

プロジェクト名(タイトル):

第一原理計算に基づく非線形輸送現象の数値解析

利用者氏名: 仲澤一輝

理研における所属研究室名: 創発物性科学研究センター量子システム理論研究チーム

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

電流や熱流といった固体中の量子輸送現象は、物質中の素粒子(電子)や素励起(フォノン・マグノンなどの準粒子)が電荷やエネルギーなどの情報を運ぶことで引き起こされる。また、このような(準)粒子が他の自由度(磁気構造、電子構造 etc.)と相互作用しながら伝搬することを用いて、非自明な構造のプロブとして基礎研究から応用まで幅広く研究されている。このような量子輸送現象の理論的記述はこれまで線形応答の範囲で行われることが多く、特に久保公式は外場の 1 次に比例する係数を微視的モデルから正確に計算することが可能な枠組みとして広く適用されている。一方、最近では、カイラルな磁性や非自明なバンドトポロジ一等を捉えることができる非線形輸送現象が脚光を浴びているが、微視的な定式化に乏しく、定量的理論の開発が行われている最中である。近年半導体ナノ構造を用いた量子情報処理を目指した研究が精力的に行われているが、ナノ構造中のスピン軌道相互作用を、非線形輸送測定を用いて同定することが提案されている。また、最近我々は、電場と温度勾配を印加したカイラルな系で、双方に垂直な方向に電流が流れる「非線形カイラル熱電気 Hall 効果(NCTE ホール効果)」の微視的定式化に取り組み、モデル計算を介して具体的な固体でこの現象が起こることを示唆する結果を得ている。この定式化は微視的なモデルが与えられれば NCTE ホール効果が計算できる枠組みであり、例えば具体的な物質を想定した第一原理計算に基づく定量計算が可能である。本申請は、半導体ナノ構造や、CoSi や Te といったカイラル結晶において、非線形輸送特性がどの程度現れるのか微視的定式化に基づき調査し、非線形輸送現象ならではの機能の開発や定量的解析を行うことを目的とし、従来の現象論的な理論手法と比較するものである。

2. 具体的な利用内容、計算方法

主に非線形伝導度や NCTE ホール伝導度を求める際の数値積分(ブリルアンゾーン内の 3 次元運動量空間の数値積分)を行う自作の fortran コードを用いた。メッシュサイズを細かくしても常識的な時間で計算が終了するように、3 重積分の一番外側の積分を並列化した。計算対象として、あら

かじめ用意してある CoSi や Te といった物質のワニエモデルや半導体ナノ構造の有効モデルを用いた。ワニエモデルの対角化のためインテル MKL に含まれる LAPACK を用いた。

3. 結果

デバッグと定式化の見直しといった作業で相当の時間がかかったため、今回は Te と半導体ナノ構造についてのみ計算を行った。

Te は 3 回らせん軸をもつ結晶構造をとっており、この方向にどれだけ NCTE ホール電流が発生するか評価した。その結果、3 回らせん軸の方向に、測定可能な大きさの NCTE 電流が生じると見積もった。これは具体的な物質で NCTE 電流を評価した初めての試みであり貴重な情報である。

また、磁場下の半導体ナノ構造における(電場の 2 次に比例する)非線形電流も評価した。バンド間効果が不純物濃度(系の乱れ)の大きい場合に大きくなることを見出し、非線形電流の振る舞いに大きな影響を与えることを示した。また、面内磁場角度依存性がスピン軌道相互作用の種類によって大きくことなることを見出し、半導体ナノ構造中のスピン軌道相互作用の性質を非線形伝導度で見積もる新たな指針を示した。

4. まとめ

今回の利用期間では、Te と半導体ナノ構造の 2 つの対象について非線形伝導現象を調べた。Te においては NCTE ホール効果の定量評価を行い、充分測定可能な電流密度であると見積もった。半導体ナノ構造においては、電場の 2 次の応答を調べ、バンド間効果が系の乱れが大きいほど大きくなることを示し、磁場角度依存性がスピン軌道相互作用の性質を決定するのに役立つ可能性を示した。

5. 今後の計画・展望

まず、本申請期間で終わらなかった解析を順次完了させる。まず CoSi における NCTE ホール効果を評価する。また、Te と CoSi 双方のモデルについて NCTE ホール効果とベリー曲率・軌道磁気モーメントとの対応関係を議論する。半導体ナノ構造においては、磁場誘起非線形伝導現象のさらなる調査を検討している。BW2 への移行後に順次計算を押し進める。