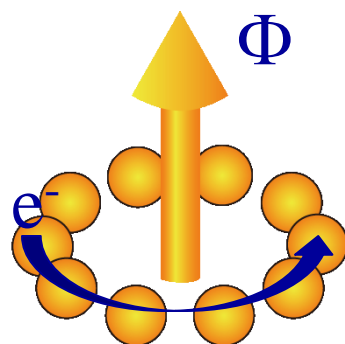


# 草部研究室

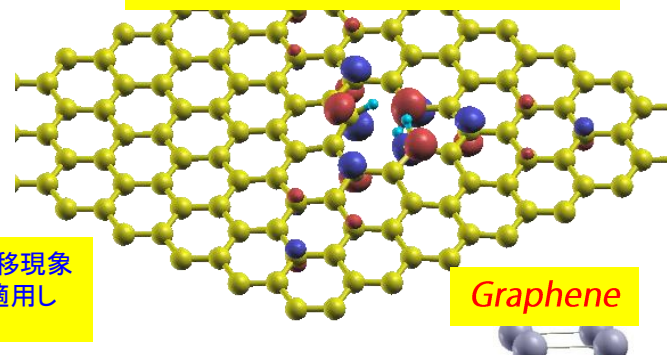
## 理論物質科学グループ (草部)

物質中で電子系が示す量子的相関運動の精密計算手法を、量子統計力学と密度汎関数理論を拡張して開発し、磁気・超伝導などの多体現象を解明しています。ゲージ自由度の変動も用いたシミュレーションを実施して、荷電・スピンの秩序形成を判定します。そして、ナノ炭素系やナノ粒子形成触媒など新規物質系の特性解明と予測までを行います。量子力学的効果による物質機能を発現する未来型物質の創成を目指します。

### 量子的相関運動の精密計算手法の開発と応用



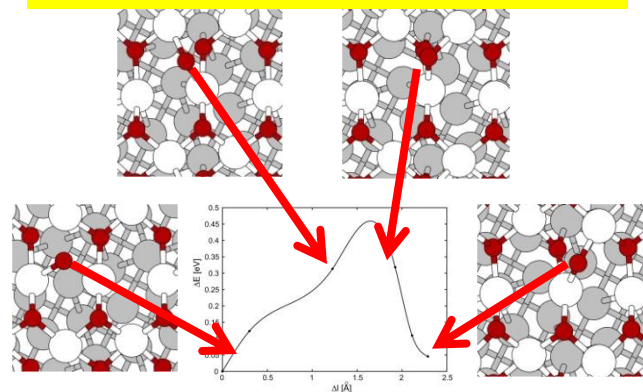
水素化グラフェン欠損には局在電子軌道(ゼロモード)が現れ、強相関効果による近藤状態が形成されることを示しました。



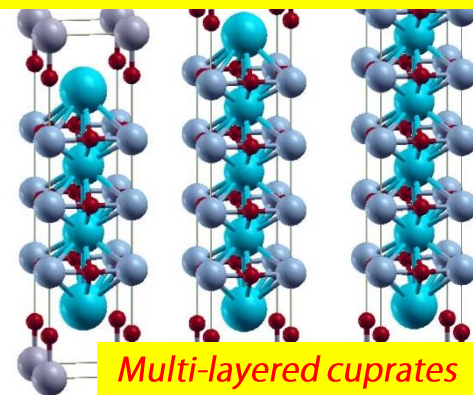
Graphene

ゲージ自由度が与える効果に着目した相転移現象の同定方法を開発し、電子やスピンの系に適用しました。

貴金属Pd上の酸化被膜に生じる、活性酸素運動性を理論計算から予測して、触媒機能の発現機構を提言しました。



層状超伝導体の電子ペア層間ホッピングによる高温超電導機構も提言しました。



Multi-layered cuprates