第一原理フォノン伝導計算：その最前線とポスト「京」/マテリアルズインフォマティクス時代への展望

First-principles phonon transport calculation: its frontier and prospects for the era of the post-K computer and materials informatics

○只野 央将[1]、常行 真司[2,3]（1. 東大院工、2. 東大院理、3. 東大物性研）

○Terumasa Tadano[1], Shinji Tsuneyuki[2,3]

(1.Dept. of Appl. Phys., Univ. Tokyo, 2. Dept. of Phys., Univ. Tokyo, 3. ISSP, Univ. Tokyo)

E-mail: tadano@solis.t.u-tokyo.ac.jp

バルク材料の格子熱伝導率は結晶構造や組成などによって 0.1 W/mK から 10^4 W/mK まで非常に幅広く分布しており、この物質依存性の微視的な起源を理解することは基礎科学的興味としてだけでなく、ナノ構造化によって熱制御を行う際の指針を得る上でも極めて重要である。近年、密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算を出発点として、格子振動の非調和性やフォノン伝導特性を統一的に扱うためのモデリング手法が開発され、その有効性が様々な系で実証されてきた。ハイパフォーマンスコンピューティング技術の発展とモデリング手法の進歩によって熱物性の非経験的かつ定量的予測が現実的なものとなり、さらに ALAMODE [1]や ShengBTE [2]など第一原理フォノン伝導解析のための汎用計算パッケージが公開されるなど新たな広がりを見せつつある。

本講演では、はじめに第一原理フォノン伝導計算の基礎理論を紹介し、つづけて第一原理計算がフォノン散乱機構の微視的理解に重要な役割を果たした象徴的な応用例をいくつか述べる。また、熱電材料として実用化されている PbTe や無次元性能指数 ZT=2.6 という極めて高い性能が近年報告された SnSe など、構造相転移近傍で格子振動の非調和性が非常に強い系に対する新たな計算手法を紹介し、第一原理計算の適用範囲が非常に広いことを示す。

その後、第一原理計算とポスト「京」コンピュータ/マテリアルズインフォマティクス（MI）との融合によって期待される今後の進展について話題を提供する。MI の基盤技術である統計的機械学習によるモデリング手法の高効率化・高精度化、データマイニングによる新材料探索及びハイスループット計算による候補材料のスクリーニングなどは材料開発プロセスを飛躍的に効率化させると期待されており、その応用範囲はフォノンエンジニアリングに限らず非常に幅広い。本講演では、MI に基づくフォノン伝導特性のモデル化と新奇熱電材料の探索に関する先駆的な研究例を紹介し、その有効性と今後の展望を述べる。

[1] http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/alamode/alamode

[2] http://www.shengbte.org

© 2016年 応用物理学会