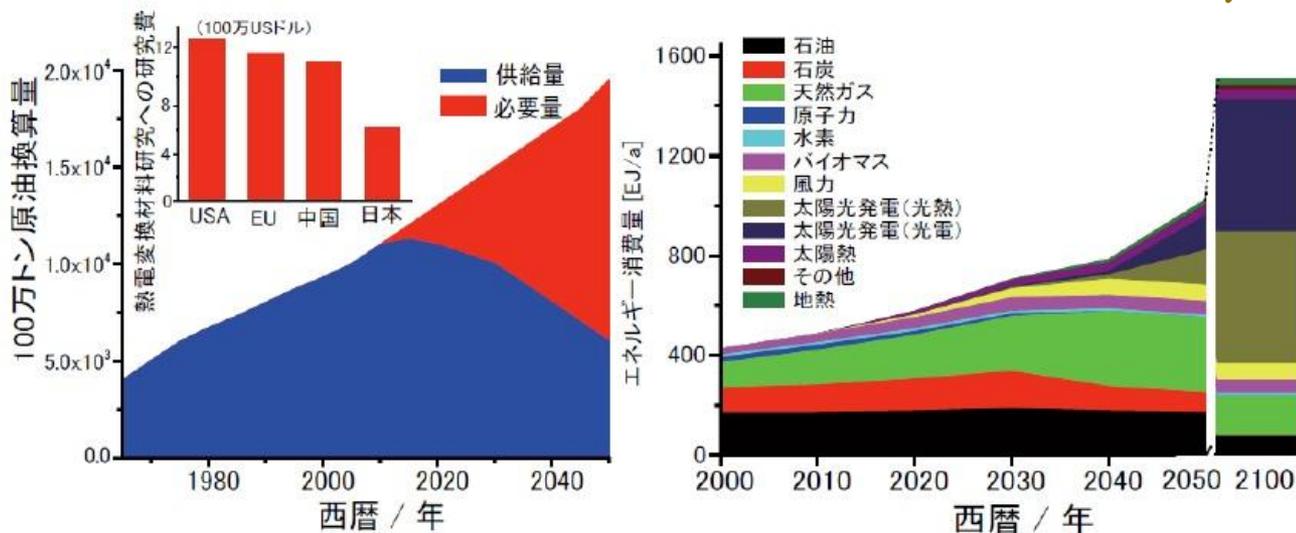


Vanishing backward scattering!

Y. Kobayashi, et al. Phys. Rev. B 73, 125415 (2006).

# エネルギー変換材料

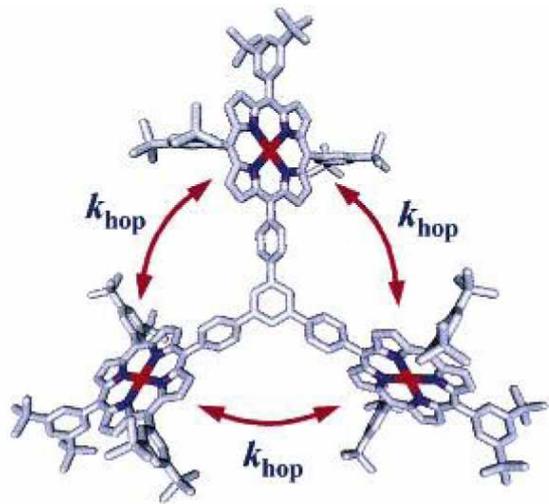
## ■ Phonon glass electron crystal (PGEC)



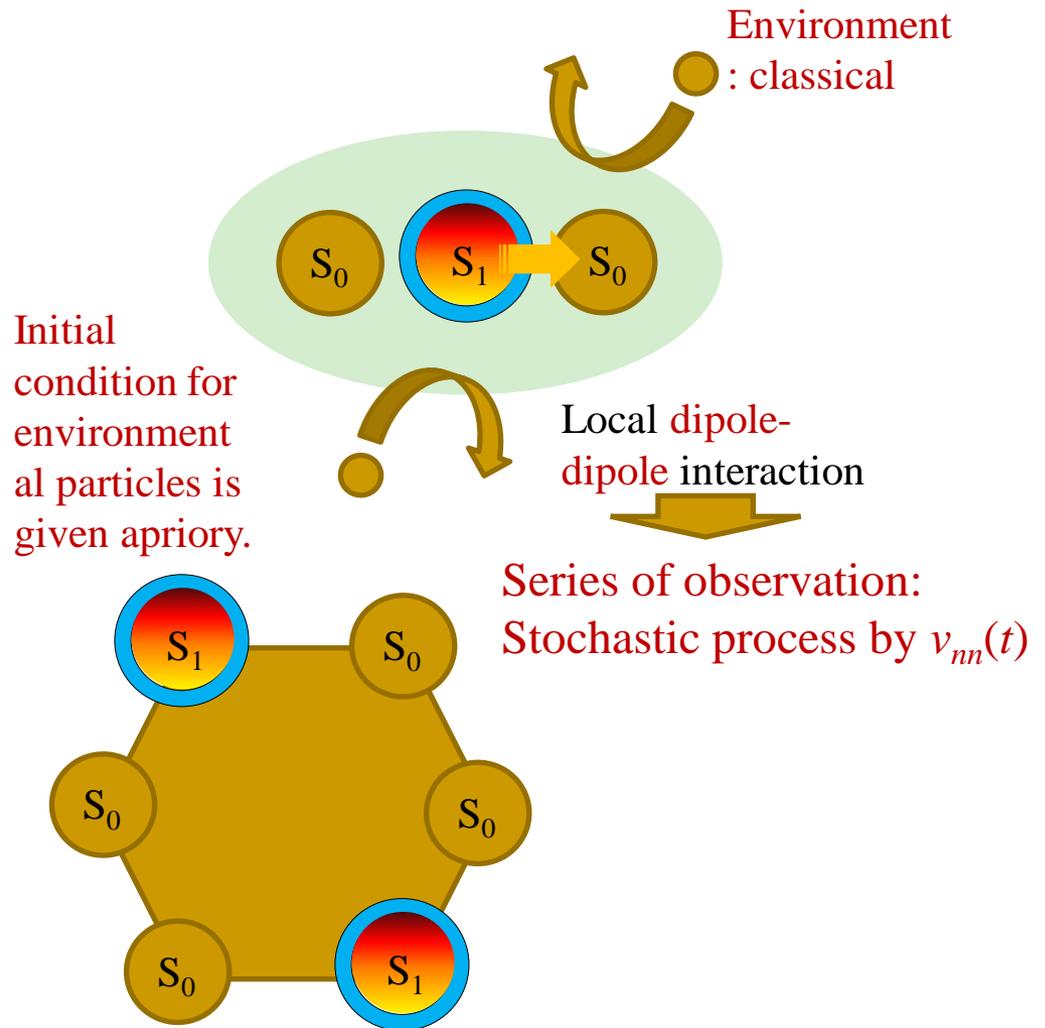
エネルギーの供給量と必要量ならびに世界各国のエネルギー関連の研究投資（左図）およびエネルギー創出における種々の方法の割合（右図）。

# 生体反応解明・生体模倣物質

## ■ Quantum jump!!

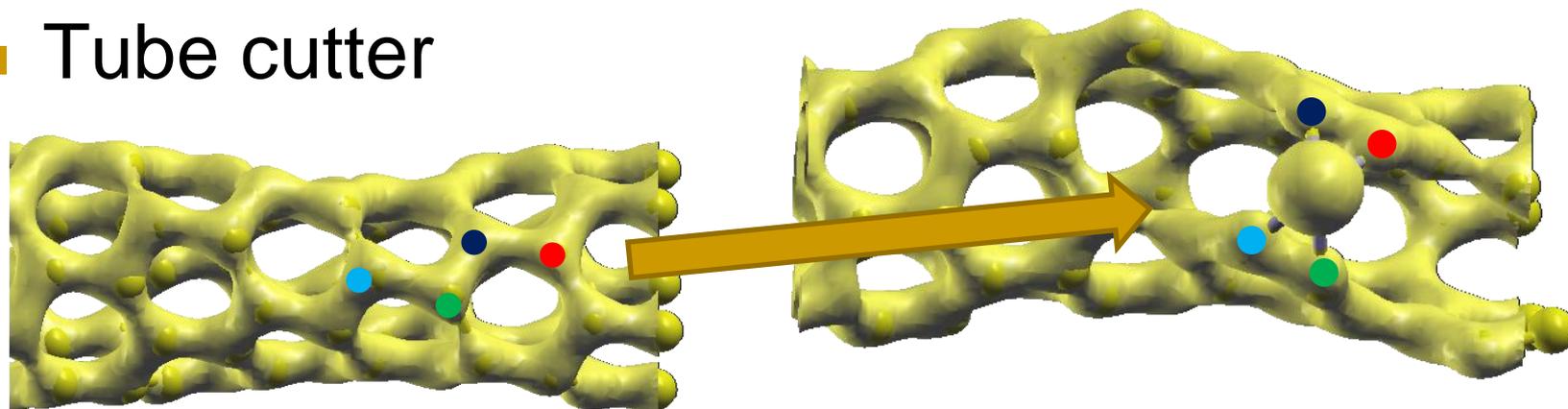


Structures of the m-trimer  
Cf. Cho, et al. JACS (2003).



# 医薬品開発

## ■ Tube cutter



W adsorption on twisted (5,0) tube

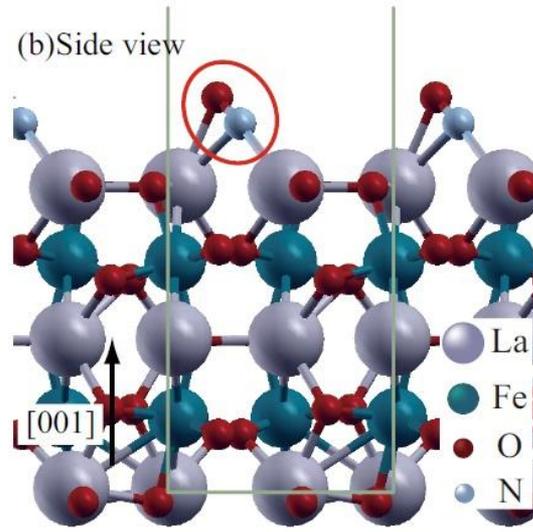
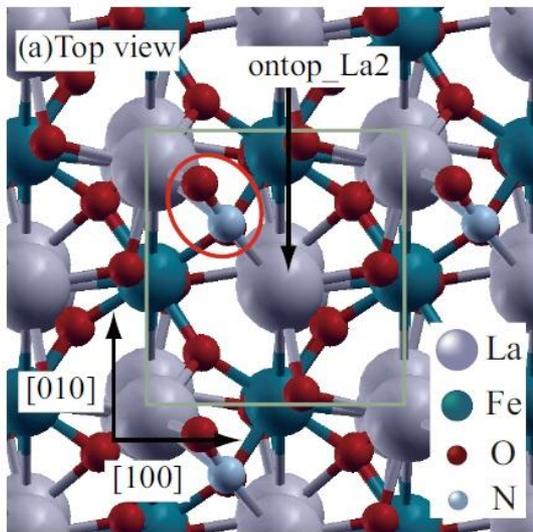
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
6	Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg

 Bond breaking

 No bond breaking

# 触媒開発

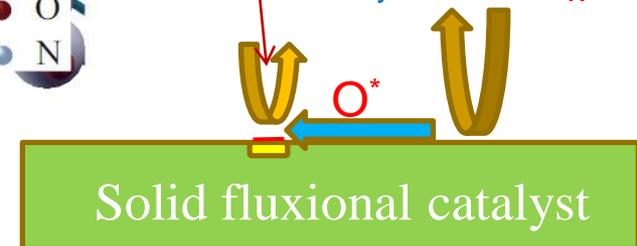
- Perovskite catalyst = fluxionality.



**The ER scheme**



**The LH scheme**



K.K. & H.Kizaki: Japan patent submitted : JP 2009-204665.