

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書

鈴木 通人

東北大学金属材料研究所
准教授

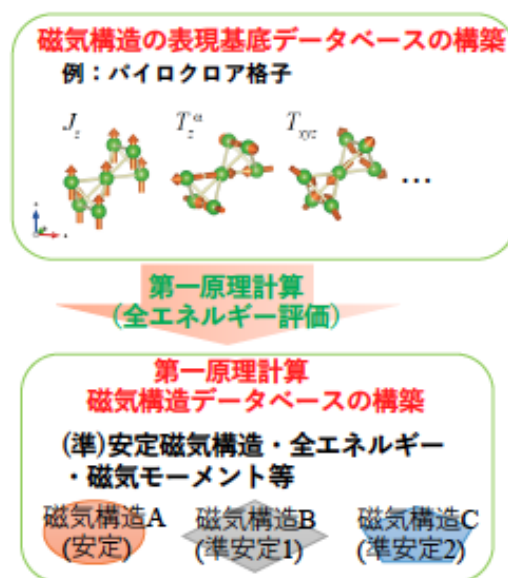
多極子理論とデータ科学の融合による物質設計

§ 1. 研究成果の概要

機械学習は大量のデータを学習することで目的に即した最も確からしい答えを迅速に探し出す技術であるため、学習を行うための大規模なデータベースが必要になる。2018 年度はマテリアルズ・インフォマティクスに基づく強磁性体・反強磁性体の物質設計フレームワークの構築に向けて、第一原理計算による磁気構造データベースの構築に取り組んでいる。この磁気構造データベースの構築にあたっては、研究代表者が独自に提案している、安定磁気構造の候補となる、対称性・多極子によって分類された磁気構造の生成手法と、第一原理計算に基づく全エネルギー計算による安定性評価を組み合わせることで、安定・準安定な磁気構造を予測していき、結果となる計算データを蓄積していく。

大規模な磁気構造データベースを構築するためには、上記の磁気構造生成、第一原理計算による安定性評価、安定・準安定磁気構造の判定といった一連の流れの自動化が必須であり、これまでの研究で、スーパーコンピュータ上においてこのデータ蓄積システムの開発に成功している。この安定・準安定磁気構造データの蓄積システムでは、結晶構造の汎用的な記述書式である cif ファイルから結晶構造の情報を読み込んで、与えられた結晶構造に対して候補となる磁気構造を生成し、第一原理計算によって最安定な磁気構造を見出すという一連の流れの自動化に成功している。また、磁気構造データベースの構築に必要な理論基盤となる磁気構造の生成手法に関して、あらゆる結晶構造に適用できるように理論を洗練した上で論文を執筆・投稿している (<https://arxiv.org/abs/1902.10819>)。

この他、磁性体の物性予測を行う上で必要となる第一原理計算に基づく異常ホール伝導度・熱伝導度の計算手法を活用した研究として、実験グループとの共同研究によって巨大異常ネルンスト効果を示す強磁性半金属の発見(Nature Phys. 14, 1119 (2018))や反強磁性体で発現する異常ホール効果・異常ネルンスト効果の物性解明 (<https://arXiv.org/abs/1902.06601>)に貢献している。



§ 2. 研究実施体制

①研究者:鈴木 通人 (東北大学金属材料研究所 准教授)

②研究項目

- ・対称性と多極子によって分類された安定磁気構造候補の生成手法
- ・クラスター多極子理論と第一原理計算による磁気構造データベース構築のフレームワーク