

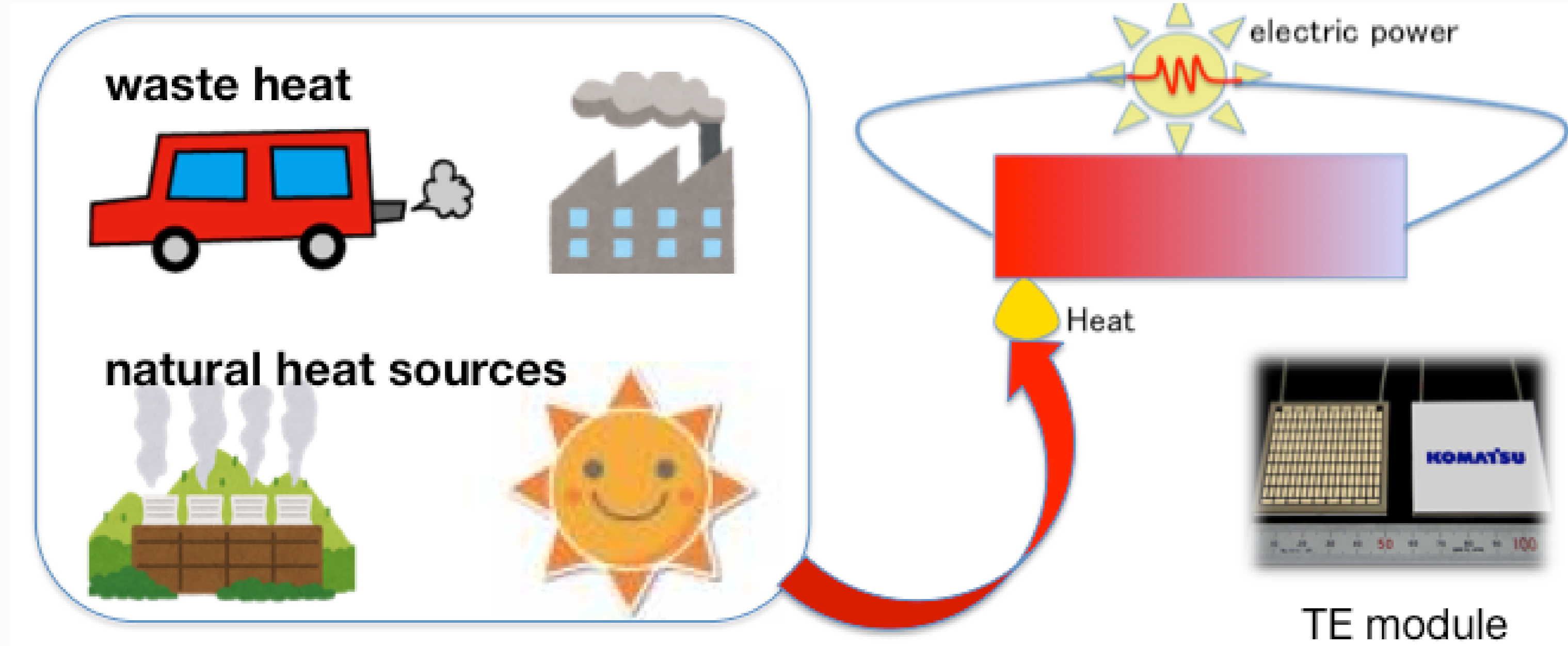
スパコンを用いた熱電変換材料の理論設計



金沢大学大学院自然科学研究科 計算物性研究室
 博士後期課程3年 学振特別研究員DC2 水田耀ピエール 協力:博士前期課程2年 澤端日華瑠

熱電変換の重要性

エネルギー問題: 熱ロスが投入エネルギーの**60%**

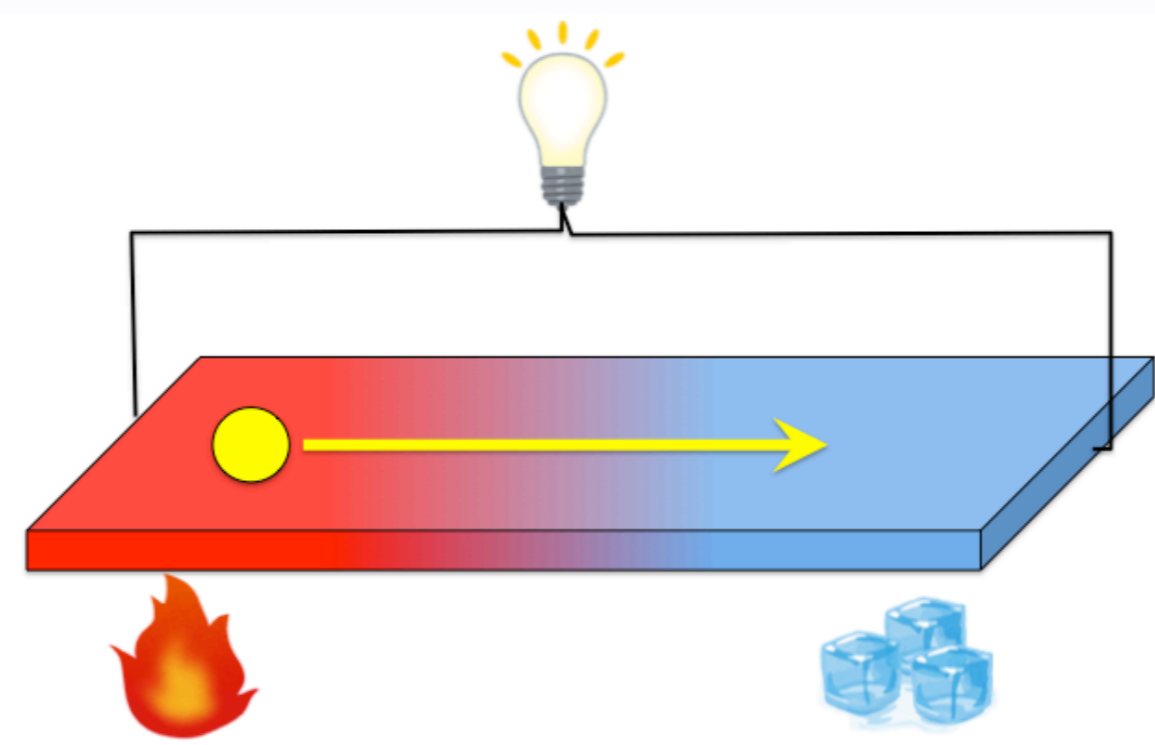


材料分野からの解決法 → 高効率熱電変換材料の探索

電気の2種類の取り出し方

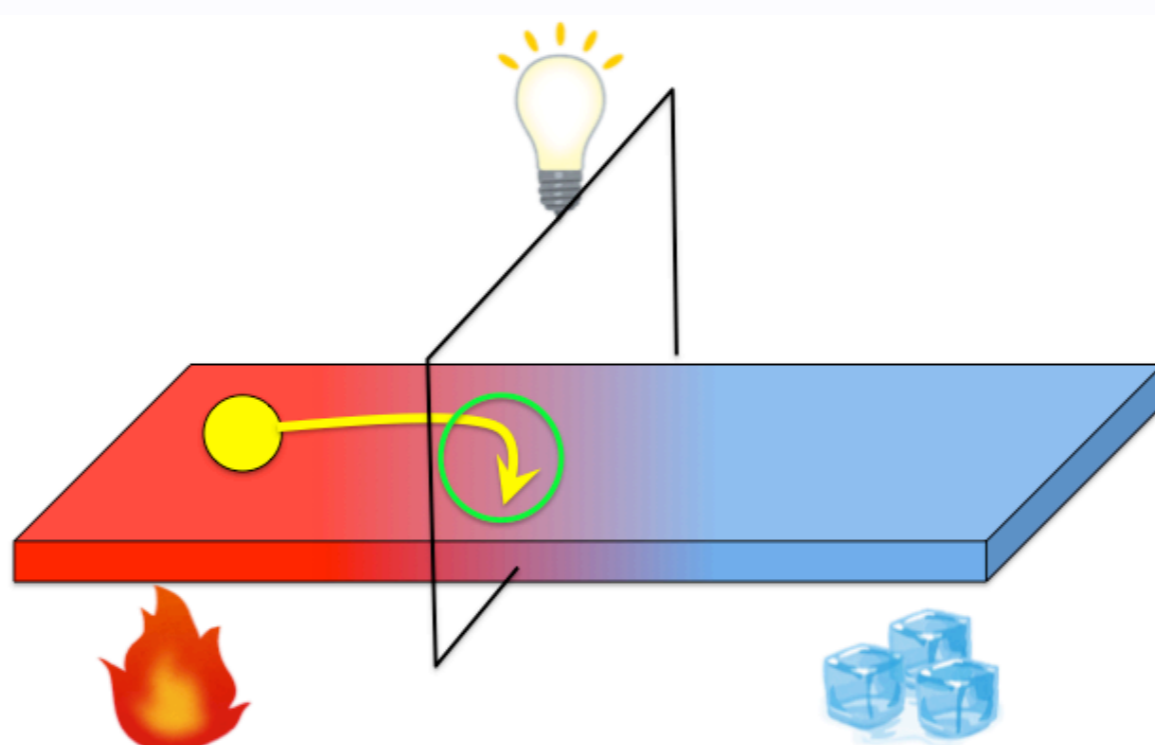
平行熱電変換(ゼーベック効果)

- 熱電変換研究の王道
- コスト、材料資源に問題あり



垂直熱電変換(異常ネルンスト効果)

- 新たな可能性を秘めた未開拓の変換
- 電子の屈折によって起こる
- 集積化に有利

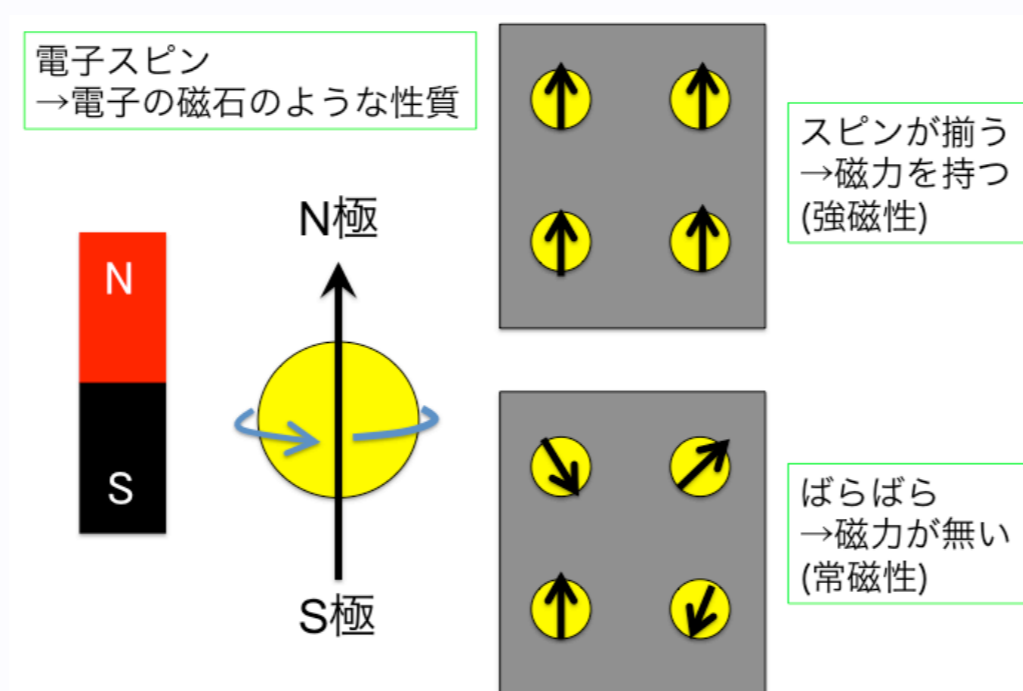


電子の屈折はなぜ起きる? → 電子スピンの構造

電子スピン

電子スピンとは?

→ 電子の持つ磁石のような性質、磁石にくっつくかどうか等の物質の性質を説明出来る

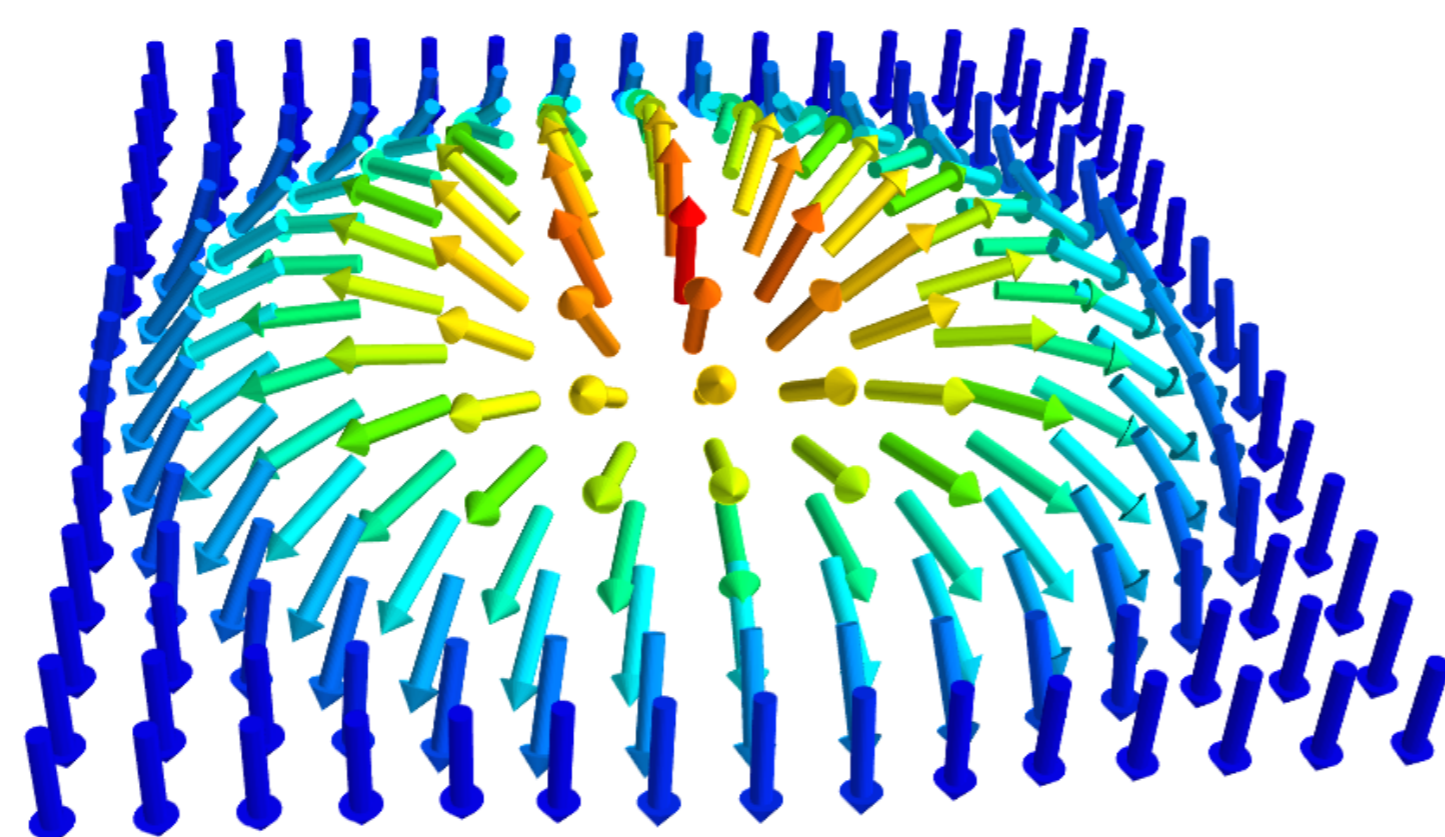


垂直熱電変換に必要な電子の屈折は電子スピンの構造と密接に関係する

垂直熱電変換材料の候補系 - スキルミオン結晶 -

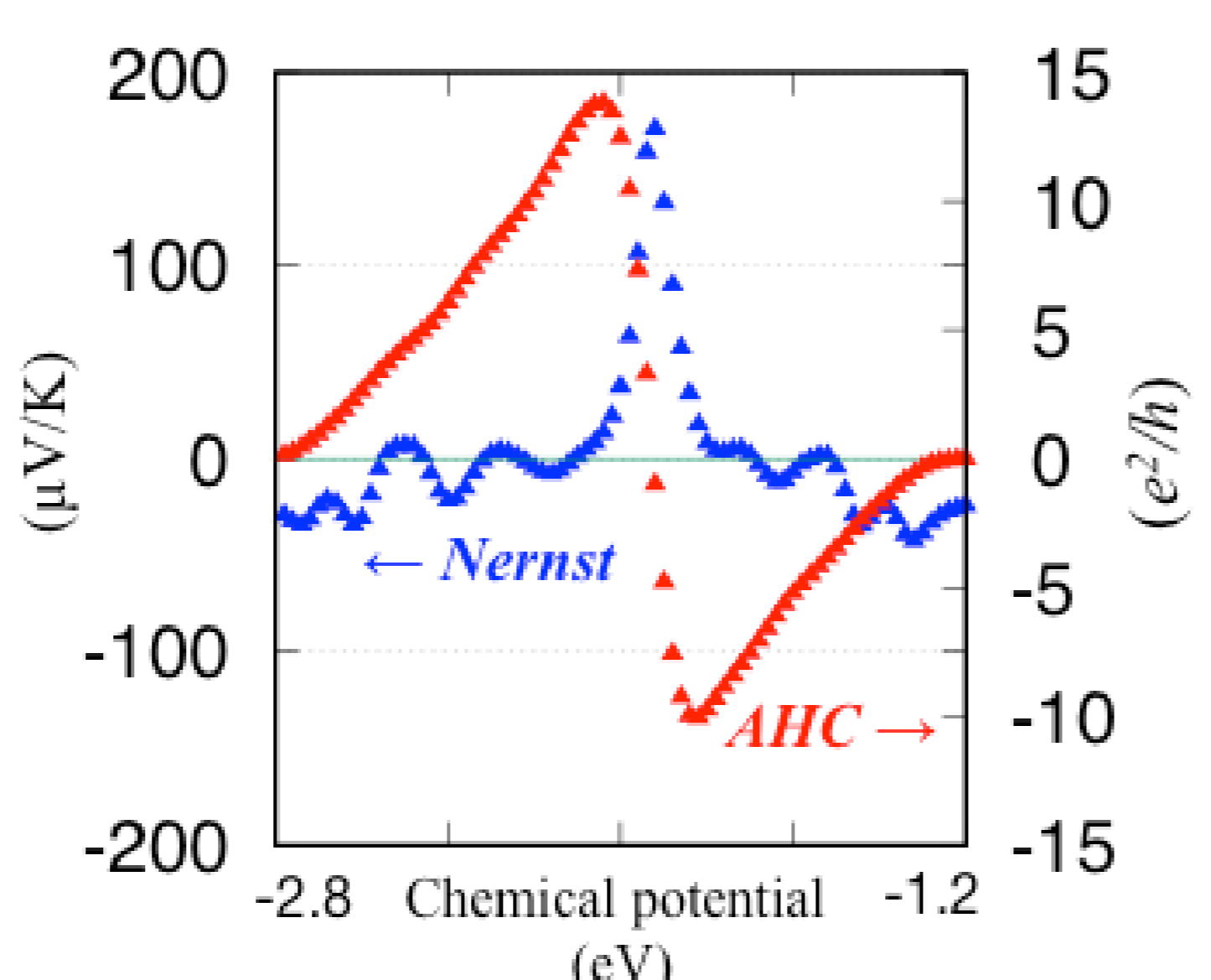
スキルミオン結晶

→ 近年注目されている、物質表面に実際に形成可能なスピン渦構造



スピン渦は大きな電子の屈折を引き起こせる

→ 従来の効率を遥かに超える垂直熱電変換の可能性



究極の物質設計 - 第一原理計算 -

物質は全て電子から出来ている

⇔ 電子を計算すれば物質の性質がわかる

電子を支配する方程式の計算 → スーパーコンピュータを利用

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$$

- 系の運動エネルギーを表す部分, 微分演算子
- 系の相互作用を表す部分
- 波動関数, 未知の部分
電気分極, 磁化, etc. の情報が詰まっている
- 系が取る事を許されるエネルギー, 未知
伝導体か絶縁体かの情報が詰まっている

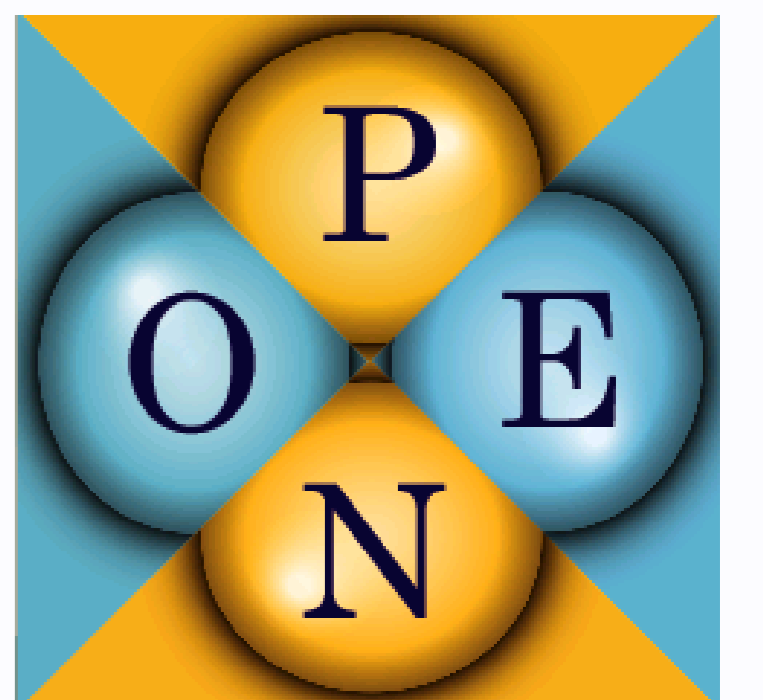
第一原理計算の利点

- 実験をせずに物質の設計が可能
- 表面や界面など、構造の特定が困難な問題への対処



計算コード (OpenMX) の共同開発

- 電子状態の計算結果から
- 熱電変換係数を計算するインターフェイス
- 電子の屈折の度合いを計算するコード (澤端) を開発 → 他研究グループへの貢献



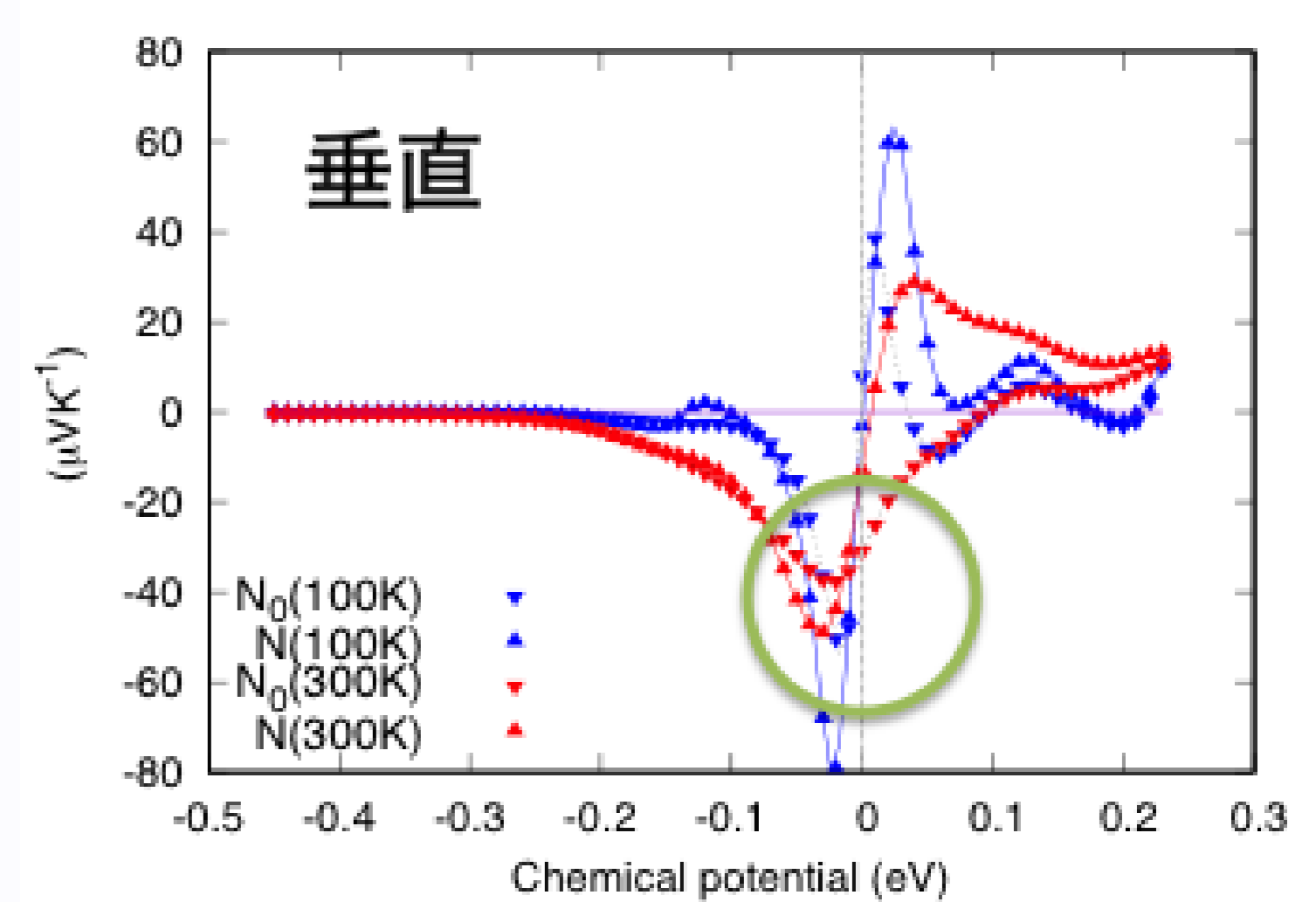
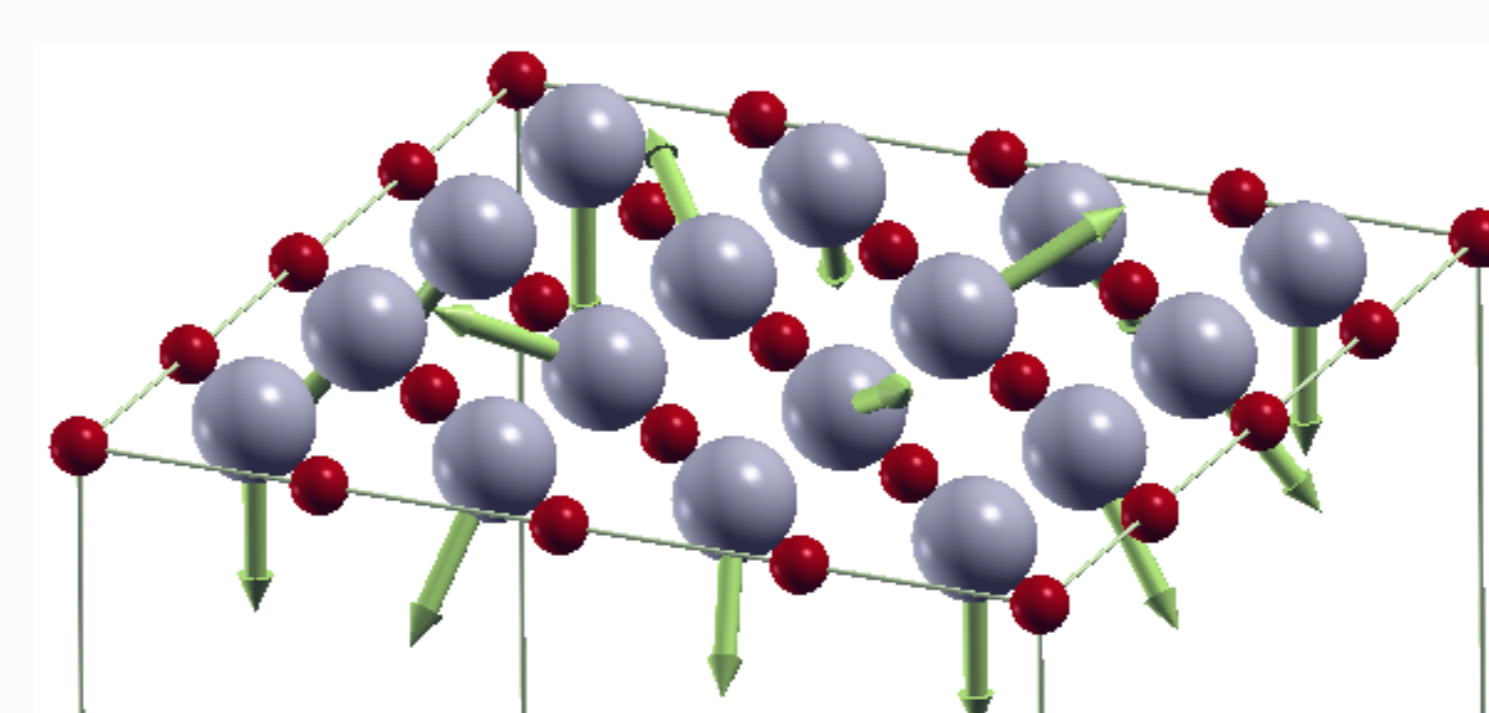
<http://www.openmx-square.org/>

EuO薄膜の熱電変換

スキルミオン結晶が形成される候補物質

→ (Fe, Mn, Co)(Si, Ge), SrFeO₃, EuO.....

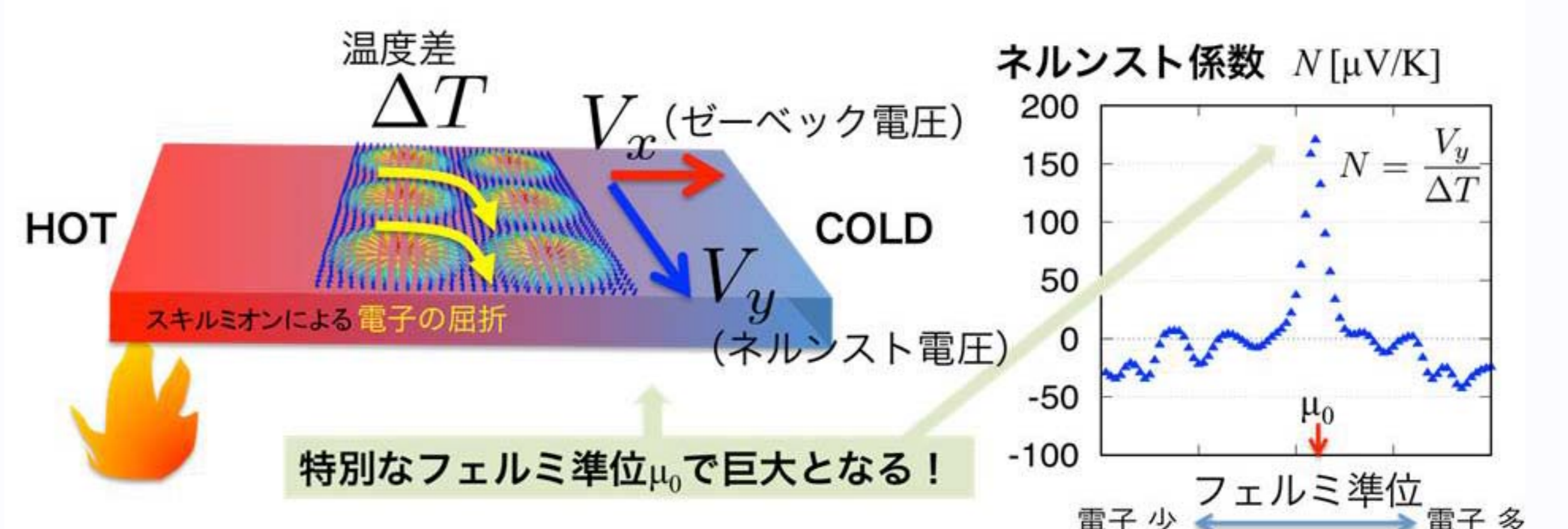
EuO薄膜に着目して計算を行った



平行熱電変換効率と同程度の垂直熱電変換効率を実現することを予言

プレスリリース

Scientific Report 6, 28076 (2016): 電子のスピンの生み出す巨大な熱電効果を予測



<http://www.kanazawa-u.ac.jp/rd/37801>