

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 層状物質における電子フォノン相互作用の波数・エネルギー分解第一原理解析

2. 個人研究者名

南谷 英美（自然科学研究機構分子科学研究所 准教授）

3. 事後評価結果

本研究では、発熱過程を制御する方法を提案するため、電子フォノン相互作用を密度汎関数摂動理論に基づく第一原理計算によって高精度に計算し、その異方性を明らかにすることを目的として行われた。

その結果、通電による発熱について第一原理計算を使って、電子およびホールエネルギーからフォノンに変換される過程を明らかにした点は高く評価できる。特に、正孔のエネルギーは、ほぼ光学モードのフォノンに変換されるが、電子では一部が音響モードに変換されているといった興味深い結果が得られている。その際、電子とフォノンの相互作用を、クリアな物理モデルの提案により方程式に具現化し計算を行っている。

今回開発した、電子とフォノンの相互作用を第一原理計算と Neural Network を組み合わせた計算法は、今後のフォノンエンジニアリングへの貢献が期待される。開発した計算法を、不純物の影響等も踏まえ現実的な対象にも適用できるようになると研究成果の波及効果もさらに大きくなると思われる。

今後は、実験を行う研究者との連携を深める等、さらに現実的な成果を出していくことを期待する。