

量子力学シミュレーションによるトポロジカル物質の解析

金沢大学大学院自然科学研究科 計算物性研究室 指導教員: 石井史之
GS-GHRコース博士後期課程1年 澤端日華瑠 mail: info@hikaruri.jp

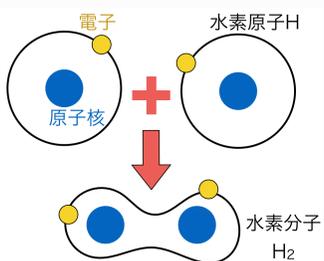
自己紹介

- hikaruri.jp管理人、富山県富山市生まれ
- 手品、将棋、バックギャモン、プログラミング
- 最近の興味: チェス、囲碁、ポーカー、強化学習

量子力学とシュレーディンガー方程式

物質の性質を解析するには？

原子 → 原子核(陽子+中性子)+電子
化学的性質で重要になるのは電子の振る舞い
(電子がわかれば大体わかる)



電子の挙動を解析するには？

電子を支配する方程式、シュレーディンガー方程式を解く。
(行列の固有値問題を解く)

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi = E \psi$$

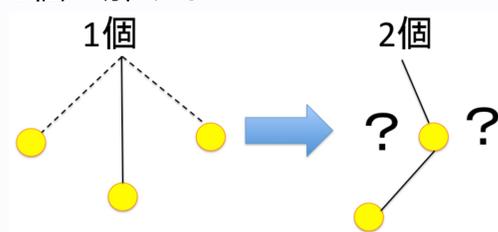
系のエネルギーを表す演算子(行列) 電子の波動関数(固有ベクトル)
電子の取れるエネルギー(固有値)

量子力学シミュレーション(第一原理計算)

多体問題の難しさ

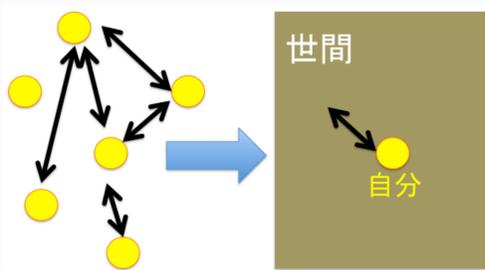
ディラック「物理法則は完全にわかっている、ただし厳密に適用すると複雑すぎて解けない」
シュレーディンガー方程式を現実の系でそのまま解くのは無理なので、大胆に近似をする(密度汎関数理論)。

古典力学の振り子の問題も2個は解けない



コーン=シャム方程式

シュレーディンガー方程式を一電子方程式に帰着

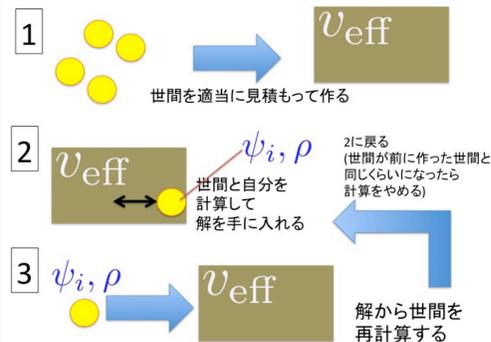


$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right) \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r})$$

- 一電子の運動エネルギー
- 一電子が世間から受ける作用
- 一電子の波動関数
- 一電子のそれぞれの状態でのエネルギー

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + v_{\text{xc}}(\mathbf{r})$$

電子と原子核の相互作用 電子-電子の相互作用(クーロン力)
量子力学的な相互作用(交換エネルギーと相関エネルギー)
近似した部分をコレで解消してと考えると良い

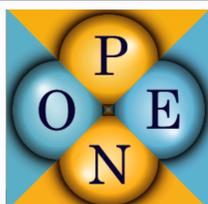


ψ_i と ϵ_i から元の方程式の一番小さなエネルギーにおける電子密度(波動関数の2乗)を計算することが出来る。

第一原理計算コード OpenMX

- 量子力学シミュレーションコード
- オープンソース(開発者として参加)

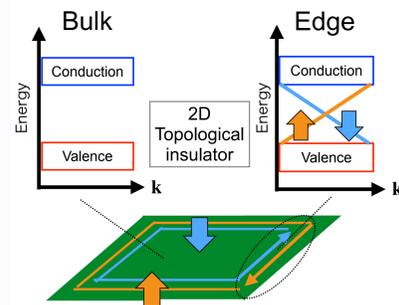
<http://openmx-square.org/>



Z₂トポロジカル絶縁体とスピン流電界スイッチング

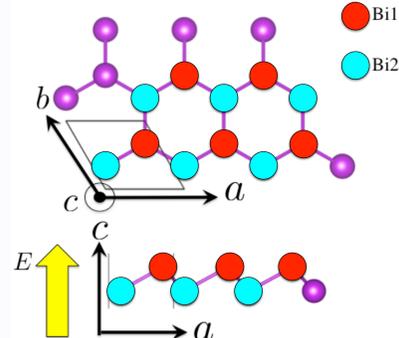
Z₂トポロジカル絶縁体

- エッジに非散逸スピン流
 - 対称性によって守られた状態なので不純物に対して安定
- スピントロニクス(電子のスピンを利用したエレクトロニクス)への応用可能性



Bi(111)薄膜

- Si(111)基盤に生成される薄膜物質
- 実験でZ₂トポロジカル絶縁体と確認されている

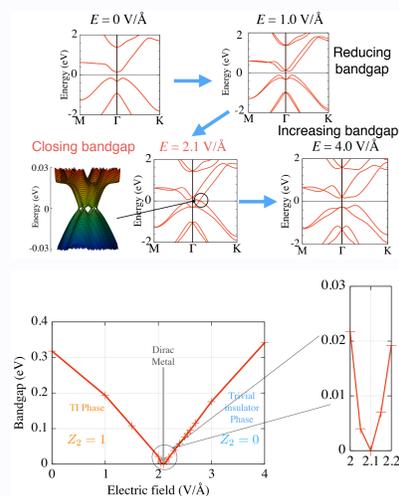


エッジのスピン流を電場でスイッチング可能か？

→ 電場中のBi(111)薄膜を計算

電界誘起トポロジカル相転移

- Bi(111)のトポロジカル絶縁体相が $E > 2.1 \text{ V/\AA}$ で通常の絶縁体へトポロジカル相転移
- Z₂不変量の計算とエッジの電子状態計算の両方で予言



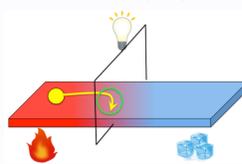
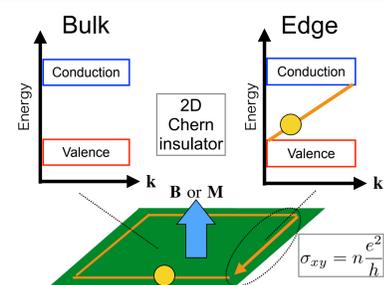
トポロジカル絶縁体の特徴付けるZ₂不変量の計算コードを実装(近日プラグインとして公開予定)

Hikaru Sawahata, Naoya Yamaguchi, Hiroki Kotaka and Fumiyuki Ishii, Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 030309 (2018). e-J. Surf. Sci. Nanotech., **16**, 427 (2018).

Chern絶縁体と熱電変換効果

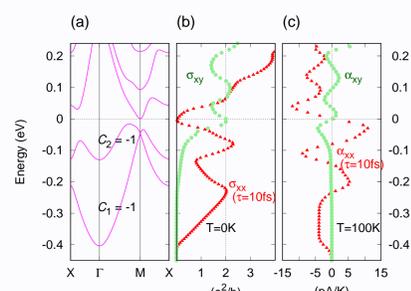
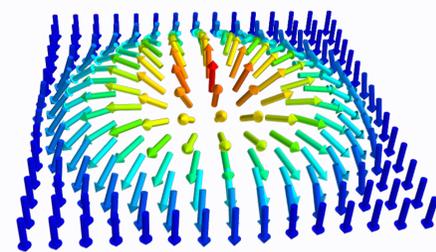
Chern絶縁体

- エッジに非散逸Hall電流
 - Hall伝導度 σ_{xy} が量子化
- 応用方法はあるか？
→ 垂直熱電変換材料に使える



Skymion結晶の垂直熱電効果

- EuO薄膜にSkymion結晶を形成し、電子ドーピングした場合、Chern絶縁体となる
- 従来の垂直熱電変換を超える効率を達成。



Chern絶縁体の特徴付ける

Chern数の計算コードを実装(近日プラグインとして公開予定)

Yo Pierre Mizuta, Hikaru Sawahata and Fumiyuki Ishii Phys. Rev. B **98**, 205125 (2018).