

研究紹介

東京大学物性研究所附属計算物質科学研究センター

高成柱

経歴

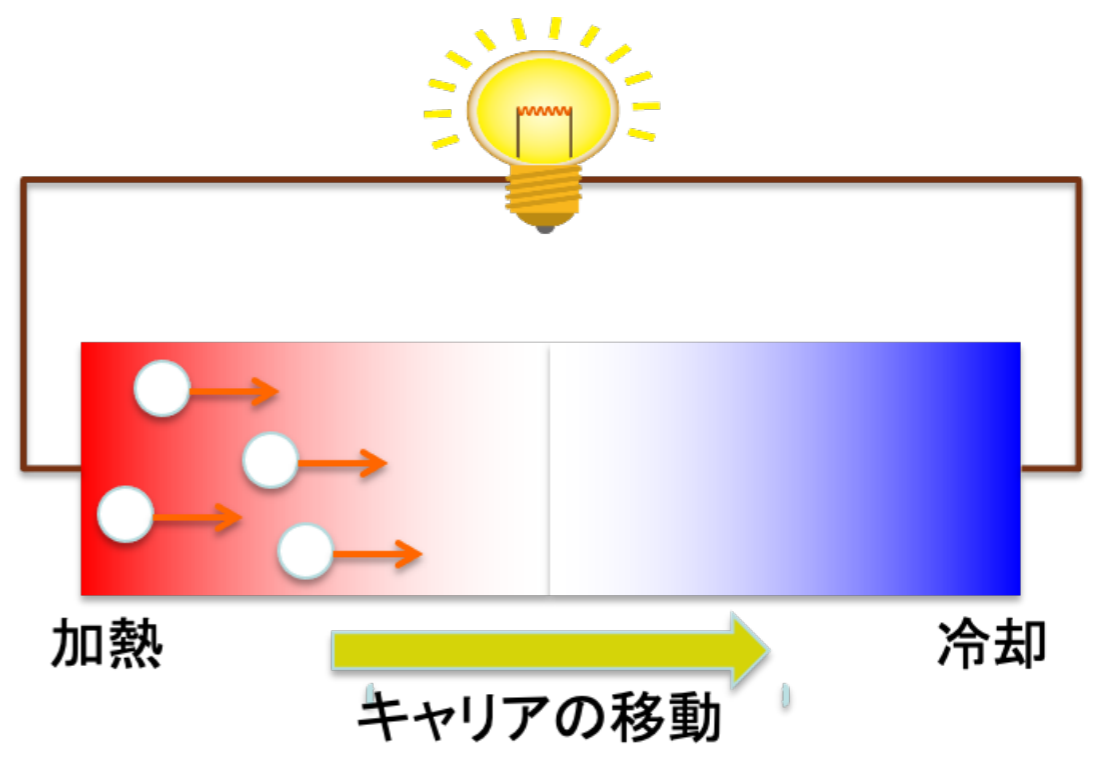
- 2013年3月
大阪大学大学院理学研究科物理学専攻博士前期課程 修了
指導教員 赤井教授
- 2018年3月
大阪大学基礎工学研究科物質創成専攻 博士（理学） 修了
指導教員 吉田教授
- 2018年6月
大阪大学工学研究科（小口研究室） 特任研究員
- 2018年11月
東京工業大学物質理工学院（合田研究室） 研究員
- 2021年8月～
東京大学物性研究所附属計算物質科学研究センター 特任研究員

熱電効果

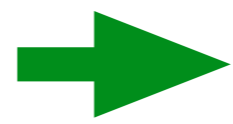
熱エネルギーと電気エネルギーが相互に変換される現象
 ○ ゼーベック効果：物体の温度差が電位差に変換される現象

$$V = S \nabla T$$

(S :ゼーベック係数、 T :絶対温度、 V 電位)



従来の計算方法



新しい計算方法

緩和時間近似+Boltzmann方程式

$$S = \frac{1}{eT} \frac{\int d\epsilon [\epsilon - \mu(T)] v^2(\epsilon) \tau(\epsilon) D(\epsilon) \left[-\frac{df(T, \mu)}{d\epsilon}\right]}{\int d\epsilon v^2(\epsilon) \tau(\epsilon) D(\epsilon) \left[-\frac{df(T, \mu)}{d\epsilon}\right]}$$

- 問題点**
- 半古典的な手法
 - 緩和時間近似の限界 (遷移金属など)
 - 緩和時間を求めることの困難

S : ゼーベック係数
 τ : 緩和時間
 D : 0Kの電子状態密度
 f : フェルミ分布関数
 μ : 化学ポテンシャル
 v : 電子速度

線形応答理論

$$S = \frac{1}{eT} \frac{\int d\epsilon [\epsilon - \mu(T)] \sigma(\epsilon, T) \left[-\frac{df(T, \mu)}{d\epsilon}\right]}{\int d\epsilon \sigma(\epsilon, T) \left[-\frac{df(T, \mu)}{d\epsilon}\right]}$$

- 問題点**
- 電気伝導率の温度依存性を求めることが困難

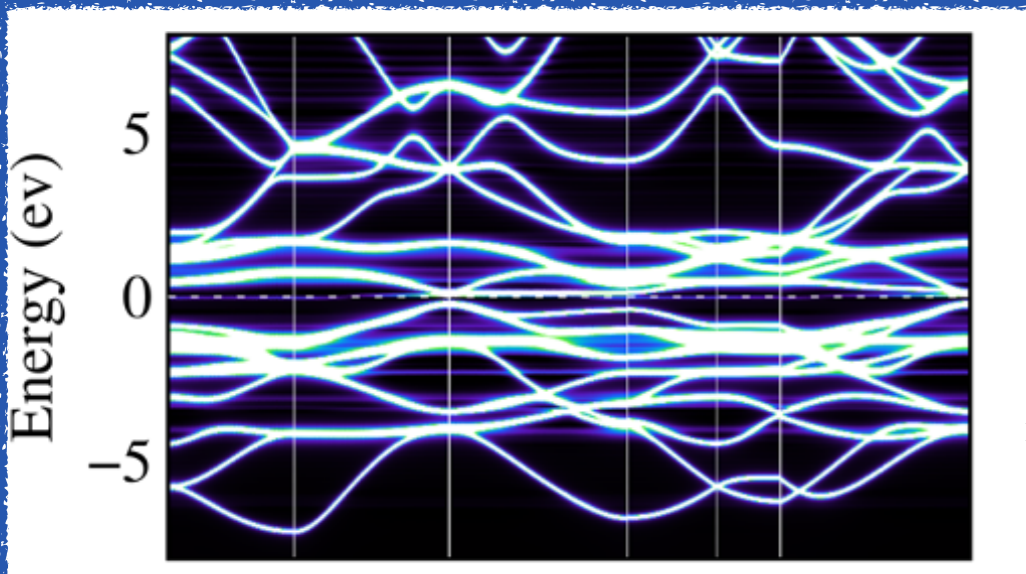
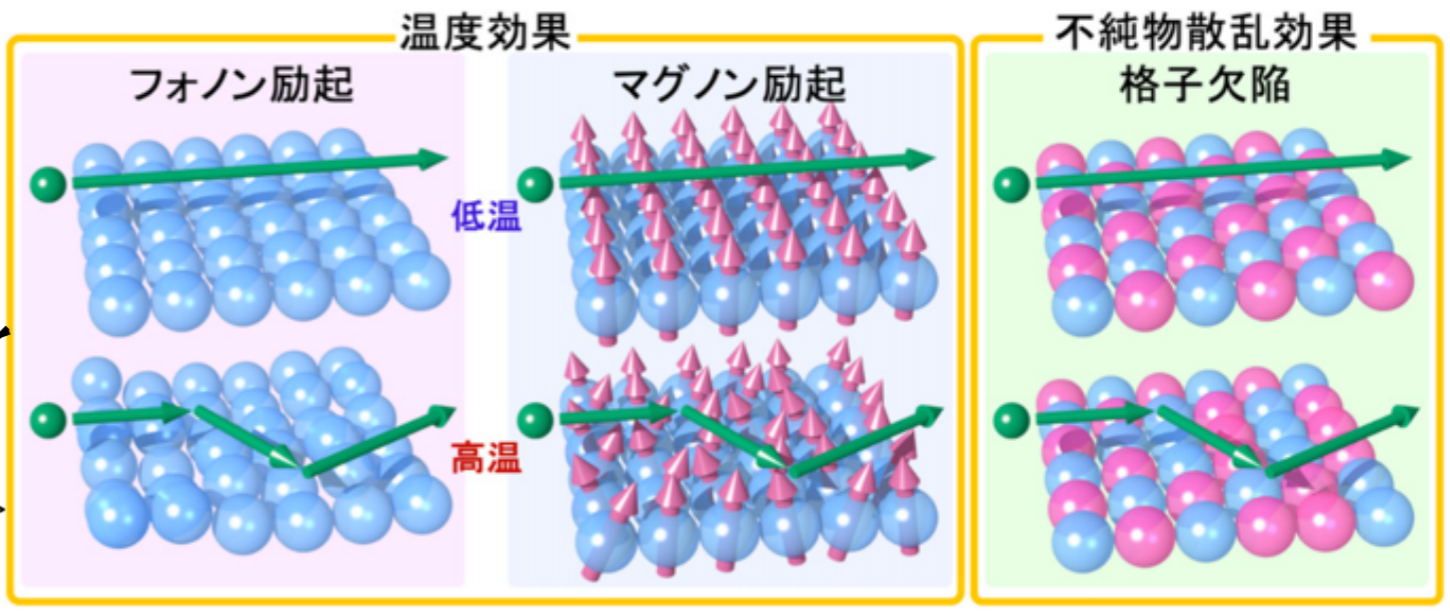
- 解決法**
- 温度に依存した電気伝導率の計算方法を考える

S : ゼーベック係数
 σ : 電気伝導率
 T : 温度
 f : フェルミ分布関数
 μ : 化学ポテンシャル

久保グリーンウッドの式

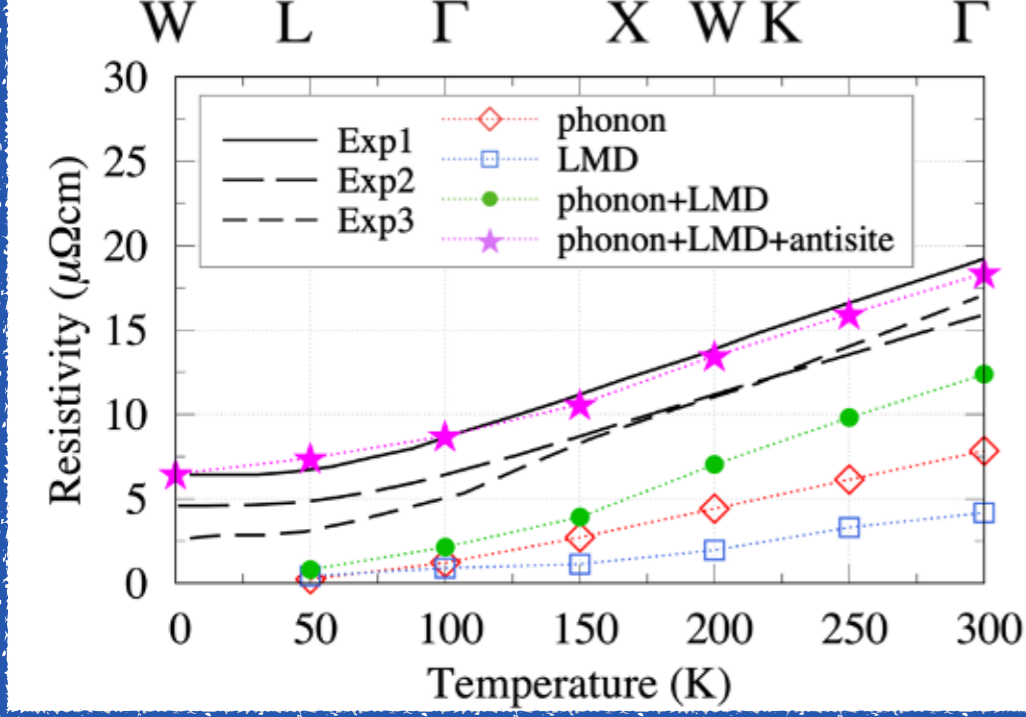
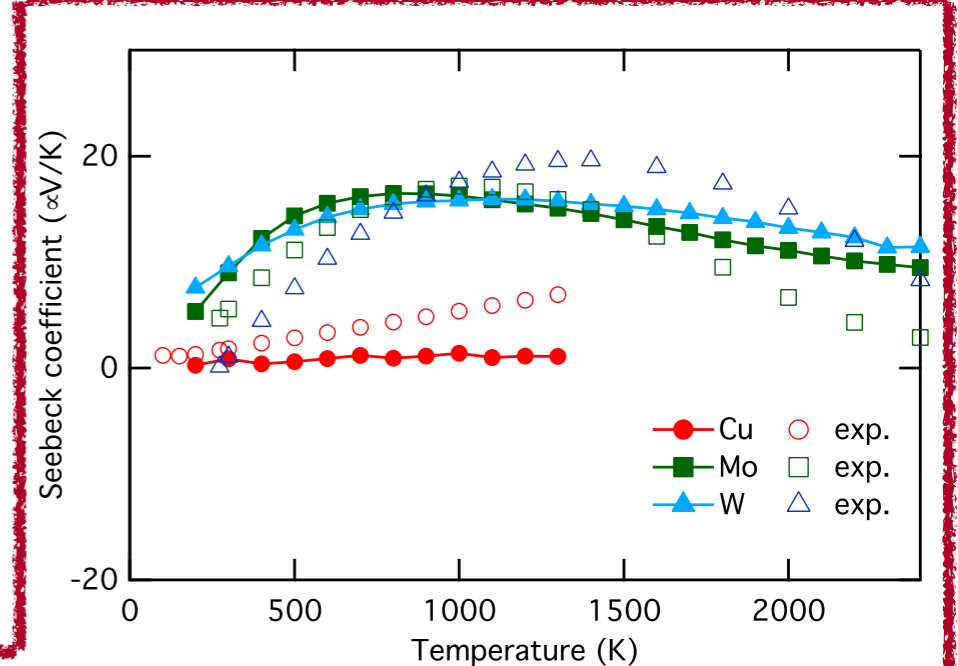
$$\sigma_{\mu\nu}(\epsilon) = \frac{1}{4} \lim_{\eta \rightarrow 0} [\tilde{\sigma}_{\mu\nu}(\epsilon + i\eta, \epsilon + i\eta) + \tilde{\sigma}_{\mu\nu}(\epsilon - i\eta, \epsilon - i\eta) - \tilde{\sigma}_{\mu\nu}(\epsilon + i\eta, \epsilon - i\eta) - \tilde{\sigma}_{\mu\nu}(\epsilon - i\eta, \epsilon + i\eta)]$$

$$\tilde{\sigma}_{\mu\nu}(z_1, z_2) = -\frac{\hbar}{\pi N \Omega} Tr \langle j_\mu G(z_1) j_\nu G(z_2) \rangle$$



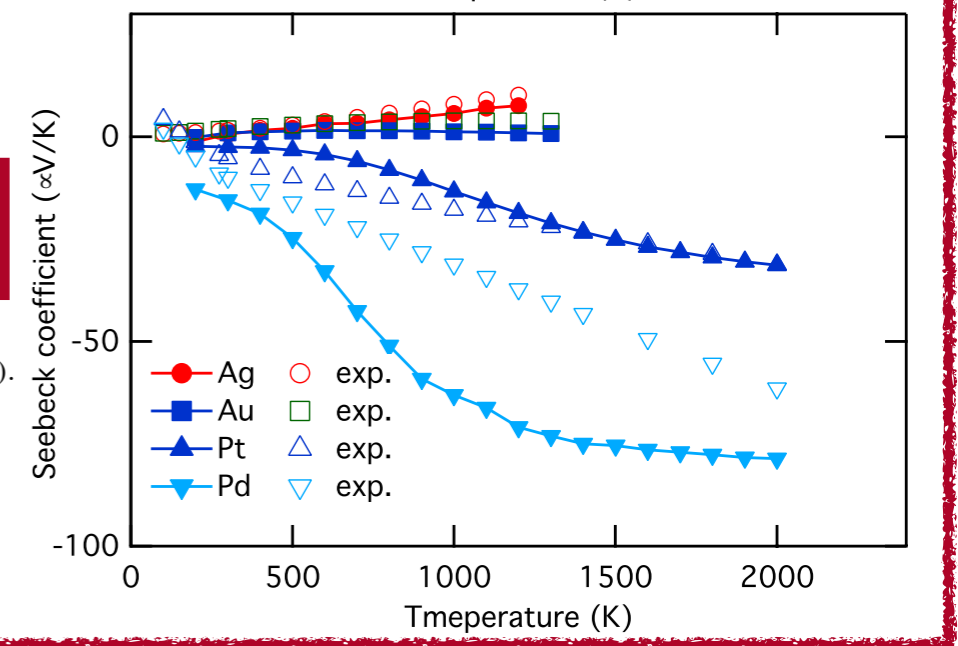
Co₂MnSiの電気抵抗率 (300Kでのバンド図)

H. Shinya, T.F., et al., Appl. Phys. Lett. 117, 042402 (2020)



遷移金属のSeebeck係数

S. Kou and H. Akai, Solid State Commun. 276, 1 (2018).



Sm-Fe-Cuの状態図作成

(NIMS阿部さんとの共同研究)

目的

- SmFe₁₂永久磁石の開発のためにSm-Fe-Cuの状態図を作成
- 高温におけるSmFe₁₂と液相の平衡点を探索したい

正則溶体モデル

$$G^\alpha = \sum_{i=A}^N x_i G^{\alpha-i} + RT \sum_{i=A}^N x_i \ln x_i + G_{excess}^\alpha$$

CALPHADデータベース 過剰ギブスエネルギー 第一原理計算

過剰ギブスエネルギー

$$G_{excess}^\alpha = \sum_{i=A}^N \sum_{j>i} x_i x_j \Omega_{ij} = \sum_{i=A}^N \sum_{j>i} x_i x_j \left[\sum_{n=0}^v L_{i,j}^{(n)} (x_i - x_j)^n \right]$$

Redlich-Kister級数

