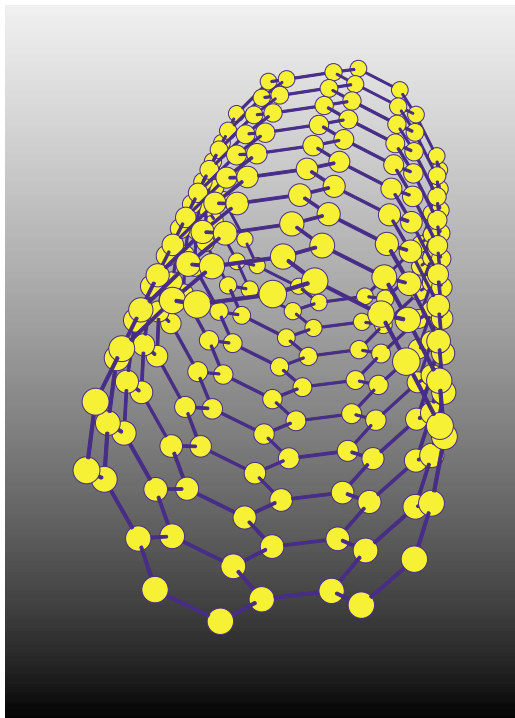
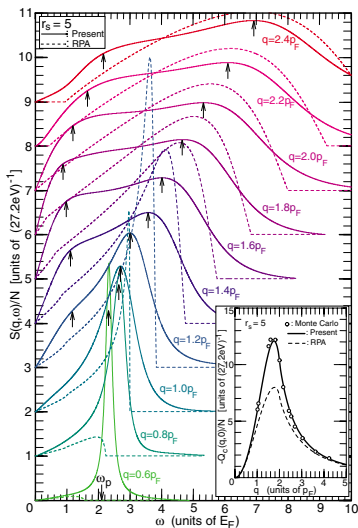


ミクロの世界の法則にもとづく物質の性質の理論的理解

半導体、磁性、超伝導など、物質の示すさまざまな性質を深く理解するためには、物質を構成している原子、さらには電子というミクロな世界から出発する必要があります。こうしたミクロの世界で運動する電子や原子は量子力学の法則にしたがいますが、その数は1立方センチメートルあたり 10^{23} 個程度という途方もない数です。物質の示すさまざまな性質を、電子や原子の集団に対する基本原理から出発して、理論的に理解しようとするのが物性理論です。理論と実験の緊密な協力があって始めて、物質科学の基本的概念の進歩が可能となります。



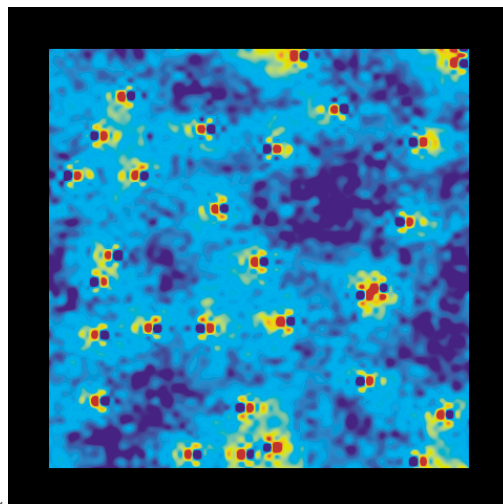
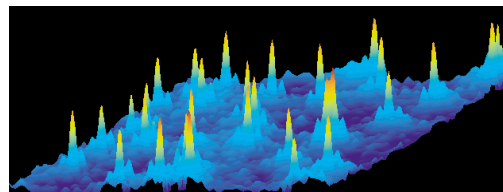
グラファイトシートを丸めた円筒状の物質、カーボンナノチューブ。カーボンナノチューブは理論的に興味深いだけでなく、その特性を生かした応用も注目されている。



自己エネルギー改定演算子法を用いて計算された自由電子ガス模型の動的構造因子

物性理論では、多体問題に対する厳密解や摂動論などの解析的手法ばかりでなく、量子モンテカルロ・シミュレーションや第一原理計算などを始めとする大規模計算がワークステーションやスーパーコンピュータを用いて実行され活躍しています。

物性研究所の理論部門では、高温超伝導、強い電子相関と磁性、メゾスコピック系、複雑系、高エネルギー分光、量子ホール効果、低次元系などを対象としてさまざまな手法を用いて研究が進められています。



磁性体の量子モンテカルロ・シミュレーションの例

第一原理分子動力学計算によるシリコン(001)表面に接触した水の解離吸着過程のシミュレーションのスナップショット

