

THz帯誘電関数の シミュレーション

天野智仁

東京大学大学院 理学系研究科 物理学専攻

常行研究室 博士2年

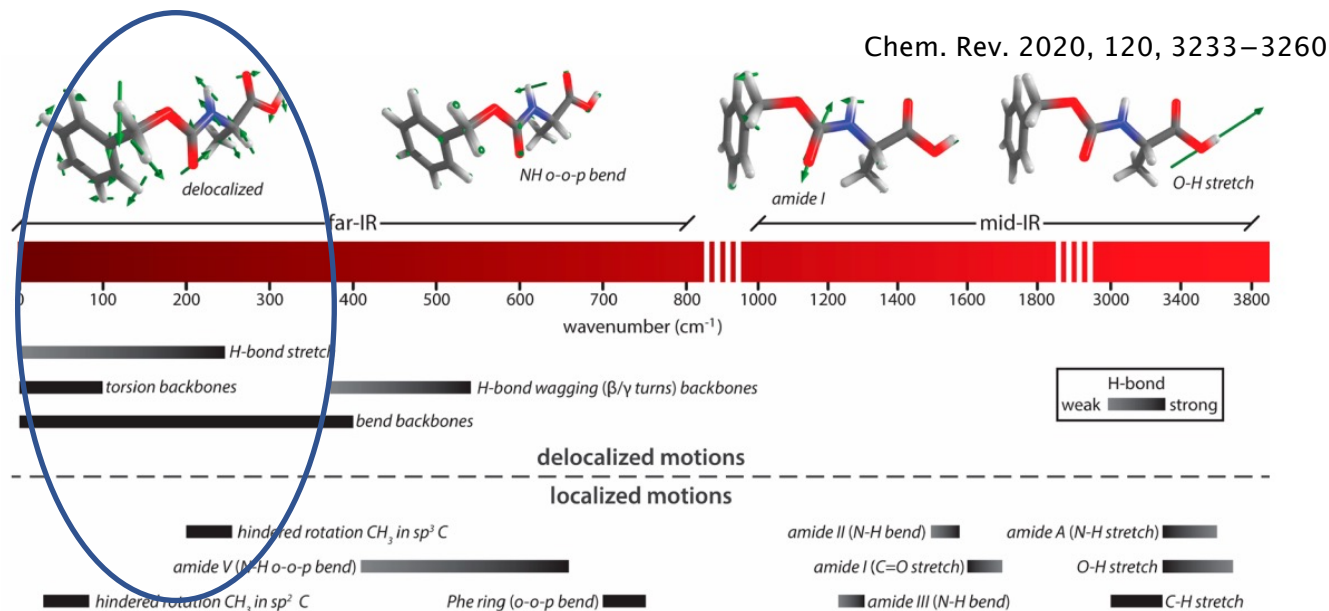
研究目的：5G・6G 材料のための誘電関数計算

5G・6G材料探索のためにはTHz領域での誘電特性を知る必要がある

5G:30-60GHz

6G:100-300GHz

1THz=33.3cm⁻¹



非常に周波数が高いため，信号の減衰を抑えるには誘電正接を小さくする必要がある

$$\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) - i\epsilon''(\omega) \quad \tan \theta = \frac{\epsilon''}{\epsilon'}$$

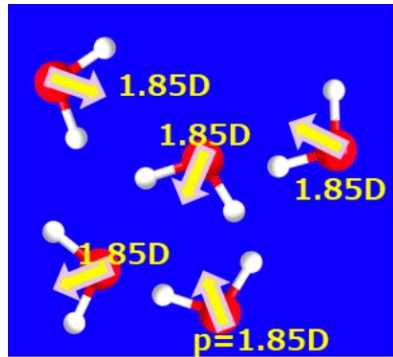
→ 誘電関数を精度良く計算できれば材料開発に貢献できる

最終目的：：THz領域でポリマーの誘電関数を計算する第一原理手法の開発

研究目的: THz領域誘電関数のシミュレーション

THz領域誘電関数の2つの計算手法

1, MD計算による方法

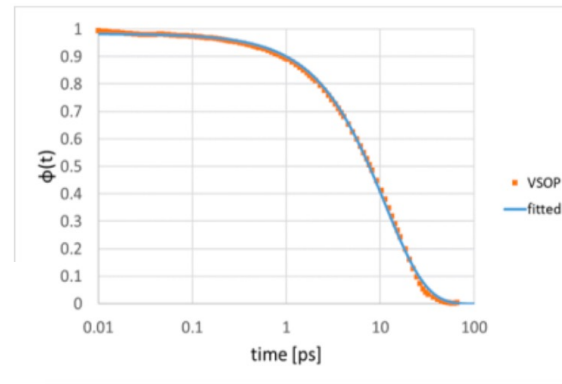


全双極子

$$\mathbf{P} = \sum_i^N \vec{p}_i$$

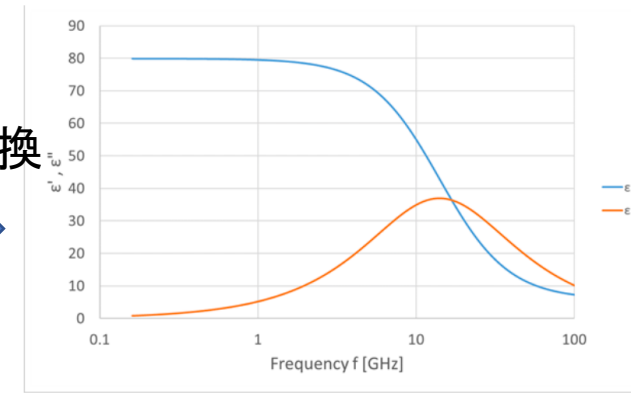
自己相関関数(ACF)

$$\phi(t) = \frac{\langle \mathbf{P}(t_0) \cdot \mathbf{P}(t+t_0) \rangle}{\langle \mathbf{P}(t_0) \cdot \mathbf{P}(t_0) \rangle}$$



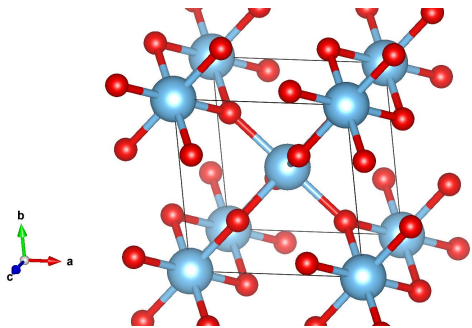
ACF

フーリエ変換



誘電関数

2, 振動解析による方法



振動計算



非調和フォノンの考慮でab initio計算が可能

$$\epsilon(\omega) = \epsilon^\infty + \sum_m \frac{\Delta\epsilon_m \Omega_m^2}{\Omega_m^2 - \omega^2 + i\gamma_m \omega}$$

Ω :: 共鳴振動数 $\Delta\epsilon$:: 振動強度

γ :: ダンピングパラメータ (寿命)



非調和格子振動(フォノン)理論

Tadano, Terumasa, Yoshihiro Gohda, and Shinji Tsuneyuki.
Journal of Physics: Condensed Matter 26.22 (2014): 225402. ALAMODE

調和フォノン理論では無視された3次以上のForce Constants(IFCs) を取り入れた理論

調和フォノン理論

ハミルトニアン $H_0 = \sum_{\mathbf{q}j} \omega_{\mathbf{q}j} A_{\mathbf{q}j}^\dagger A_{\mathbf{q}j}$

- ・ 調和フォノンではフォノン-フォノン相互作用が記述されない。
- ・ 振動が無限の寿命を持ち誘電関数を計算できない。



非調和ポテンシャルを摂動として扱う

非調和フォノン理論

ハミルトニアン

$$H = H_0 + H' = H_0 + \sum_{n=3}^{\infty} U_n$$

非調和IFCsは直接法(Frozen phonon法)で計算可能

- ・ 周波数シフト/ライフタイムが発生

$$\Delta\omega(q, \omega, T) = -\text{Re} \Sigma_q(\omega_q)$$

$$\Gamma(q, \omega, T) = \text{Im} \Sigma_q(\omega_q)$$

誘電関数

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \epsilon_{\alpha\beta}^{\infty} + \frac{1}{\Omega_0} \sum_{(0,j)} \frac{S_{\alpha\beta}^j}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 + \omega_{0j} \Sigma_{0j}(\omega)}$$

Cowley, R. A. *Advances in Physics* 12.48 (1963): 421-480.

Mode-Oscillator Strength

$$S_{\alpha\beta}^m = \left(\sum_{\kappa\alpha'} Z_{\kappa,\alpha\alpha'}^* U_{\kappa\alpha'}^m(q=0) \right) \left(\sum_{\kappa'\beta'} Z_{\kappa',\beta\beta'}^* U_{\kappa'\beta'}^m(q=0) \right)$$

(調和近似で計算可能)

自己エネルギー

Σ

(非調和計算が必要)

自己紹介：天野智仁

・ 来歴

東大院 理学系研究科 物理学専攻 常行研究室 博士2年

2015/3 麻布高校卒業

2019/3 東大理学部物理学科卒

2021/3 東大院 理学系研究科物理学専攻 修士修了

2021/4~ 東大院 理学系研究科物理学専攻 博士課程

・ 参加目的

※ 企業様の雰囲気や研究の取り組みなどを知りたい

※ 特にDFT関連の利用について

・ 保持スキルなど

※ DFTコードの経験 (Quantum Espresso/VASP)

※ プログラミング (C++/python)

※ 研究室の計算機管理 (warewulf/各種サーバーなど)

※ 企業との共同研究の経験

※ 最近：古典MD(Gromacs)や機械学習への取り組み.