
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 有田研究室
University of Tokyo, Graduate School of Engineering, Department of Applied Physics,
Arita Laboratory

(1) 研究室の概略

本研究室では、第一原理的、非経験的計算手法に基づいた物性物理学の研究を行っています。非経験性に注目しているのは、実験事実の説明、再現だけではなく新超伝導体や新熱電材料などの新機能物質の設計を行う可能性を視野にしているからです。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たいと考えています。解析手段としては、密度汎関数理論に基づくものや、密度汎関数理論とモデル計算の融合によるものなど、状況に応じて柔軟に対応するようにしています。

研究対象としては、機能物質としての将来性や可能性を感じさせるものや物性理論上の新概念と密接に関連し特異な物性をもつ物質群に興味を持っています。

最近のいくつかの研究例を以下にご紹介すると

(a) 鉄系超伝導体

鉄系超伝導体は鉄の5つの d 軌道がすべて低エネルギーの物理にからむため、低エネルギー有効モデルの構築が難しい系です。我々は最局在ワニエ関数を基底にとったモデルの導出に取り組んできました。ハミルトニアンの一項目だけでなく、Hubbard U などの相互作用項、電子格子相互作用項、スピン軌道相互作用項、不純物ポテンシャルの大きさなど、この系の物性を微視的に計算する上で必要なパラメータのほぼすべてを世界にさきがけて評価してきました。これらの情報を用いて、磁性や超伝導対称性についてのモデル計算を実行しています。

(b) スピン軌道相互作用の強い系

$5d$ 遷移金属化合物や重い電子系などの有効モデルの導出とその詳細な解析にも世界にさきがけて取り組んできました。前者については、銅酸化物の $J_{\text{eff}} = 1/2$ analogとして注目を集めている Sr_2IrO_4 や Ba_2IrO_4 が単純なMott絶縁体ではないことを明らかにしています。後者については、 URu_2Si_2 の隠れた秩序の秩序変数の決定を行っています。また、 BiTeI などの巨大ラッシュバ系やトポロジカル絶縁体の電子状態の研究にも取り組んでいます。

(c) 炭素系超伝導体

フラーレン超伝導体や芳香族超伝導体の低エネルギー有効モデルの導出とその解析も行っています。フラーレンについては、超伝導密度汎関数理論の計算も行いました。これは分子性物質に対する世界ではじめての超伝導密度汎関数理論の計算になります。

(d) 超伝導密度汎関数理論の開発

非従来型超伝導体を記述する超伝導密度汎関数理論の開発に興味を持って取り組んでいます。特に最近ではプラズモン機構の超伝導を記述する交換相関カーネルの開発を行いました。

(2) 研究室の構成

研究室は准教授の有田亮太郎、助教の酒井志朗と4人の大学院生(D3 明石 遼介、D2 野村 悠祐、M2 林 克起、M2 富内 達矢)の計6名から構成されています。研究室自体は非常に小規模ですが、国内外の理論、実験グループと出来るだけ積極的に共同研究を行うよう心がけています。海外からの短期、長期滞在も頻繁に受け入れています。

(3) 研究室の特色ある装置

研究ではどこにでもある計算機クラスターを使っているぐらいで、特色のある装置は特にありません。

(4) 連絡先

email: arita@ap.t.u-tokyo.ac.jp web page: <http://arita-lab.t.u-tokyo.ac.jp>