



• 産業科学研究所 ナノ機能予測研究分野

○

研究室紹介

研究内容

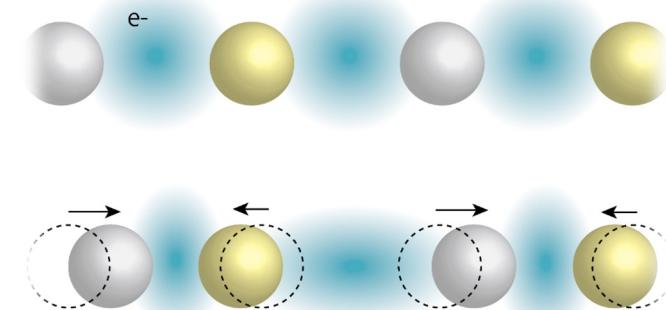
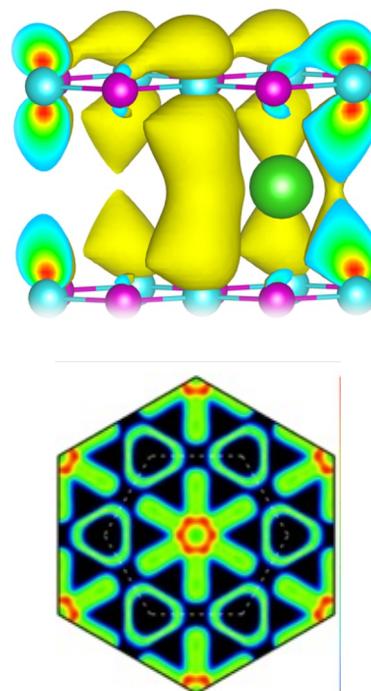
計算物質科学

コンピュータの強大な力を生かしてナノスケールでの物質機能を理解
&よりよい性質を引き出す方法を発見する



↑スパコン「富岳」

<https://www.r-ccs.riken.jp/fugaku/about/>

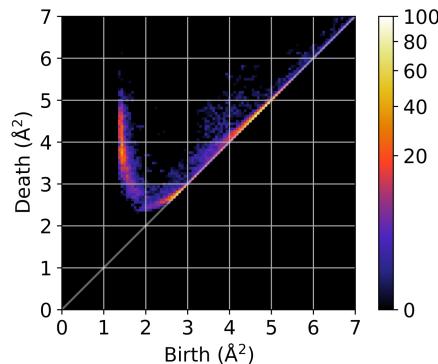
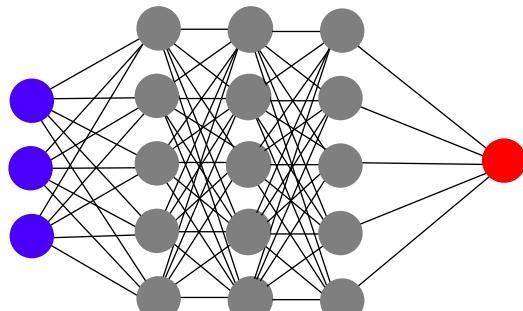
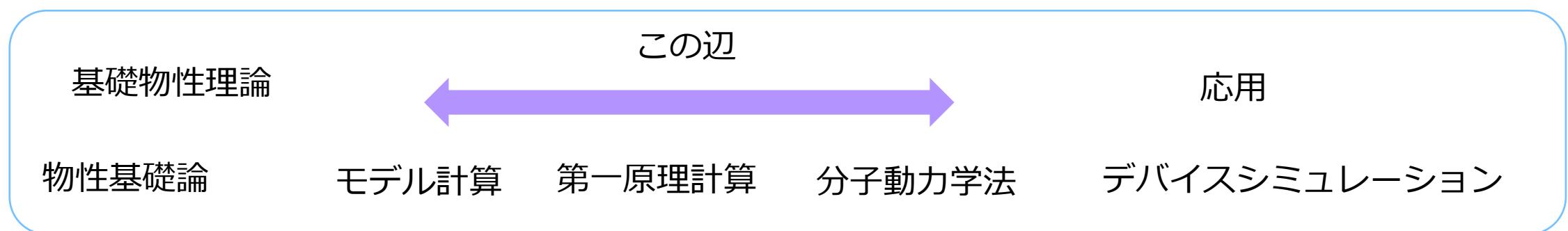


```
import matplotlib.pyplot as plt
def validate(model, loss_fn, train_loader, test_loader, std, mean, device):
    import datetime
    dt_now = datetime.datetime.now()
    converted_loss = []
    color=['red','blue']
    counter=0
    for name, loader in [ ('train', train_loader), ('val', test_loader) ]:
        predict=[]
        test=[]
        loss=0.0

        with torch.no_grad():
            for img, labels in loader:
                img=img.to(device)
                labels=labels.to(device)
                outputs=model(img)
                loss=loss_fn(outputs, labels)
                predict.extend(outputs.to('cpu'))
```

研究内容

基礎物理と工学応用の中間



機械学習
トポロジカルデータ解析
新しいシミュレーション手法開発

どんな研究ができるか

南谷

トライディショナル

- ・第一原理計算を用いた物質機能の解明

流行りもの

- ・機械学習の物性シミュレーションへの応用

変わり種

- ・トポロジカルデータ解析を応用したアモルファス物性解析

下出

ガチ理論

- ・スピinnホール効果の理論研究

関連テーマ
&その合せ技

具体例の紹介

第一原理計算を用いた物質機能の解明

第一原理計算 (Ab-initio calculation)

物質を作っている元素と各原子の座標がわかれれば、電子状態がわかる

基礎理論：密度汎関数理論 (Density functional theory: DFT)

ホーエンベルク・コーンの定理

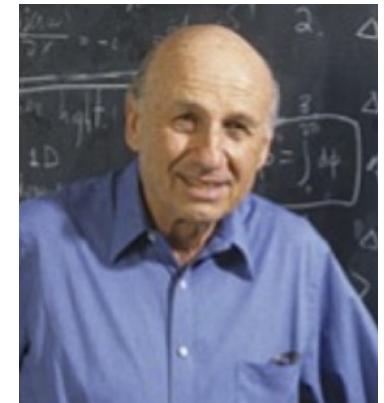
- ・ポテンシャルは電子密度と一対一対応する
- ・電子密度でハミルトニアン演算子を表現しても
変分原理が成立

Phys. Rev. 136, B864 (1964)

Peter Hohenberg



Walter Kohn

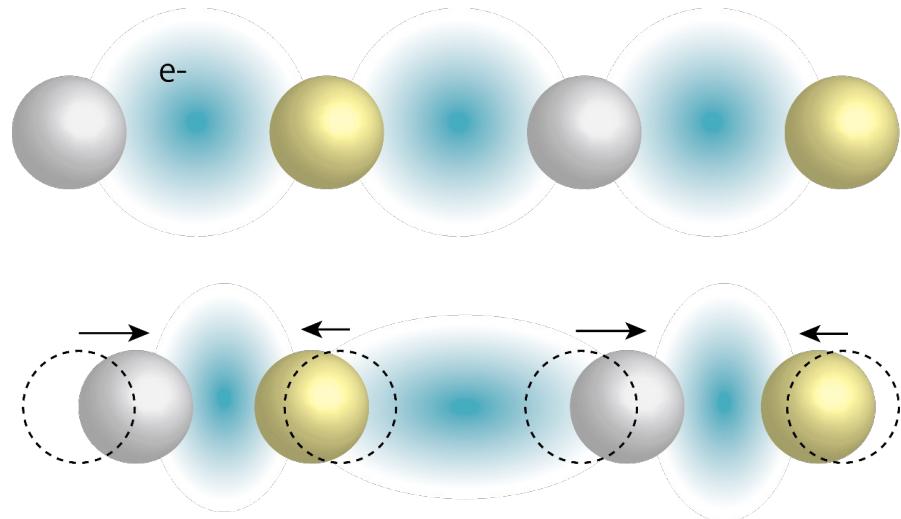


様々な物質での電子状態を定量的に計算

具体例の紹介

電子フォノン相互作用の精密計算

電子フォノン相互作用？



格子振動（フォノン）



ポテンシャルの変形



電子波動関数の歪

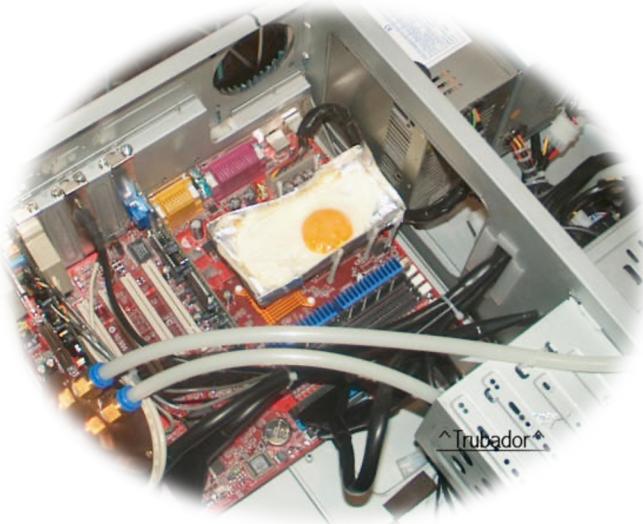
固体中に**普遍的**に存在し、幅広い**電子・熱物性の源**

ジュー

ル熱 キャリア移動度 超伝導 熱電効果

とても大変（詳細は省く）だが
電子フォノン相互作用も第一原理計算できる

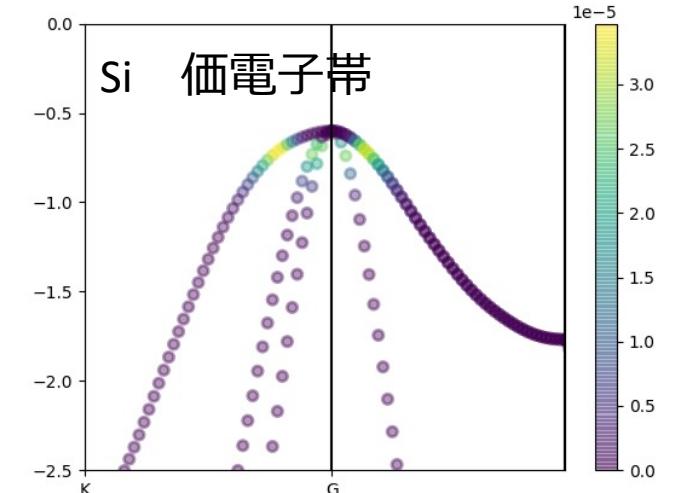
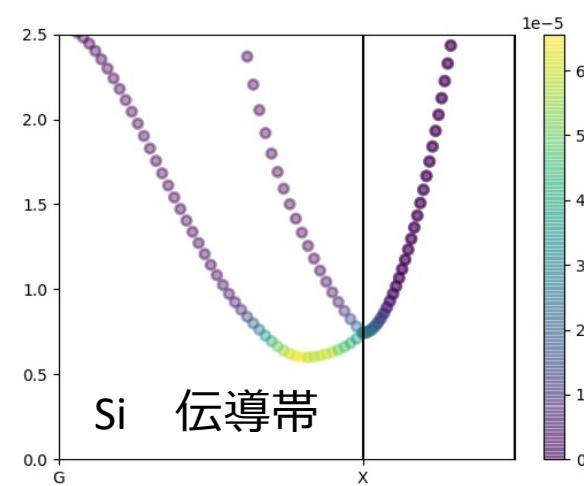
半導体のジュール熱はどんな過程から出てくる？



<http://www.phys.ncku.edu.tw>

ひとまずこの式をごりごりと第一原理計算

$$\left. \frac{\partial E_{ph}}{\partial t} \right|_{coll} = 2 \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k\nu} \hbar\omega_{q\nu} |\mathcal{M}^{nm\nu}(k, q)|^2 \{ n_{q\nu} (f_{mk+q} - f_{nk}) + f_{mk+q} (1 - f_{nk}) \} \delta(E_{nk} - E_{mk+q} + \hbar\omega_{q\nu})$$



ホールキャリアと電子キャリアで発熱の初期過程が違う

E. Minamitani, Phys. Rev. B, 104, 085202 (2021)

層状絶縁体・半導体はドーピングで超伝導体になるか？

→なり得る

h-BN(絶縁体)2層
+ Li

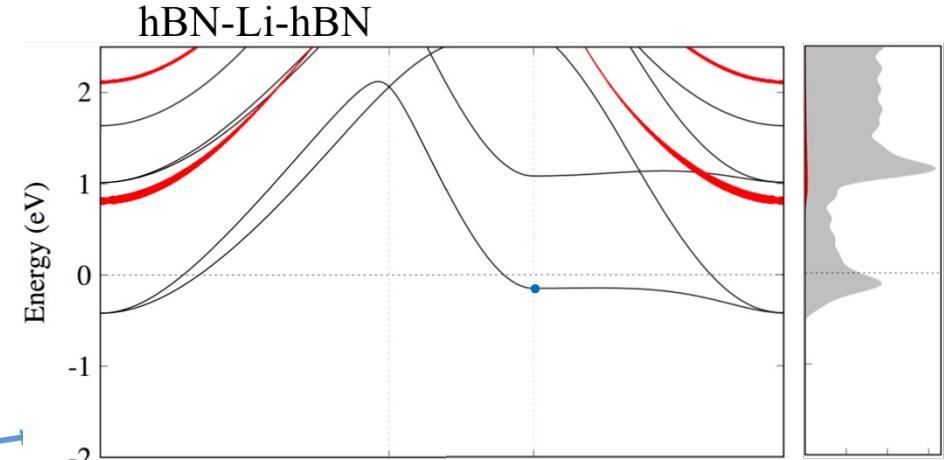
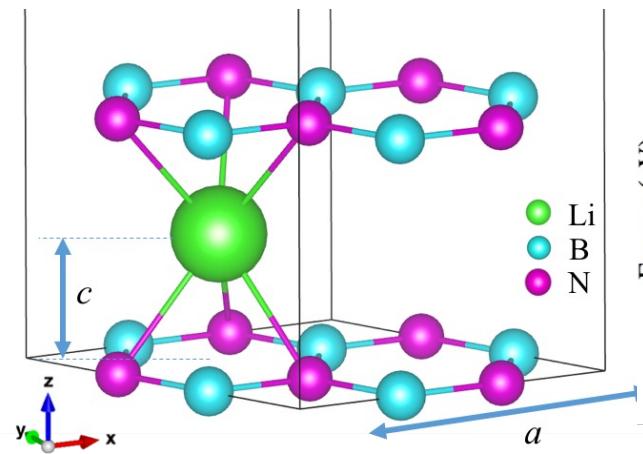
→ $T_c \sim 25\text{K}$

B4の学生さんが発見

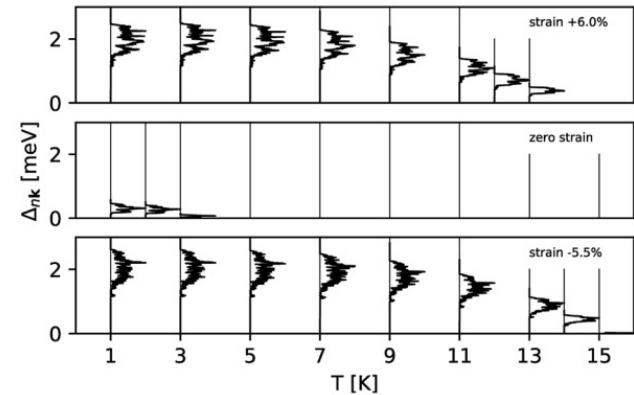
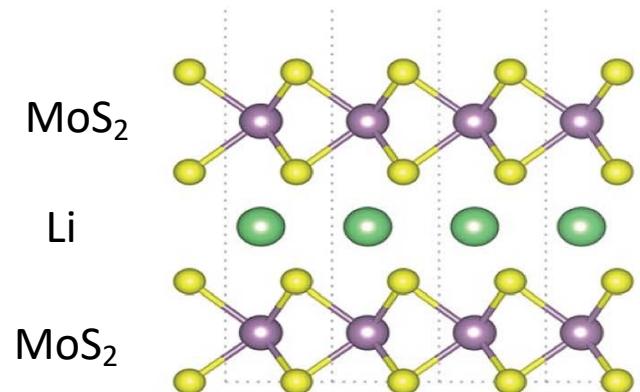
MoS₂(半導体)2層
+ Li

→ T_c はひずみに依存

修士の学生さんが発見



N. H. Shimada, E. Minamitani, S. Watanabe, Appl. Phys. Express 10, 093101 (2017).



P. Mano, E. Minamitani, S. Watanabe, Nanoscale Adv. 2, 3150 (2020)

機械学習の物性シミュレーションへの応用

第一原理計算は精度が良いけど重すぎる

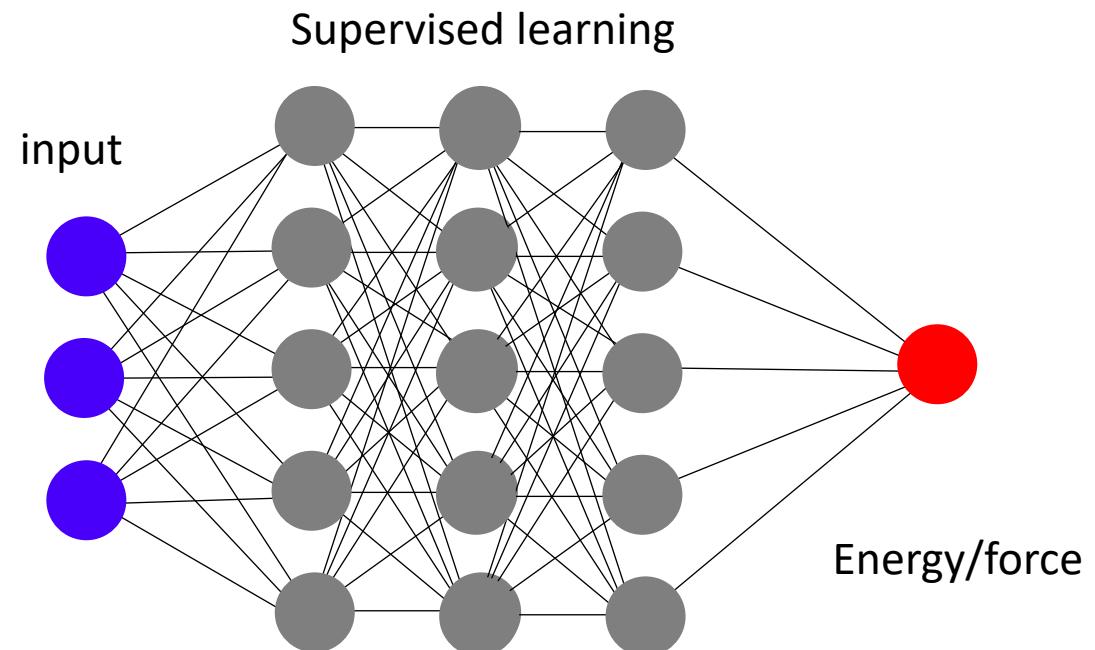
第一原理計算がしていること $F: R^N \rightarrow R(\text{energy}), R^3(\text{force})$

構造をインプットにしてエネルギーや力を返す

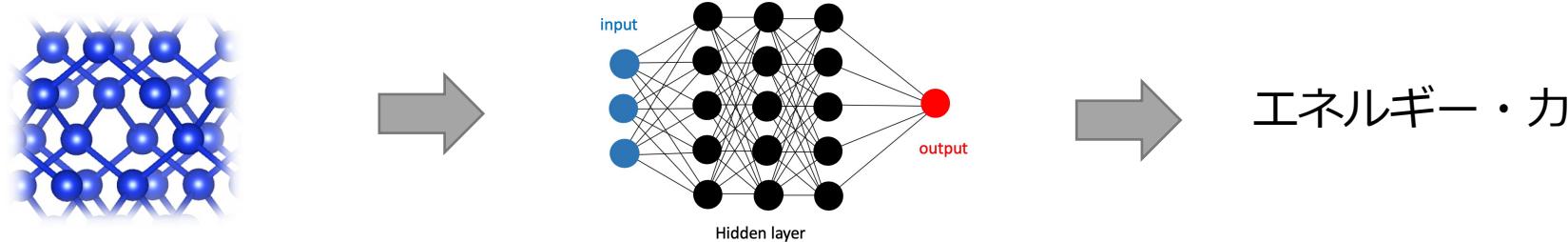
この機能を機械学習モデルで代用できないか？

ポテンシャルを機械学習で作ろう

機械学習ポテンシャル

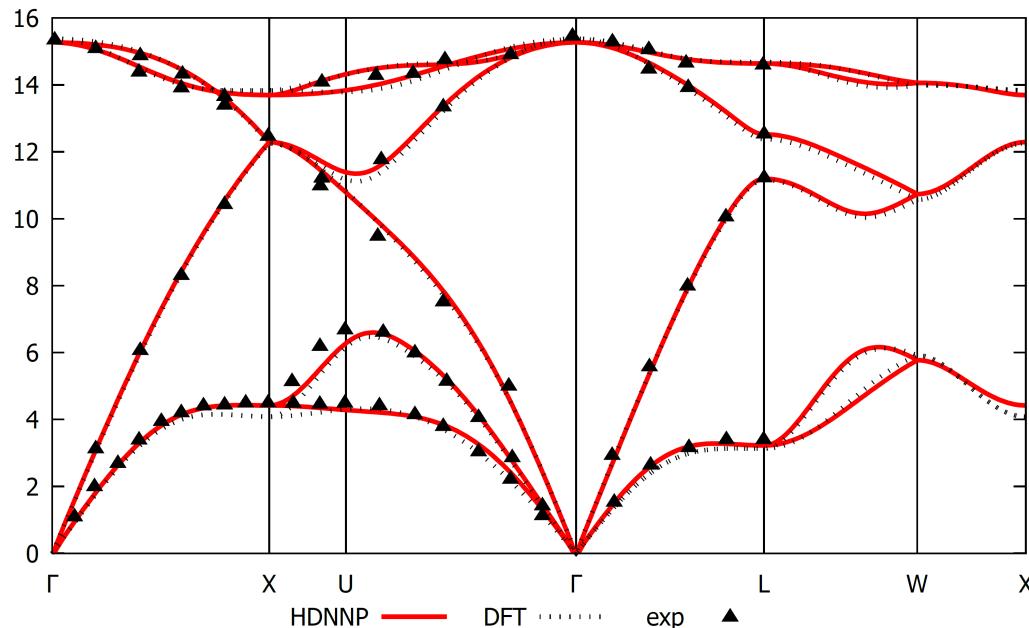


一度賢い機械学習ポテンシャルを作ることができれば

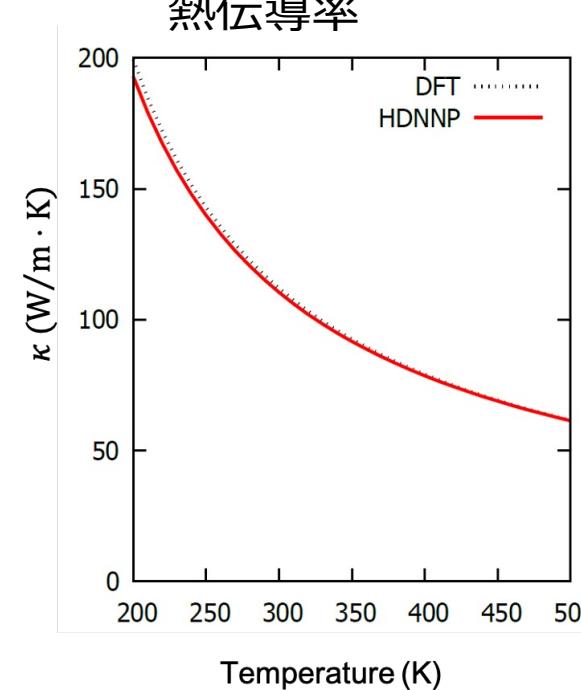


様々な構造でのエネルギー・力が必要になる物理量を、第一原理計算より圧倒的に早く計算できる

フォノンバンド

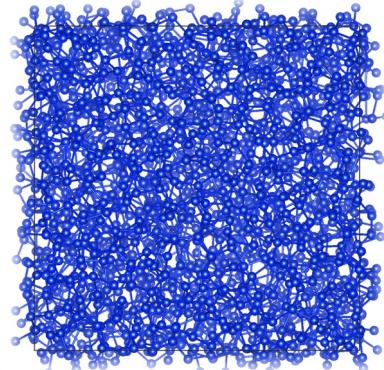


熱伝導率



トポロジカルデータ解析を応用したアモルファス物性解析

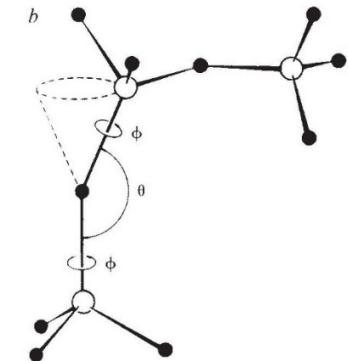
アモルファス構造のミステリアスな特徴



アモルファス構造は完全にランダムな配置ではない

原子間相互作用
→二面角などにも一定の制限が加わる

最近接原子間距離を超えた長さスケールでの
原子位置の相関: 中距離秩序(MRO)



S. R. Elliott, Nature, 354, 445 (1991)

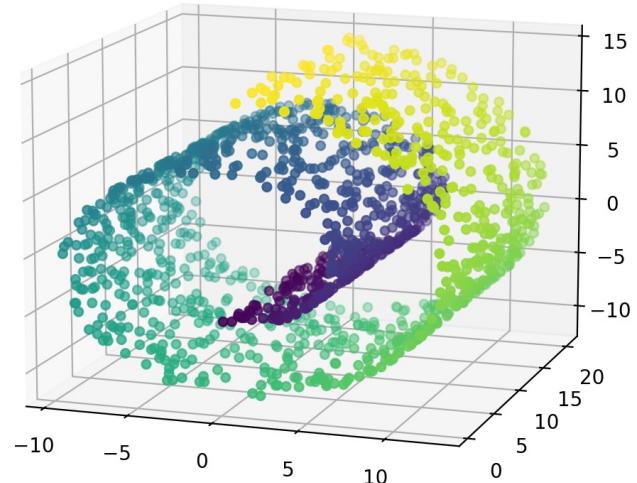
こういった構造が物性にどう関係しているのか？

長年の謎

構造の特徴→繋がり方、トポロジーで記述できないか？

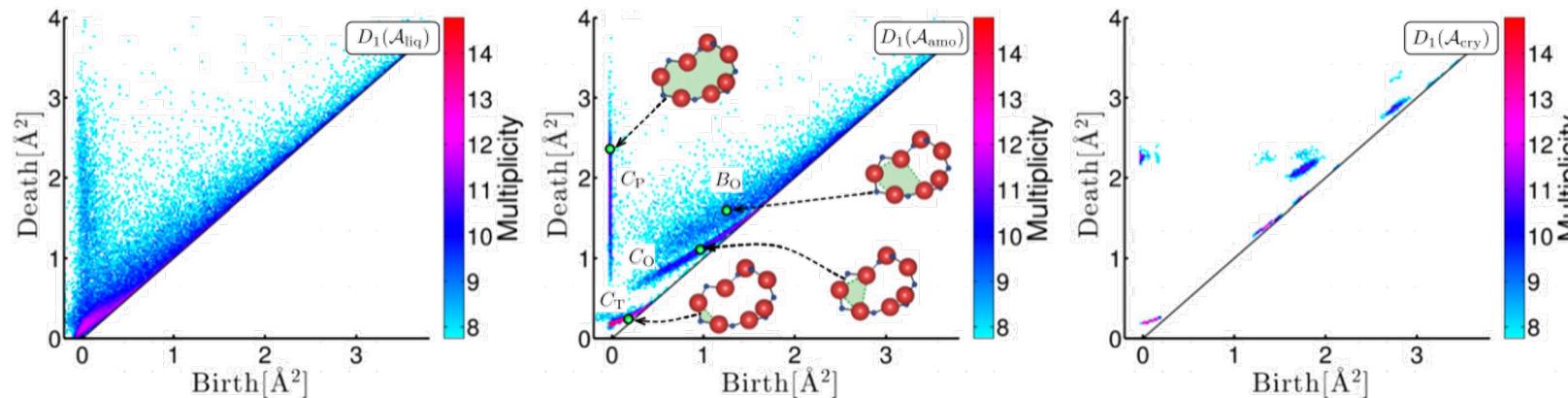
トポロジカルデータ解析

データのかたちを捉える



←ロール状の構造にデータが分布している
もっと複雑な場合にも応用できるテクニックは？

パーシステントホモロジー群

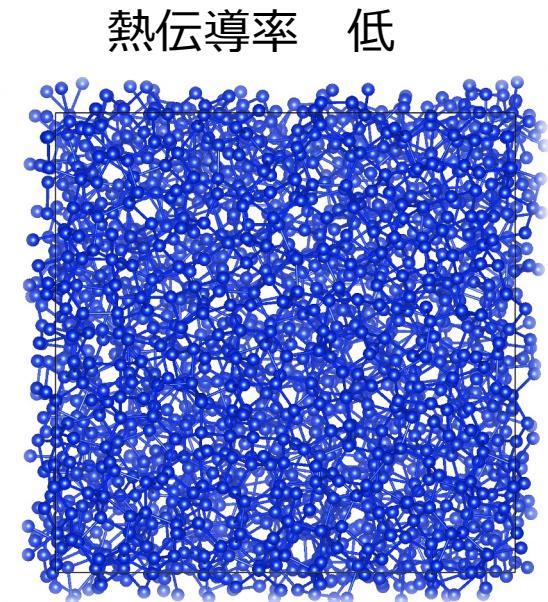
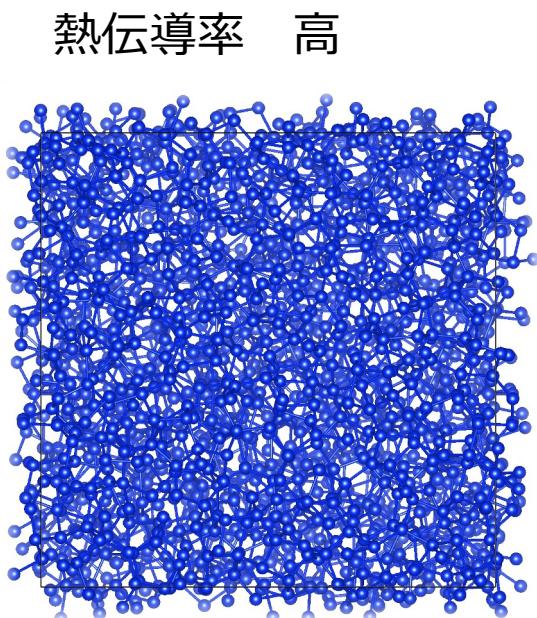
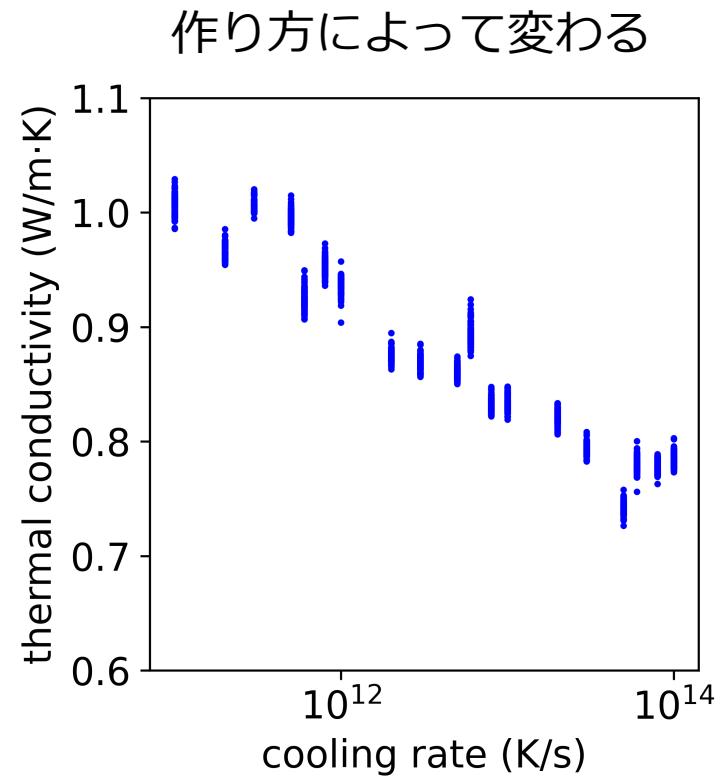


アモルファスの形の
特徴を抽出できる！

Y. Hiraoka et al.,
PNAS, 113, 7035 (2016)

物性予測への展開

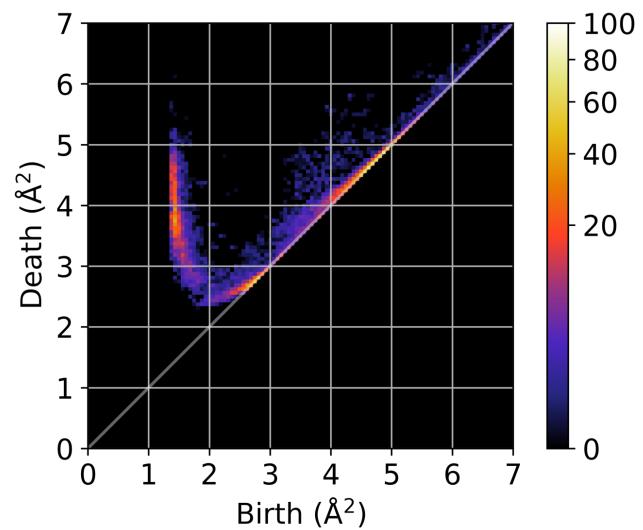
アモルファスSiの熱伝導率



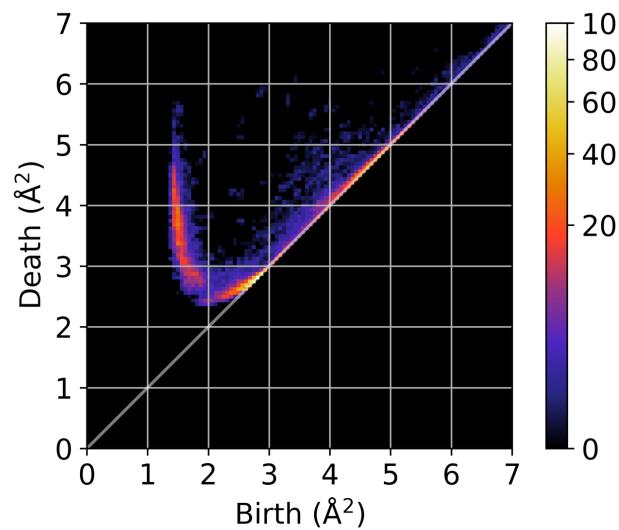
見分けられますか？

パーシステントホモロジーには違いがわかる

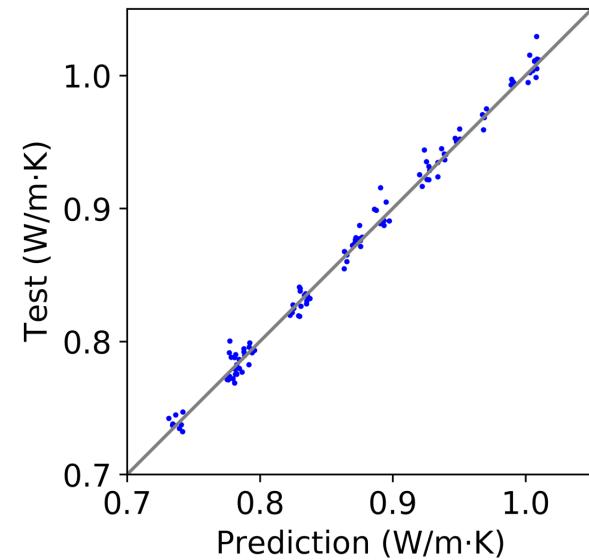
熱伝導率 高



熱伝導率 低



予測モデル



E. Minamitani, T. Shiga, M. Kashiwagi, I. Obayashi, J. Chem. Phys. 156, 244501 (2022)

パーシステントホモロジーを使ってアモルファスSiの熱伝導率が予測できる

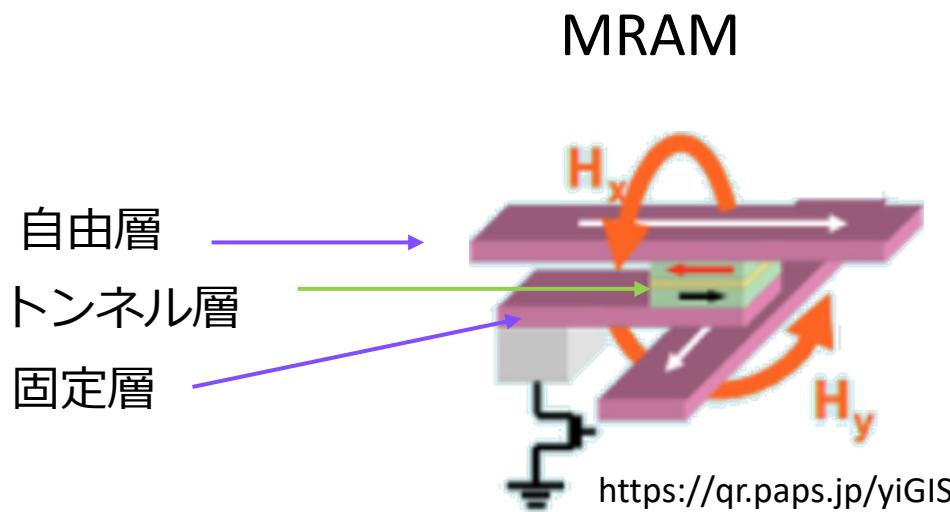
- ・他のアモルファス・ガラスではどうか？
- ・弾性・脆性といった力学特性は？
- ・機械学習と組み合わせるともっと精度が上がる？
- ・ガラス構造の「設計」に使える？

展開できるテーマは沢山

スピンドルホール効果の理論研究

スピントロニクス

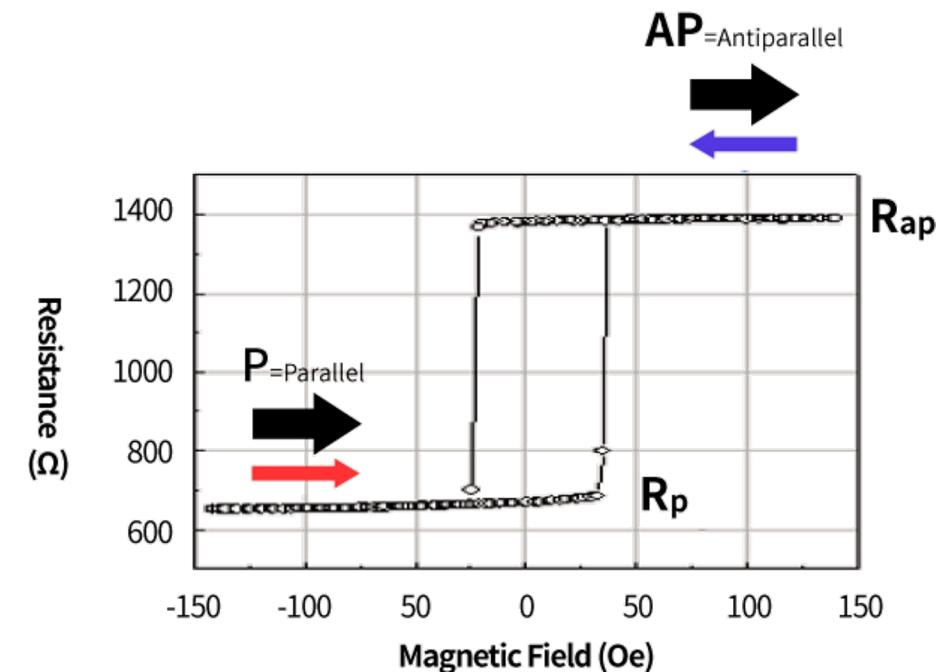
スピンをつかったエレクトロニクス



自由層と固定層の磁化が

同じ向き
逆向き

抵抗大(1)
抵抗小(0)



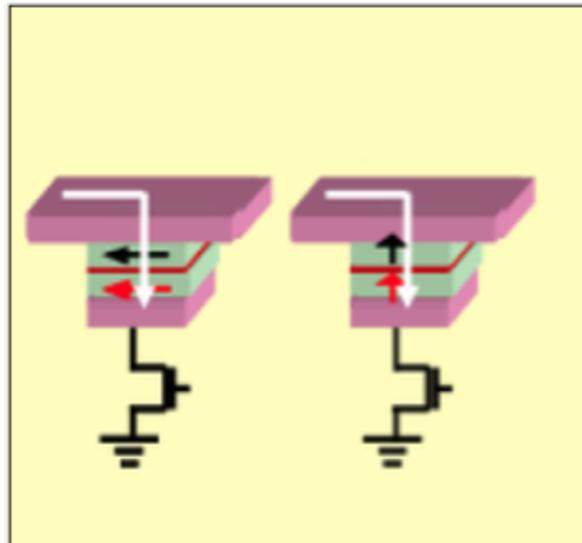
磁化なので不揮発：省エネルギー

高効率なスピントロニクス

スピン注入型

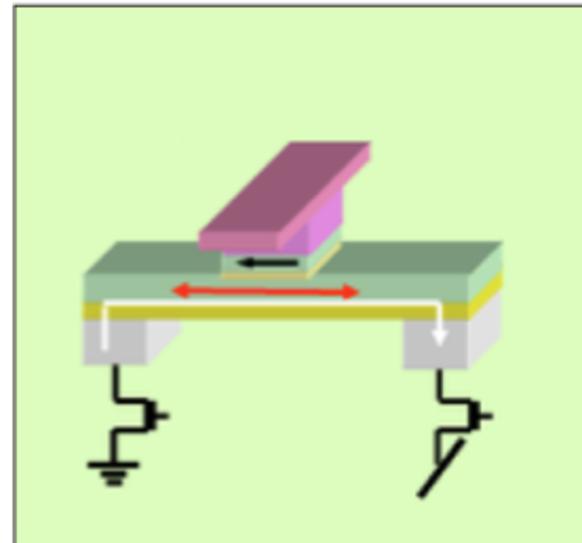
スピン移行トルク

STT-MRAM



スピン軌道トルク

SOT-MRAM



書き込み ($0 \rightarrow 1$ 、 $1 \rightarrow 0$)
自由層の磁化の反転が必要

磁場→局所的ではない
小型化には大電流が必要

新しい書き込み方式：
スピン注入型

↑
スピンホール効果を利用

スピンドホール効果

スピンド軌道相互作用が強い金属に電流を流す
→界面にスピンドが蓄積される
→スピンド注入

スピンドホール効果を特徴づけるには？

電気伝導

電場

$$J_e = \sigma_e E$$

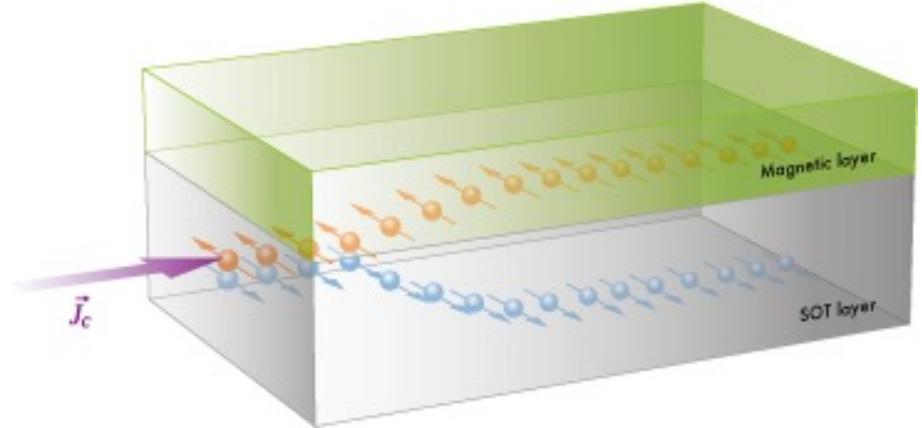
電流 電気伝導度

スピンドホール効果

$$J_s = \sigma_s E ?$$

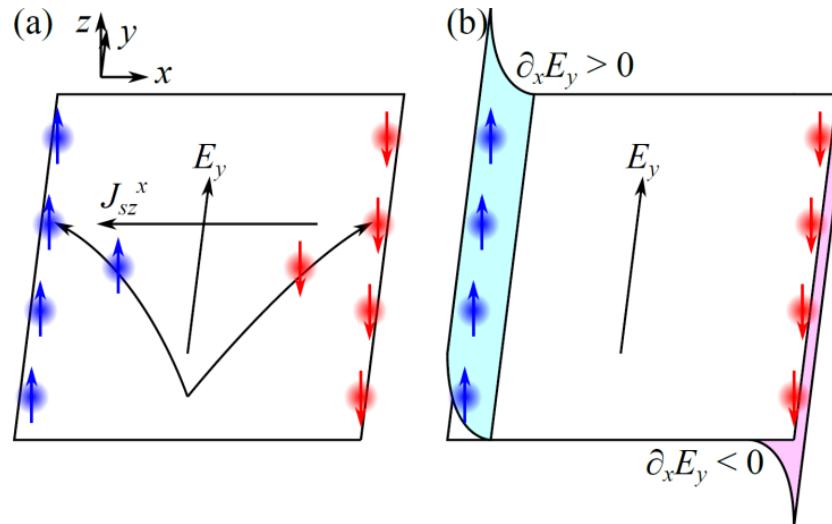
スピンド流 スピンドホール伝導度

スピンド軌道相互作用 → スピンドは非保存
→ スピンド流は一意に定義できない...



<https://www.antaios.fr/What-is-SOT>

スピンドホール効果の新たな指標



界面でのスピンドホール効果を直接評価する理論を使おう

Tatara, PRB **98**, 174422 (2018);
Shitade and Tatara, PRB **105**, L201202 (2022);
Shitade, PRB **106**, 045203 (2022).

まだモデル計算のみ

具体的な物質での
第一原理計算



機械学習を使った
物質探索

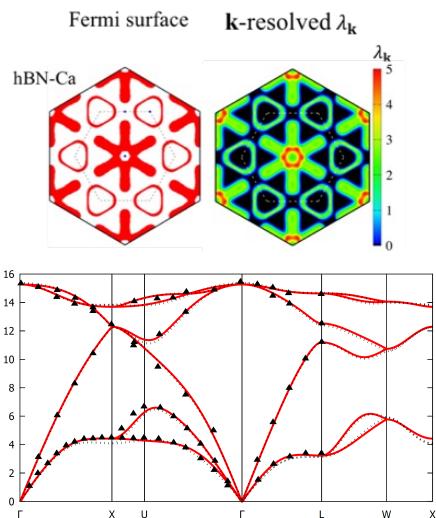


次世代メモリに使える新物質が
見つかるかも!?

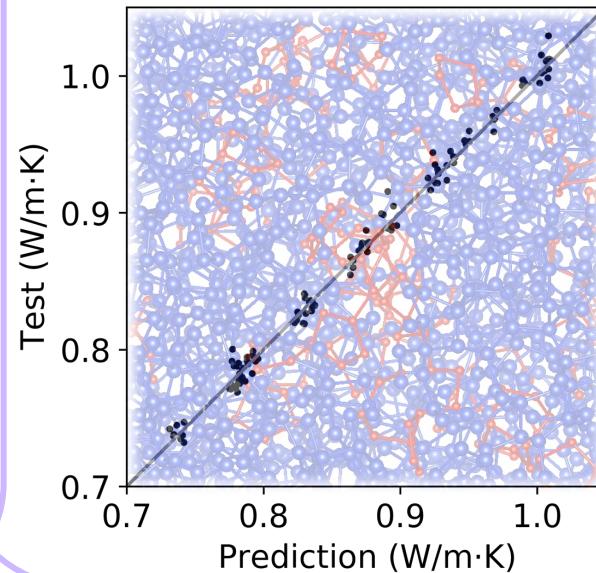
まとめ

産業科学研究所 ナノ機能予測研究分野

第一原理計算

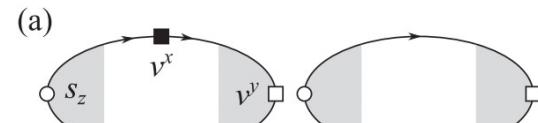


データ科学



物性理論

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}_{sa}^{ij} &= \frac{\hbar}{\eta} \gamma_a^{ij(I)} + (\gamma_a^{ij(II)} + \epsilon^{ijk} \chi_{ak}^{\text{so}}) \\ &= \frac{\hbar}{\eta} \gamma_a^{ij(I)} - \frac{q}{\hbar} \sum_n \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \\ &\times [s_{na}^j \partial_{k_i} \epsilon_n f'(\epsilon_n) + \epsilon^{ijk} b_{nak} f(\epsilon_n)].\end{aligned}$$



基礎理論から機械学習まで、結晶からアモルファスまで、幅広くナノスケール物性を追求します