

コンピューターによって切り拓かれた究極の物質設計方法

-電子の情報だけから物質の性質を予測する-

金沢大学大学院 自然科学研究科 数物科学専攻 澤端 日華瑠 (ヒカルリ, hikaruri.jp)

自己紹介

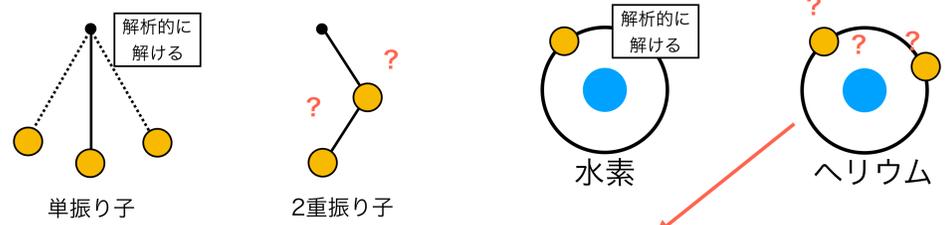
出身: 富山県富山市 在住: 石川県金沢市
 職業: デュエリスト(Magic the Gathering)、
 バックギャモンプレイヤー、手品師、
 将棋指し、駆け出し競技プログラマー、
 ツイッター(@hika_rururi)、プログラマー、
桑名七盤勝負金沢支部長
 バイト: 博士後期課程大学院生(D2)
 趣味: 飯、酒、ボードゲーム
 嫌いなもの: 努力すれば報われるという幻想



多体問題と第一原理計算

多体問題の難しさ

古典力学で有名な振り子の問題も二個になると解けない(二重振り子)



2個目以降の電子は**水素原子の解**にエネルギーが小さい順に
 1個ずつ入っていくと近似(パウリ排他律)
 →原子1個の場合はこれでいける、原子2個以上の場合?

コーン=シャム方程式(密度汎関数理論、第一原理計算)

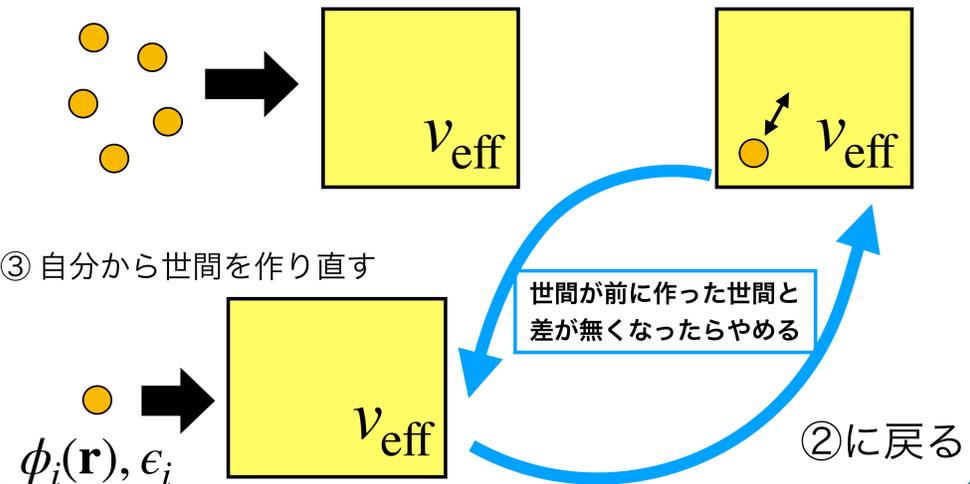
$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + v_{\text{eff}}(\mathbf{r})\right)\phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i\phi_i(\mathbf{r})$$

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

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i |\phi_i(\mathbf{r})|^2 = |\psi|^2$$

システムを自分と世間に分離する。

- ① 世間を適当に見積もって作る
- ② 世間と自分の相互作用を計算



物質科学の研究意義と量子力学

物質は原子から出来ている
 ⇔
原子の情報だけから
 物質の性質は**全て説明出来る**



電気が通る?
 磁石にくっつく?
 かたい or やわらかい?
 熱が通りやすい?

原子だけから物質の性質が予測出来るなら

- ・新しい物質の性質の予言
- ・実験で見つかった謎現象の原因を探れる
- ・**物質設計が実験をせずに可能に!!**



物質の性質を予測するには? **電子の挙動を解析**すれば良い→量子力学



量子力学とは?
 →電子の実態は**波動関数**で
シュレーディンガー方程式
 に従う(行列の固有値問題)

Dirac 「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」 →大胆に近似する

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)\right)\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = E\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$$

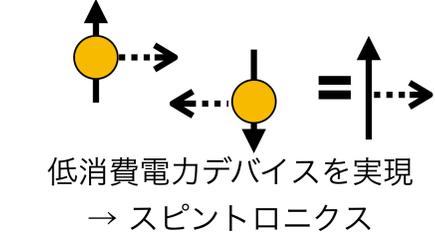
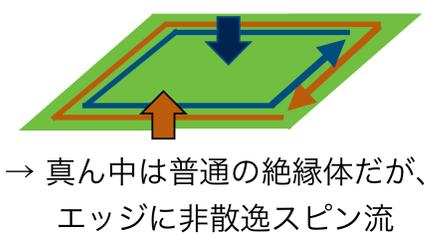
波動関数=電子の状態(未知) 電子が取れるエネルギー(未知)
 分極、磁性などの情報 電気伝導などの情報

トポロジカル物質の第一原理的デザイン

1. Z₂トポロジカル絶縁体とスピントロニクスデバイス

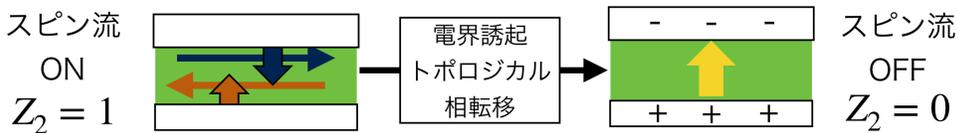
Z₂トポロジカル絶縁体

スピン流=逆向きスピンの電流差



→真ん中は普通の絶縁体だが、
 エッジに非散逸スピン流

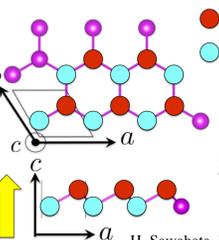
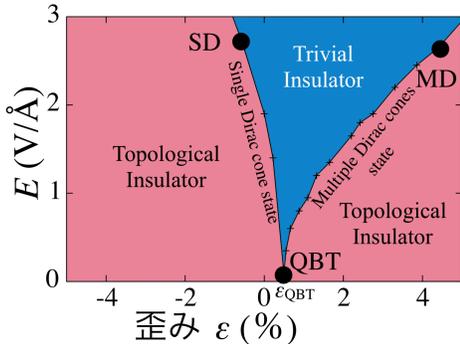
低消費電力デバイスを実現
 →スピントロニクス



このような新原理デバイスを実現する材料はあるか? →Bi(111)薄膜



ビスマス
 →重い元素
 →強い相対論効果
 →実験的に様々な
 物理現象が観測

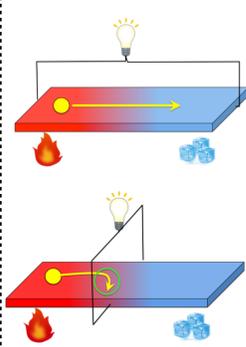


1. 電界によってトポロジカル相の切り替えが可能
 2. 歪みによって相転移電界値の調節が可能
- であることを計算のみで予言

H. Sawahata, N. Yamaguchi, H. Kotaka, and F. Ishii, Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 030309 (2018).
 H. Sawahata, N. Yamaguchi, H. Kotaka, and F. Ishii, e-J. Surf. Sci. Nanotechnol., **16**, 427 (2018).
 H. Sawahata, N. Yamaguchi, and F. Ishii, Appl. Phys. Express, **12**, 075009 (2019).

2. 異常Hall効果と高効率熱電変換物質の探索

熱電変換素子 → 熱損失の再利用
 →エネルギー問題への貢献



ゼーベック効果

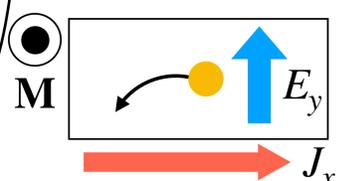
- ・熱勾配に対して平行に起電力が起こる
- ・従来研究が盛んにされてきた

異常ネルンスト効果

- ・熱勾配に対して垂直に起電力が起こる
 - ・ゼーベックに対して**集積化**で有利
 - ・これまであまり研究されてこなかった
- 高効率化への期待

異常Hall効果

物質の**内部磁化**による電子の屈折



$$J_x = \sigma_{xx}E_x + \sigma_{xy}E_y$$

絶縁体の場合、 σ_{xy} が量子化される
 (Chern絶縁体)

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}C \quad (C = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

SECRET
(未発表)