

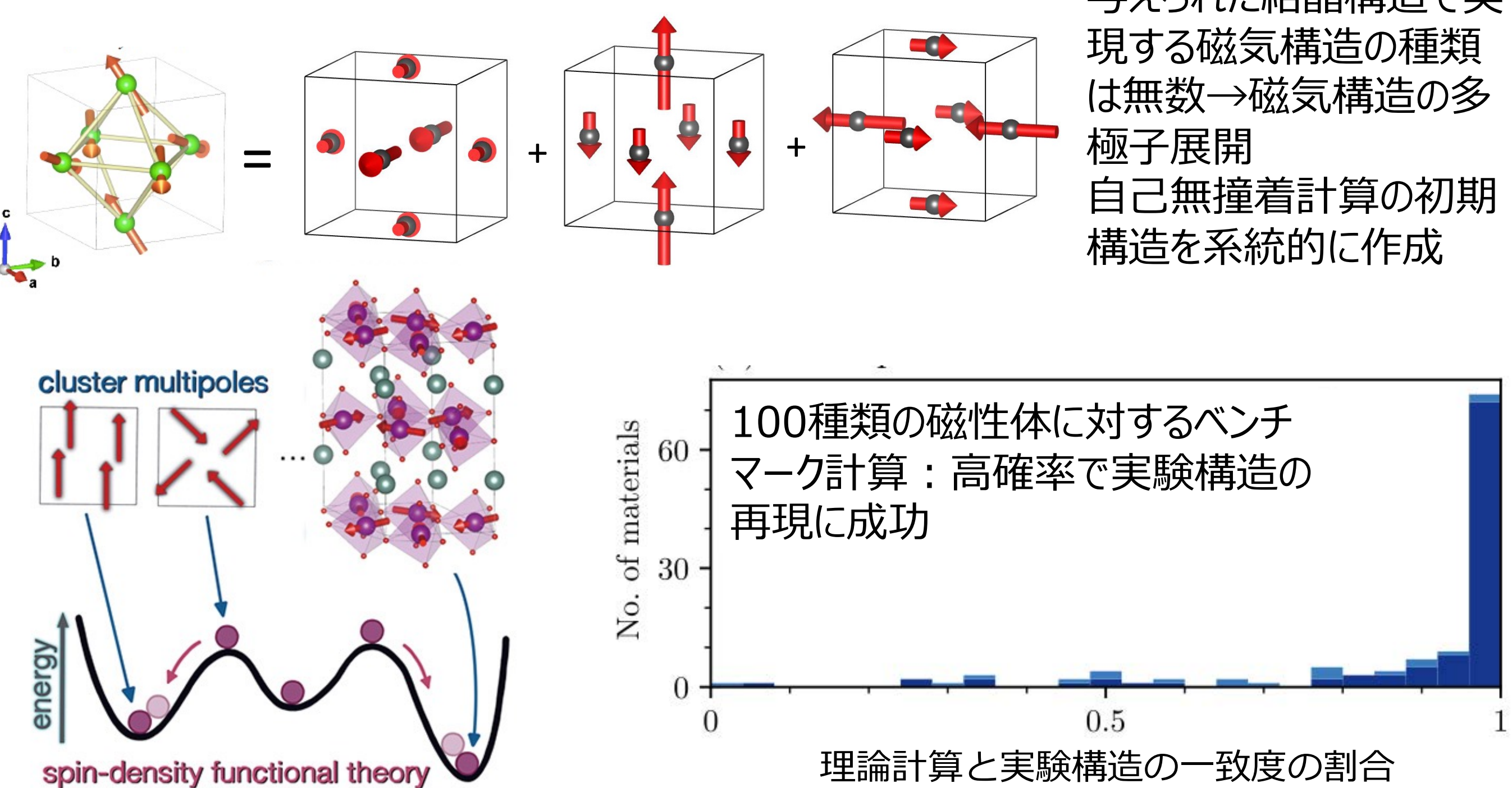


概要

本研究室では、非経験的手法に基づく物性物理学の研究を行っています。様々な物質に対する計算から得られた知見をもとに、非自明な電子状態に由来する特異物性を理論的に予言、設計することを目指しています。長期的には、新しい設計指針や指導原理の確立を理論物理学上の新概念の発見につなげることを考えています。精度の高い物質設計を可能にする新しい計算法論の開発にも積極的に取り組んでいます。

磁性体の研究

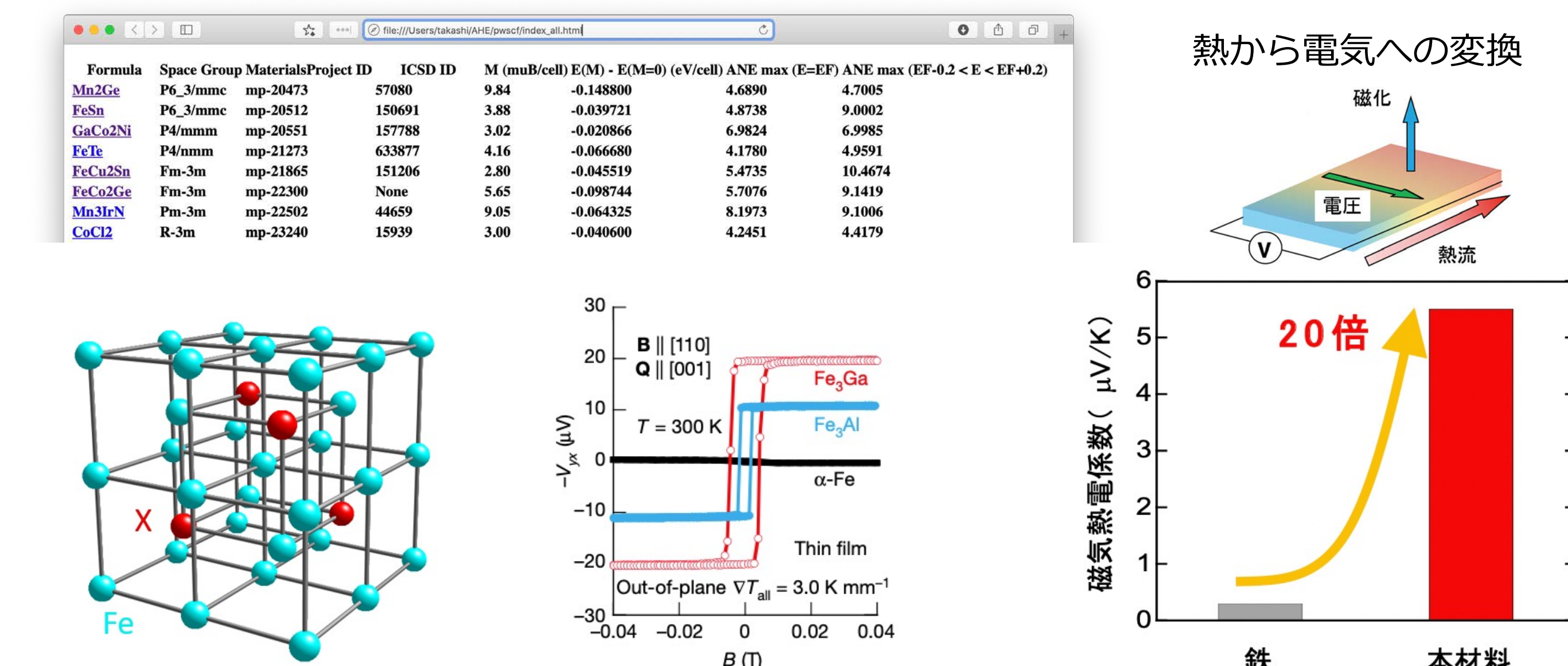
磁気構造予測



Phys. Rev. X 11 011031 (2021)

応答関数のハイスループット計算

Fe₃X (X=Al, Ga)の発見

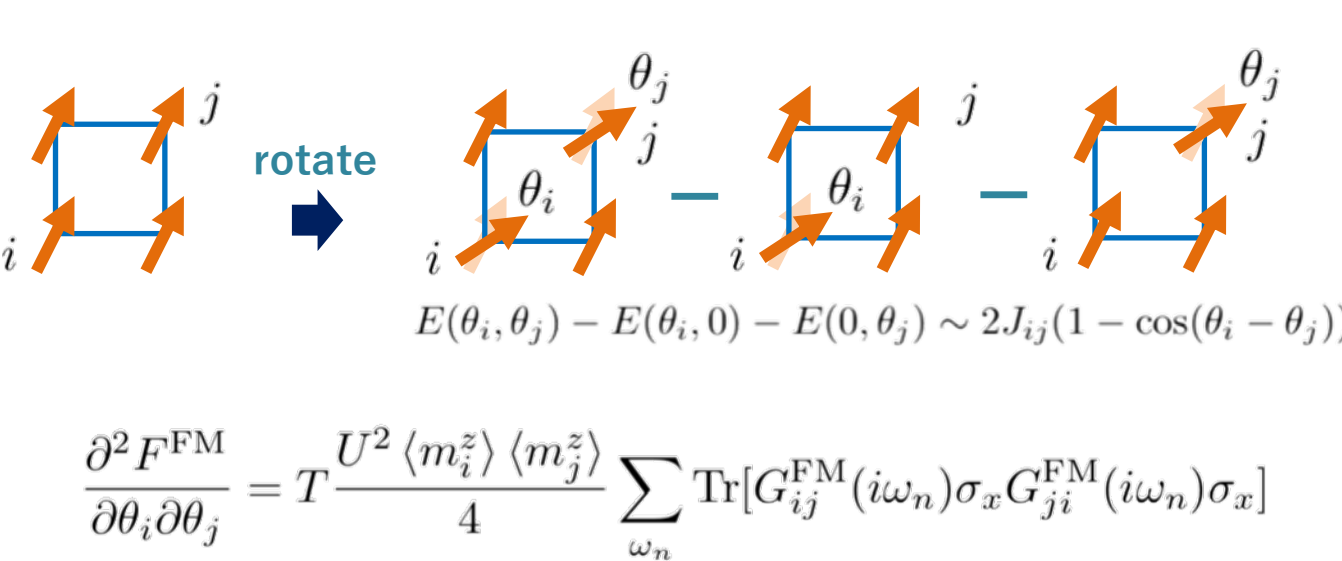


Nature 581, 53 (2020)

有効モデル導出法の開発と応用

与えられた磁性体をハイゼンベルグ模型で表現する→Jをどのように評価するか？

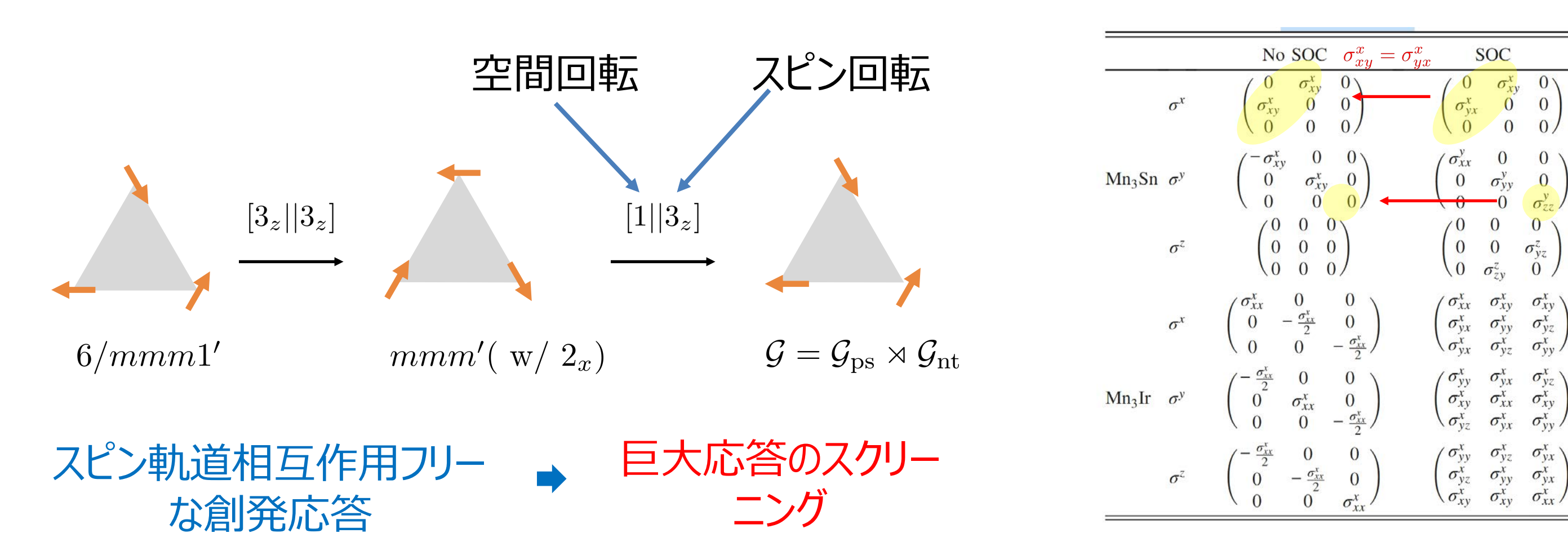
スキルミオン物質、遷移金属ダイカルコゲナイド系への応用



Phys. Rev. B 102 014444 (2020)

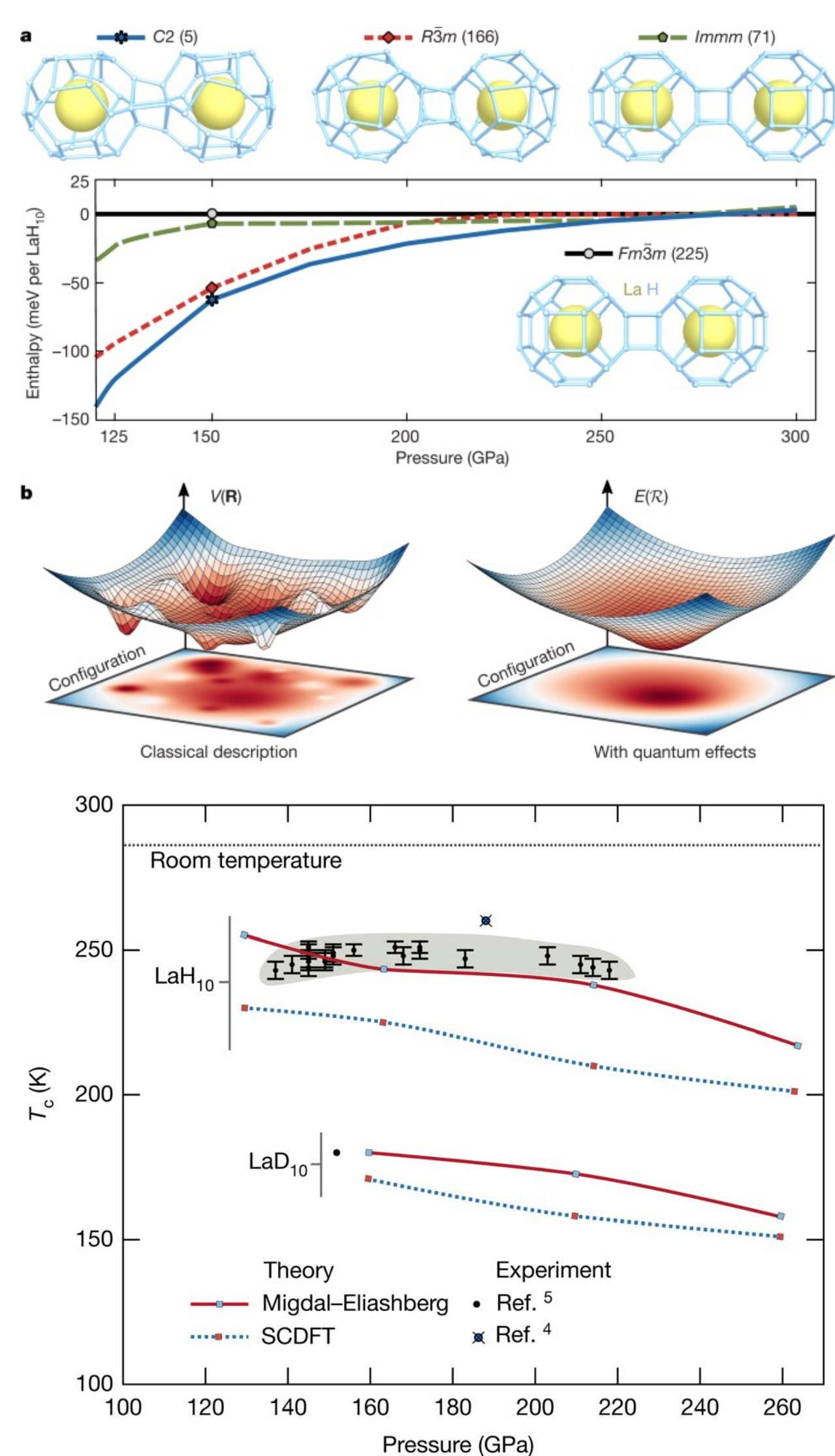
Phys. Rev. Lett. 125 117204 (2020)
arXiv:2210.07740

スピン空間群の同定手法の確立と物性予測

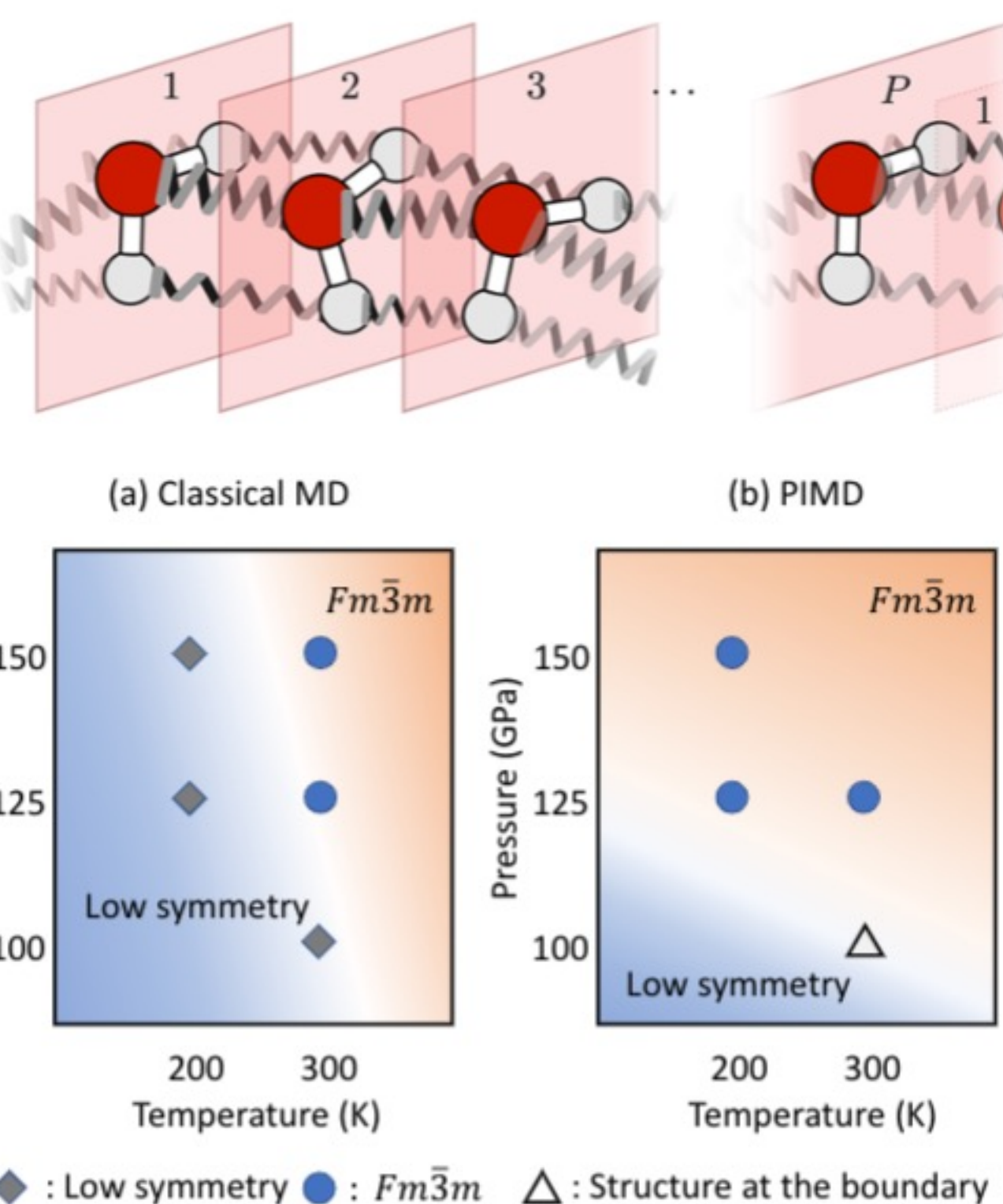


超伝導体の研究

水素化物超伝導体

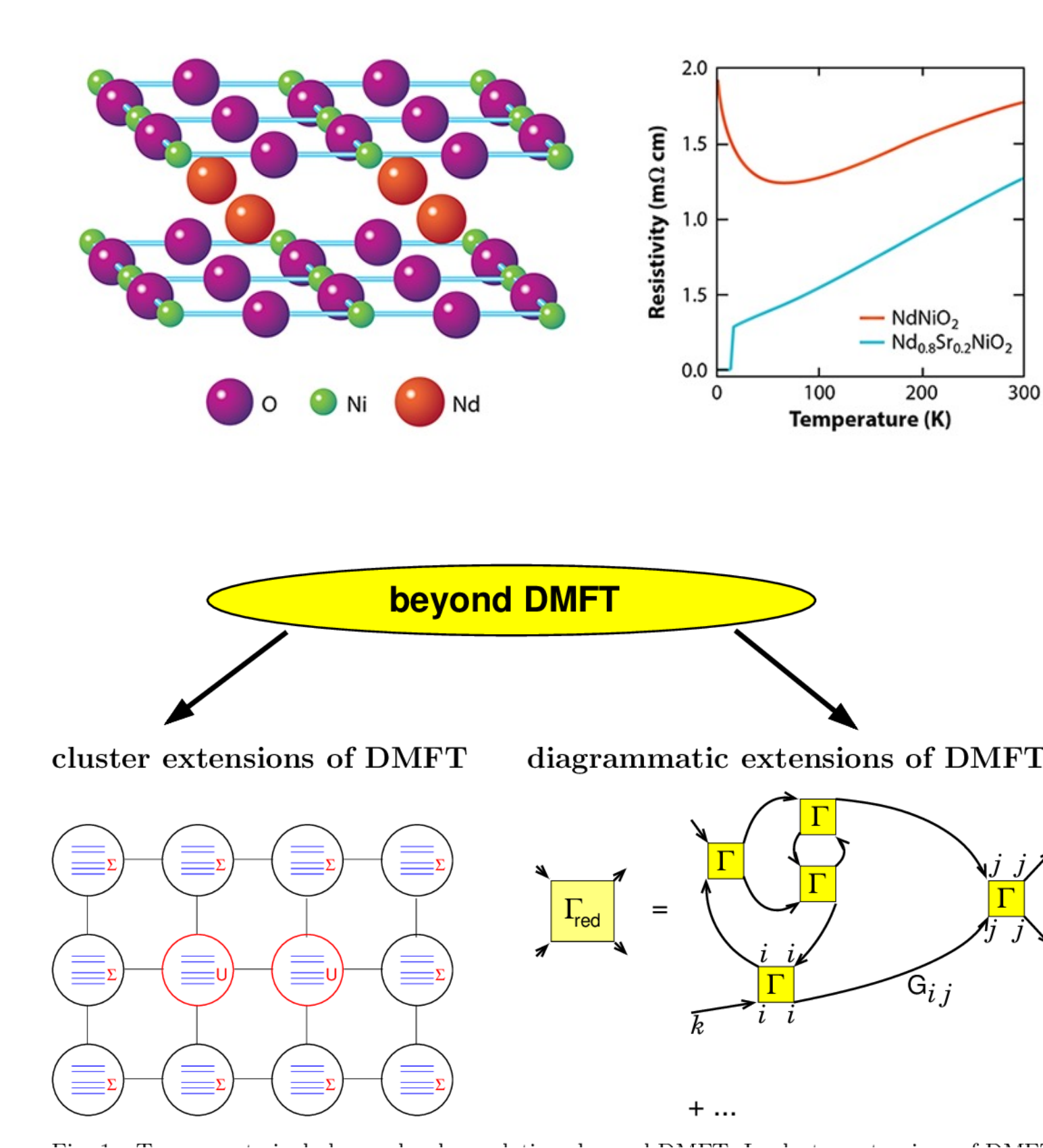


量子効果、非調和フォンを考慮した超伝導の第一原理計算
経路積分分子動力学法によるシミュレーション



Nature 578 66 (2020)
Phys. Rep. 856 1-78(2020)
Phys. Rev. B 105, 174111 (2022)

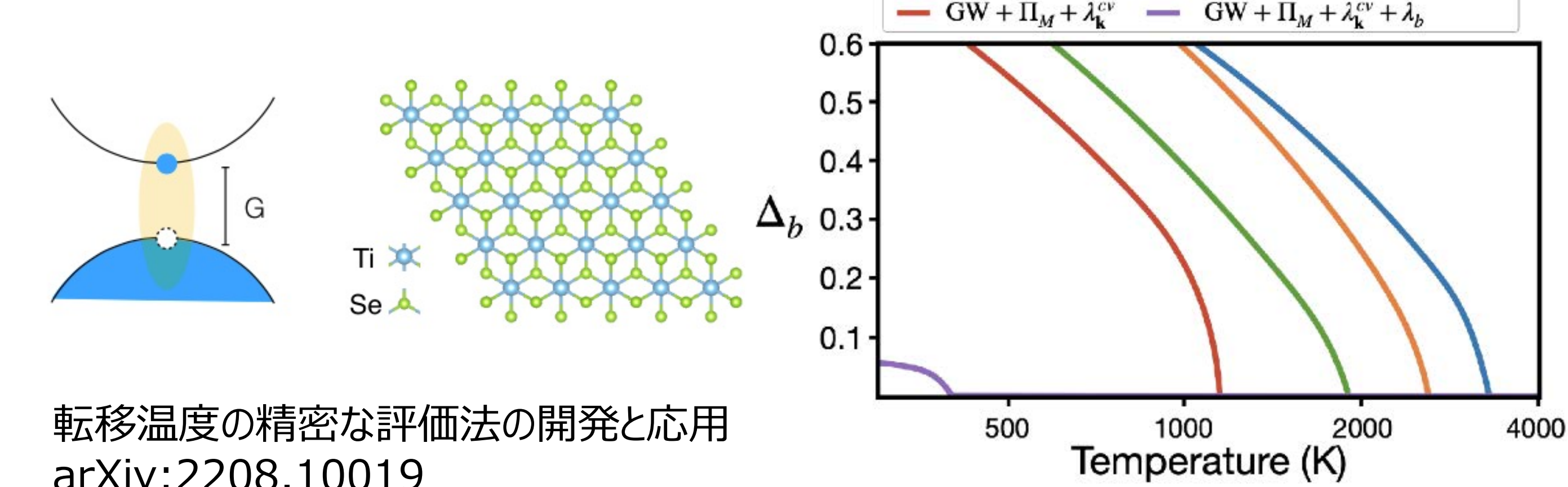
ニッケル酸化物超伝導体



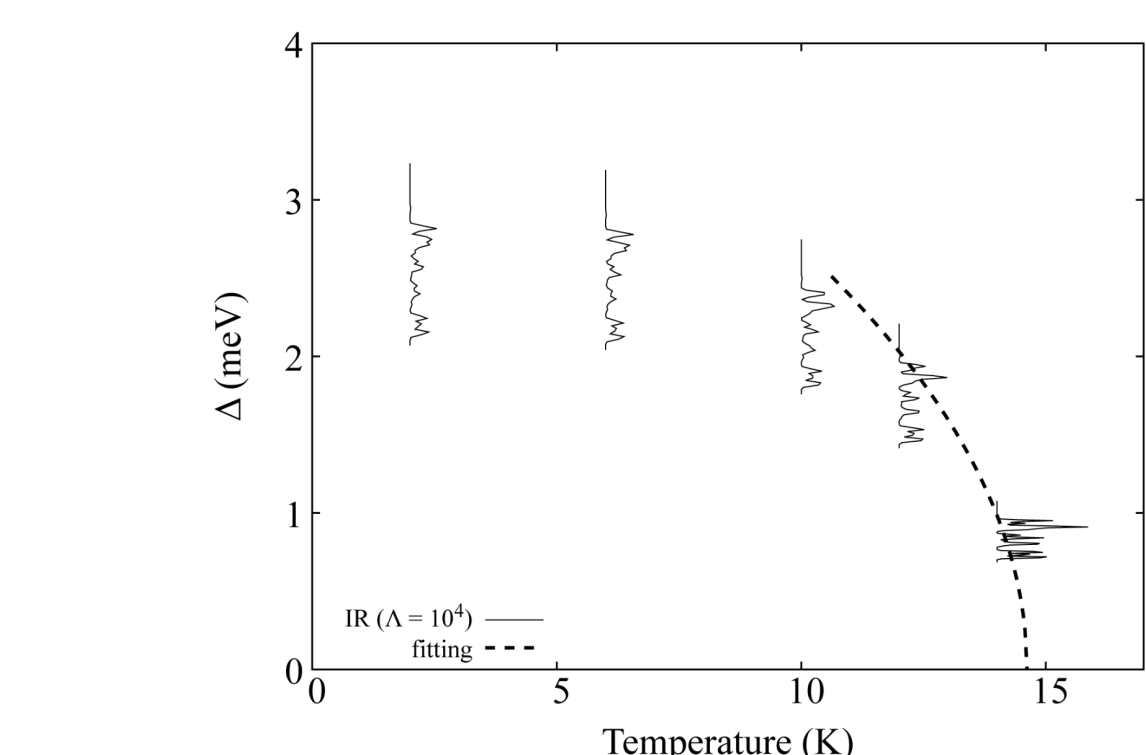
J. Phys. Materials 5 034005 (2022)
Rep. Prog. Phys. 85 052501(2022)

To appear in Phys. Rev. Lett.
(Editors' suggestion)

関連話題：エキシトニック絶縁体



超伝導の効率的な第一原理計算手法の確立



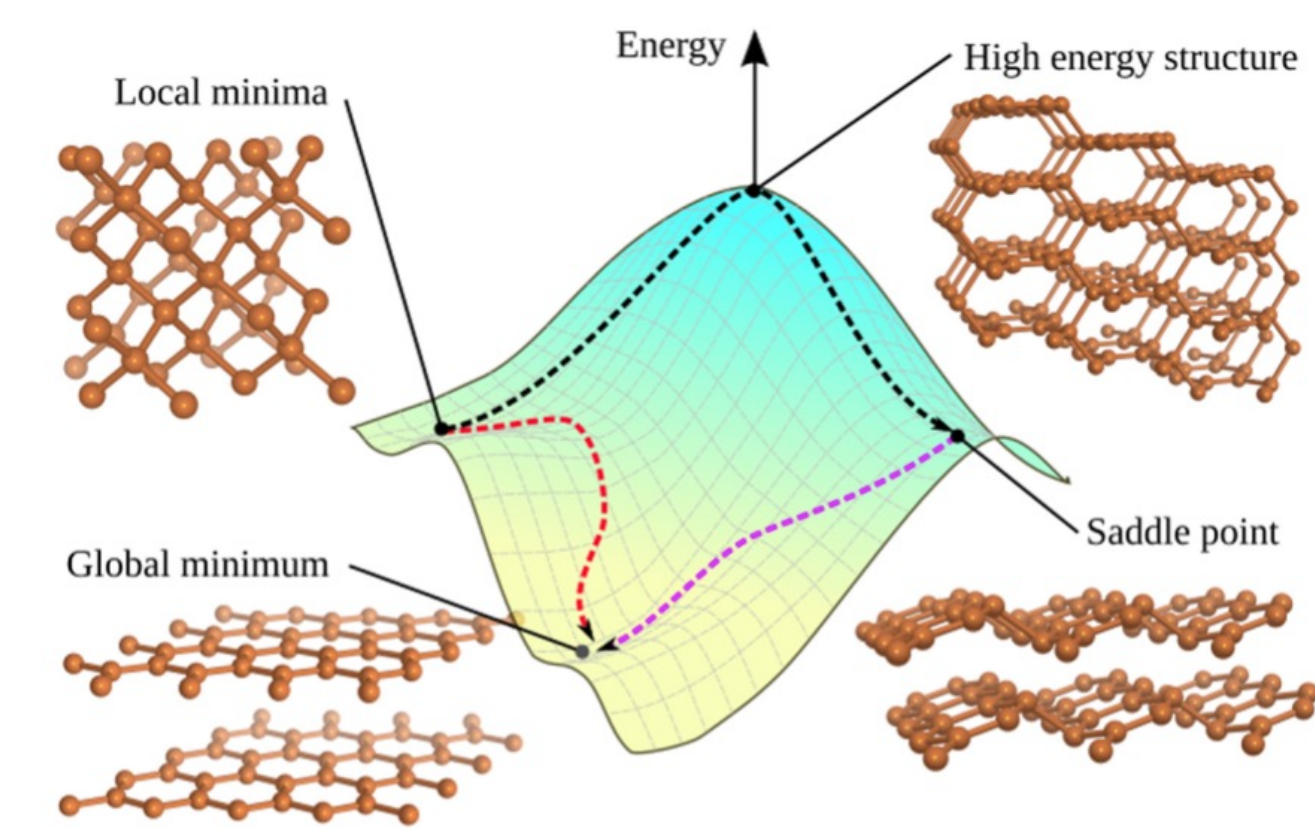
参考文献 (宣伝)



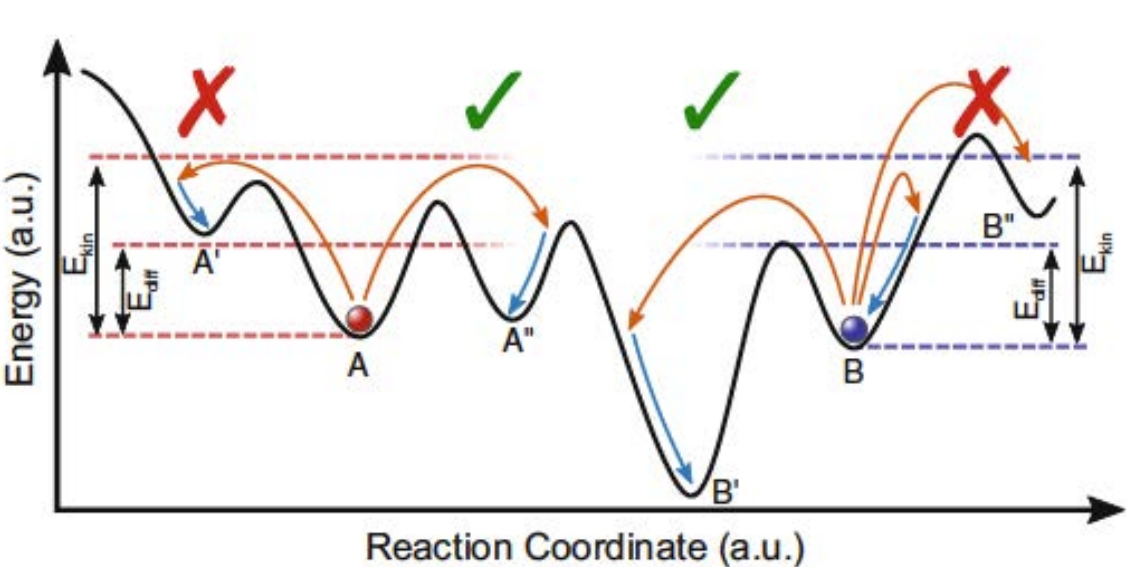


結晶構造予測

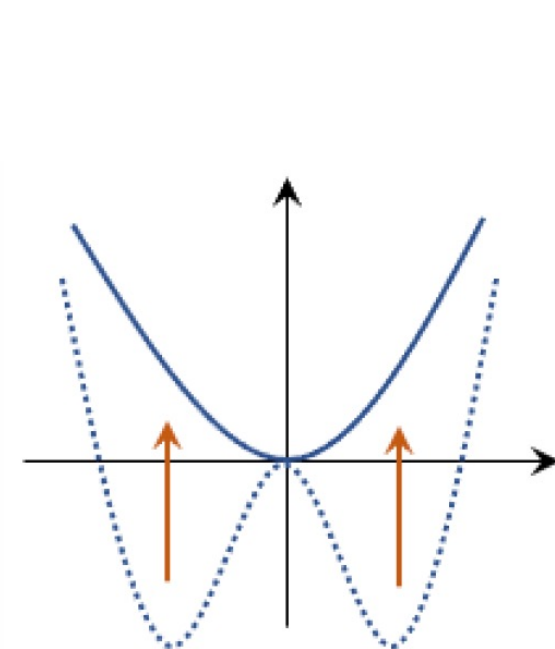
磁性エレクトライドの探索



化学式から結晶構造を予測するのは困難
Minima hopping法

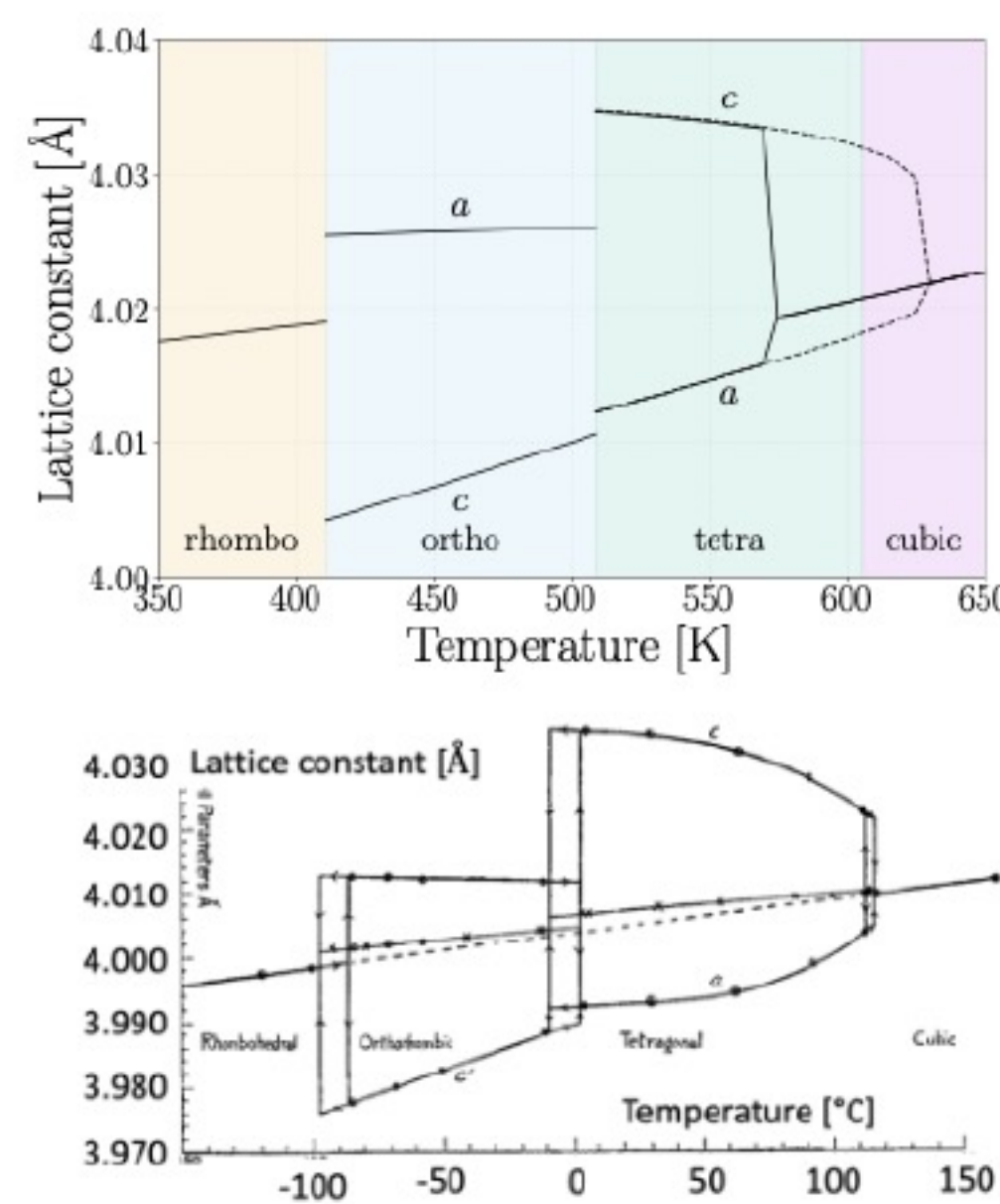
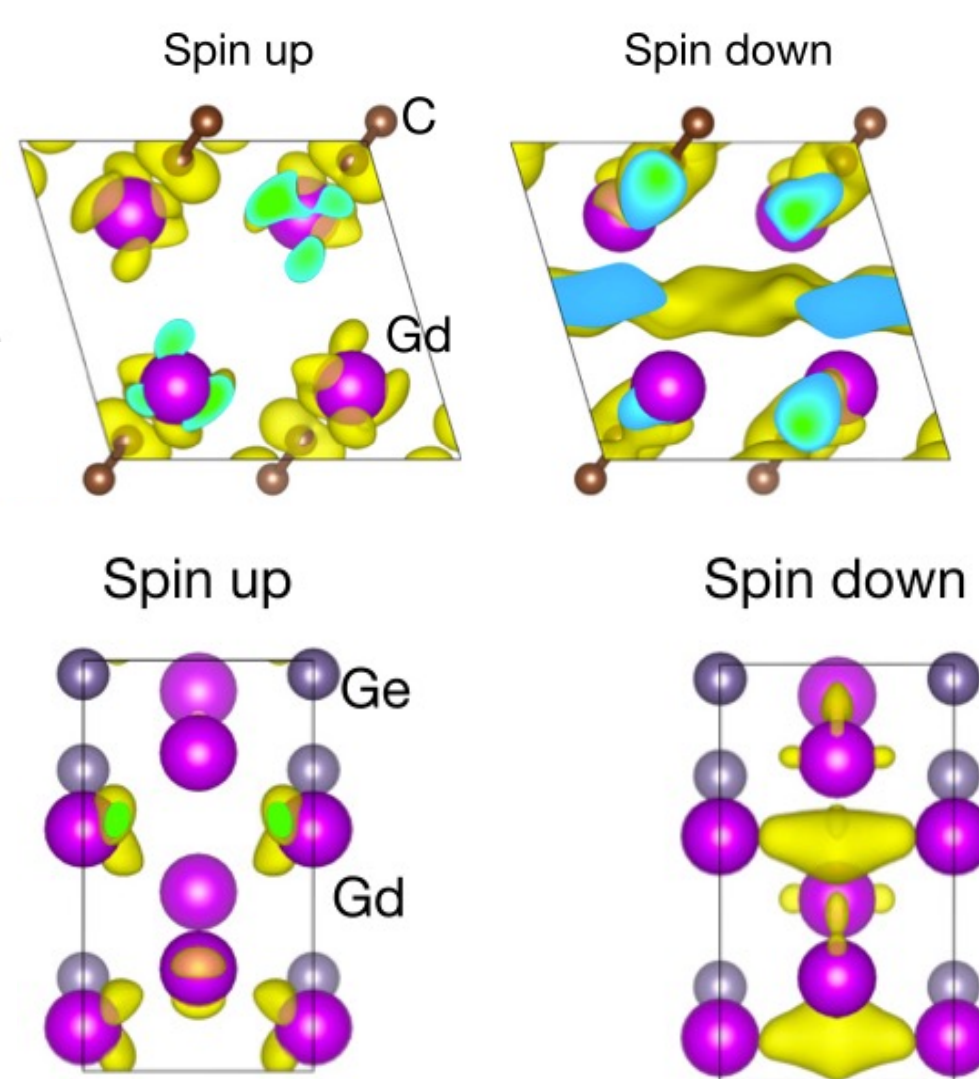
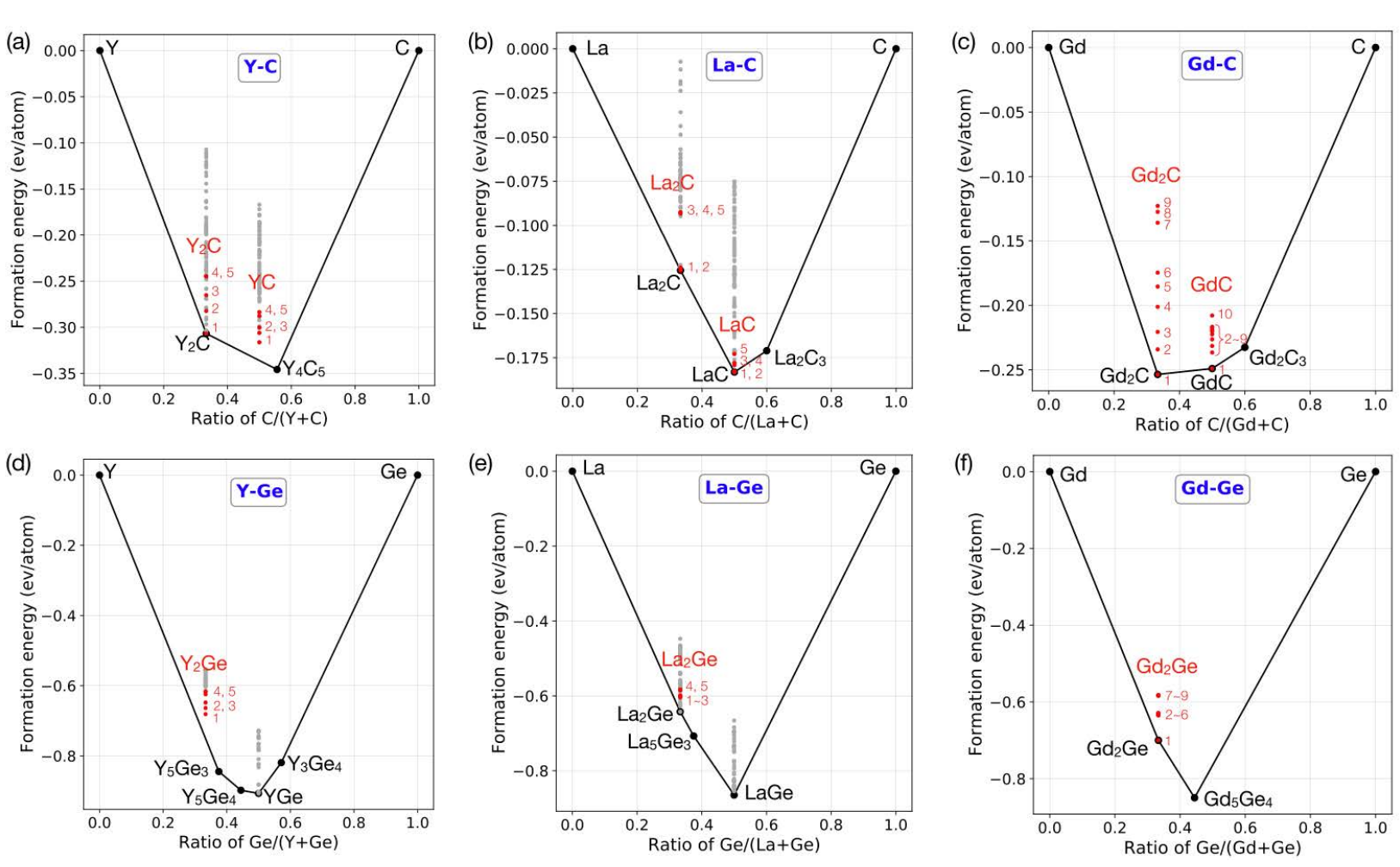


有限温度の構造最適化

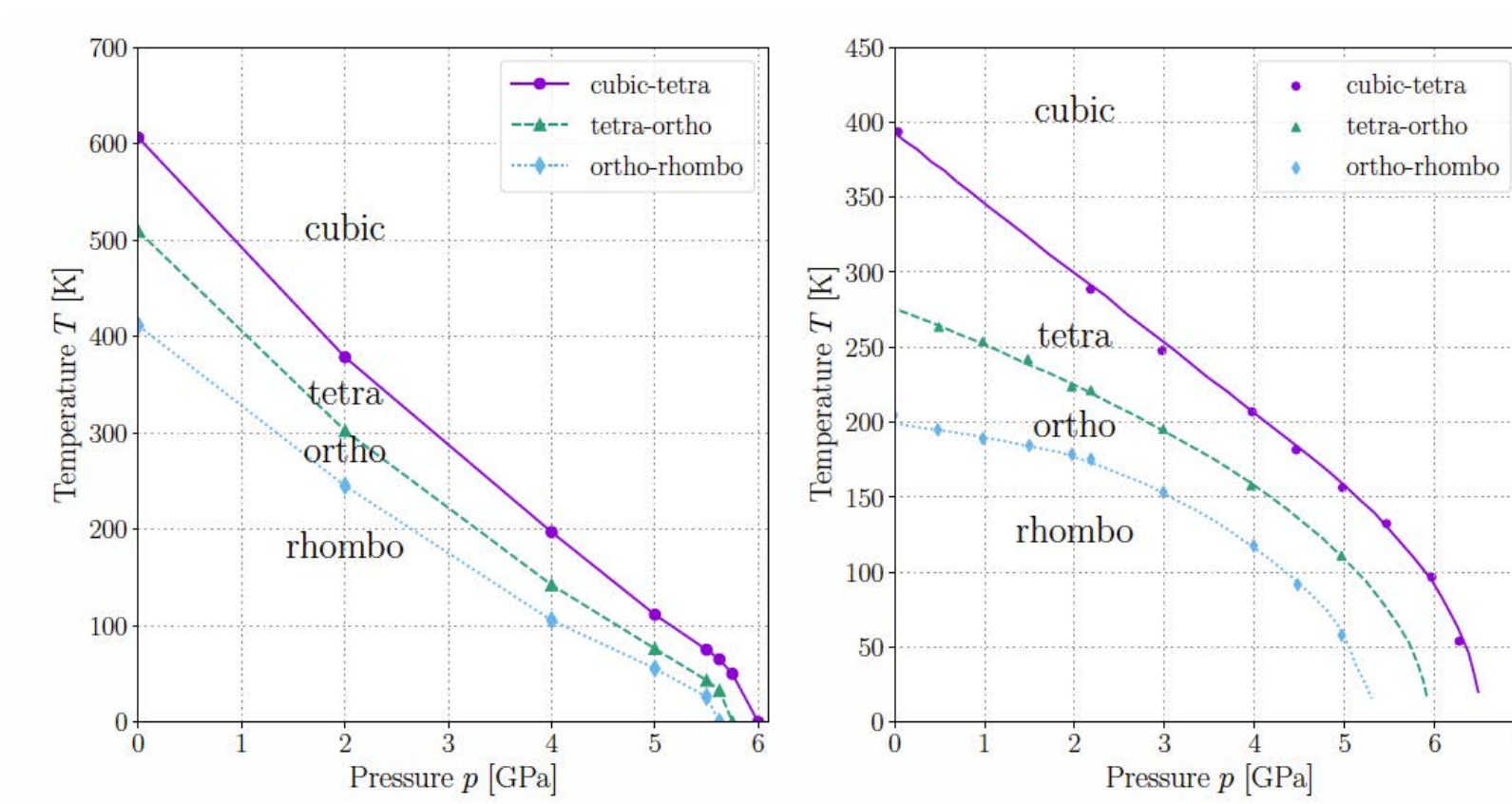


フォンの多体効果
(非調和項)に由来する自己エネルギーの効果を考慮して自由エネルギーを最小化

$$\begin{aligned} \Sigma &\approx \uparrow \circ + \downarrow \circ \\ &= \uparrow \circ + \downarrow \circ + \uparrow \circ + \downarrow \circ + \dots \\ &+ \uparrow \circ + \downarrow \circ + \dots \end{aligned}$$



BaTiO₃の三段階の相転移を精密に再現

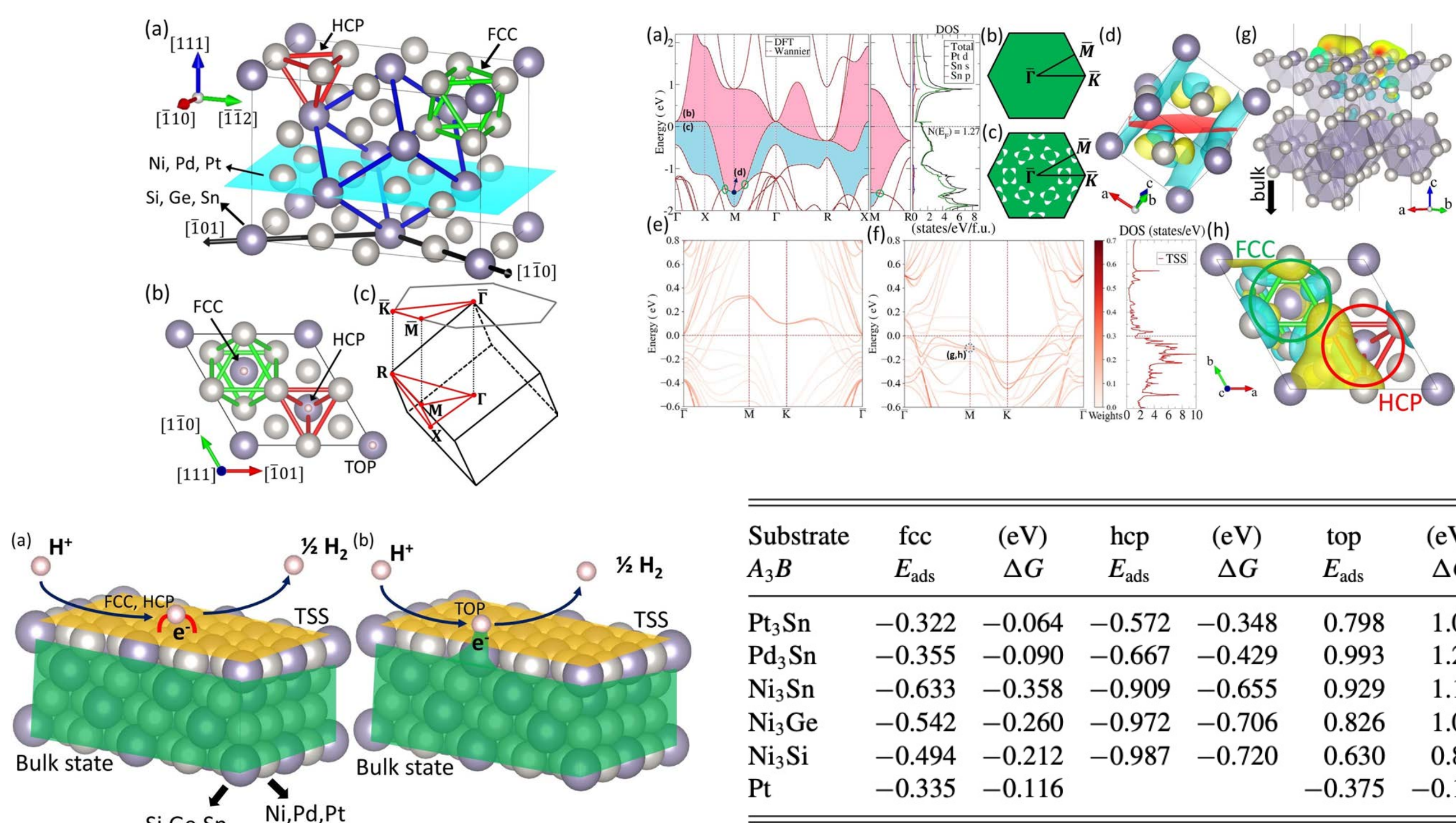


Phys. Rev. B 106 224104 (2022)

Phys. Rev. Materials 5, 044203 (2021) Editors' suggestion

トポジカル触媒

トポジカル表面状態を触媒に？



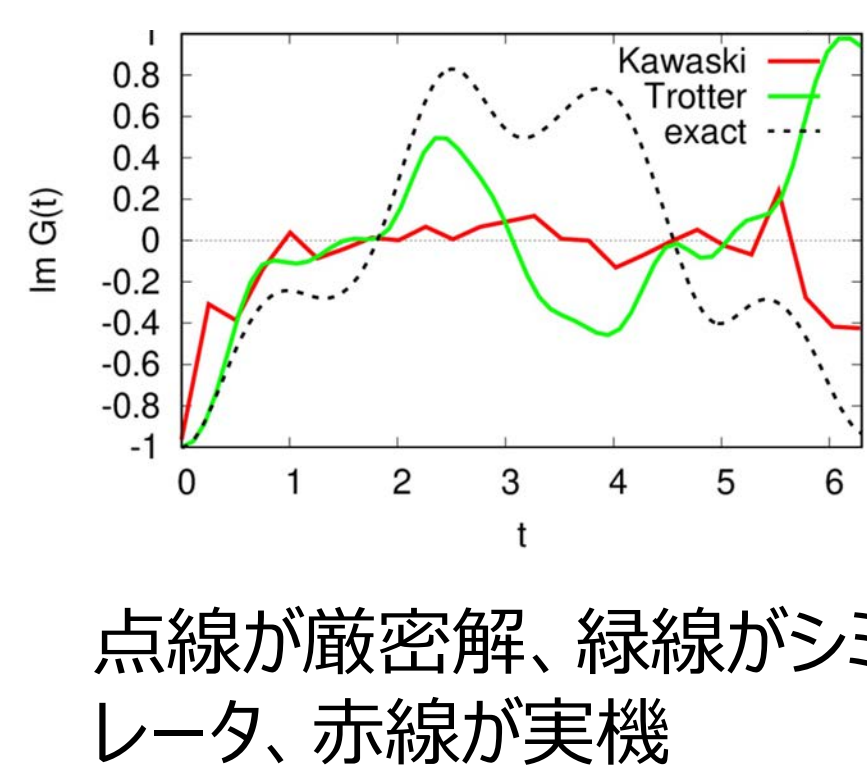
Phys. Rev. B, 106 165120 (2022)

量子コンピュータを使ったシミュレーション

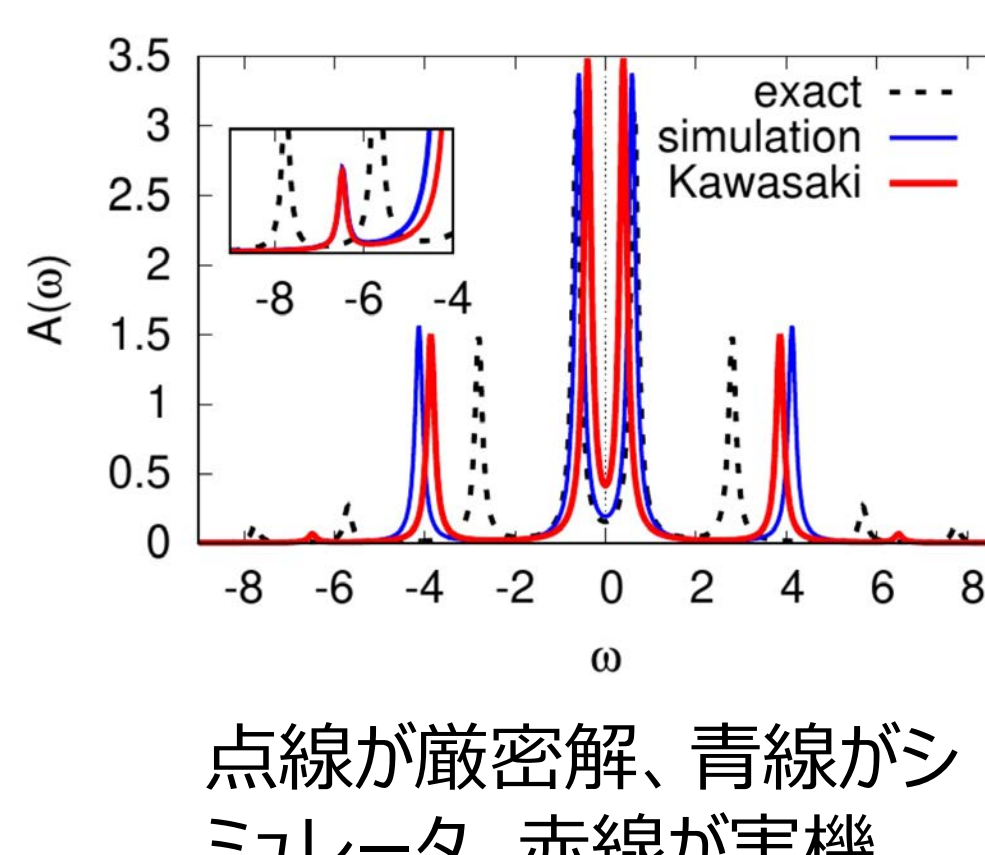
物性物理に興味があるのは物質の応答、あるいは非自明な相。量子化学の分野でよく計算されるエネルギーだけでなく、動的な量を計算する必要がある。鍵になるのはグリーン関数の計算。

$$G_{ab}^R(t) = -i \langle \psi | T_t \{ c_a(t), c_b^\dagger \} | \psi \rangle$$

Hubbard-Holstein模型 (電子=フェルミオンとフォノン=ボソンを含む) の解析



Hamiltonianの三重対角化
量子回路の大幅な簡素化



arXiv:2301.01860

先輩の声

増木亮太 (MERIT, 学振)

私が研究室を仕切る隊長です。有田研では色々な国籍の色々な分野の人が色々な研究をやっています。右の写真はAPSでの記念写真です。公用語は中国語です。毎日楽しいです。

畑中樹人 (理研JRA)

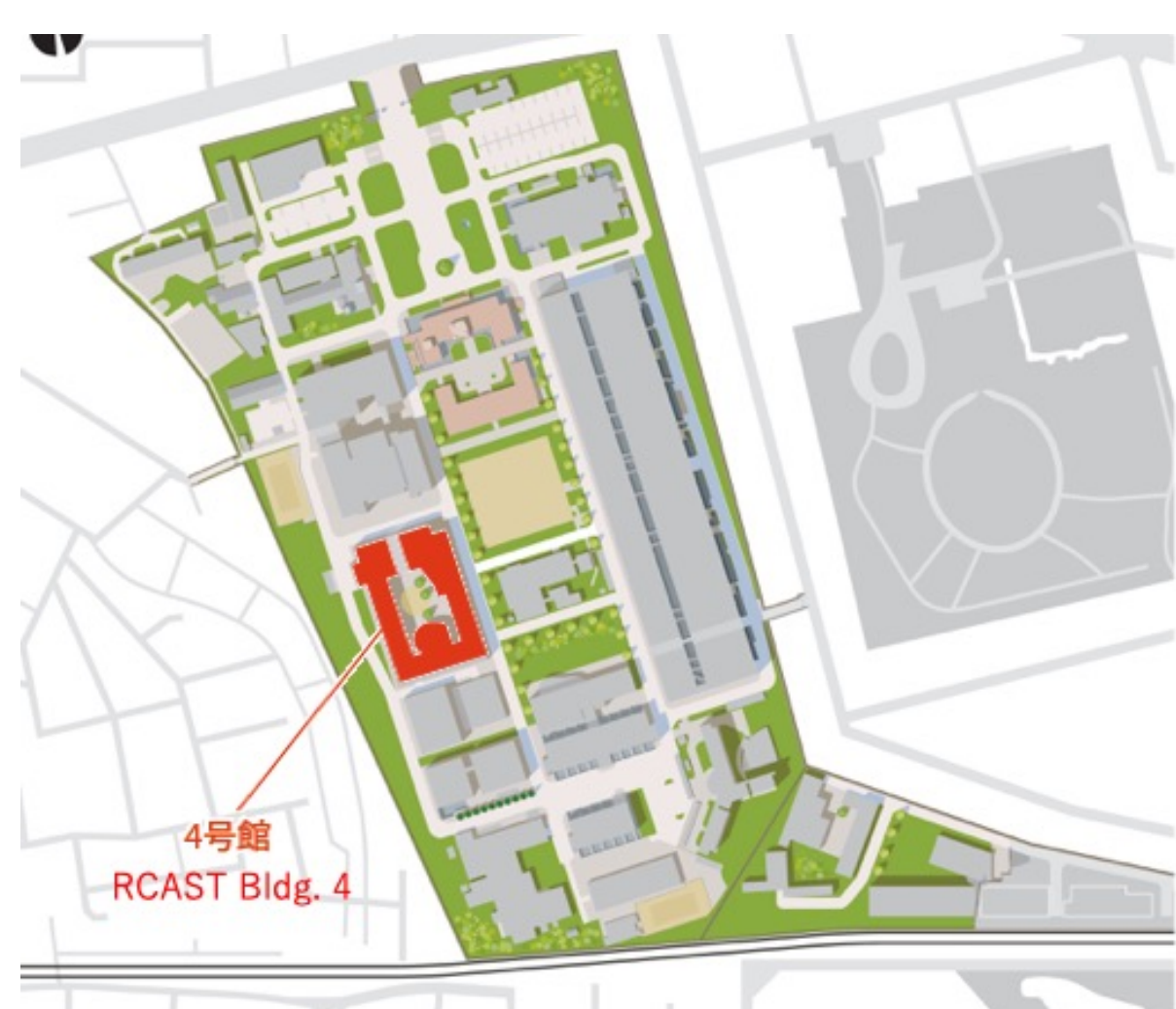
山が好きなので、研究室から富士山が見えるのが嬉しいです。今度山でライバルのクマに会った時は研究成果を見せつけて完全にぶちのめつもりです。

松永 響 (MERIT)

建築学科からやってきました。物理の勉強は毎日とても大変ですがやりがいがあります。先輩は皆親切で最高です。下宿も決まって研究に打ち込んでいます。



アクセス



小田急線/東京メトロ千代田線・代々木上原駅より徒歩12分
小田急線・東北沢駅から徒歩8分

京王井の頭線・駒場東大前駅西口から徒歩10分
京王井の頭線・池ノ上駅から徒歩10分