

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

2019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

本研究では、磁性体に特有の物性現象の発現を左右する磁気構造を、研究代表者が提案する多極子展開による磁気構造の表現・生成手法と第一原理計算を組み合わせた予測手法によってデータベース化し、そのデータベースをもとにデータ科学手法による磁性体の解析を実施することで、磁性体の新しい物質設計手法を構築することを目指している。

2019年度は本データベース作成の基盤理論となる多極子展開による磁気構造の表現・生成手法に関する理論論文を出版したほか(図1, M.-T. Suzuki *et al.*, Phys. Rev. B **99**, 174407 (2019) Editors' Suggestion)、磁気構造生成手法と第一原理計算の融合による安定磁気構造の評価手法を適用することで、アンチペロブスカイトマンガン窒化物における磁気構造と異常ホール効果の発現に関する研究を実施し、論文を出版している(V. Huyen, M.-T. Suzuki *et al.*, Phys. Rev. B **100**, 094426(2019))。また、研究代表者らが提案する多極子展開にもとづく磁気構造の生成手法と第一原理計算による安定・準安定磁気構造予測の理論的枠組みの構築に取り組み、結晶の特徴である原子配列の周期性よりも長い周期を持った磁気配列を含む一般の磁気構造を、結晶の持つ対称性に適合する形で生成する理論拡張に取り組んでいる他、結晶構造データベースとの連携によって、第一原理計算による安定磁気構造の予測を逐次的に行っていくデータ蓄積のための計算フレームワークを発展させている。

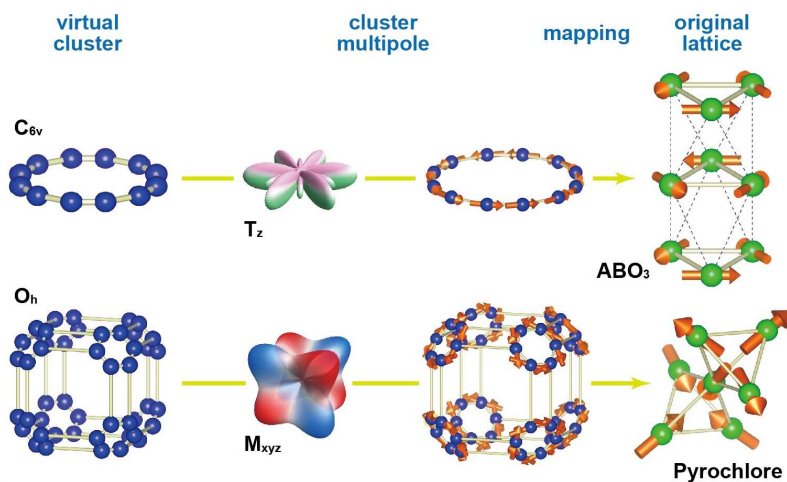


図1 多極子理論を応用した磁気構造生成のイメージ
(M.-T. Suzuki *et al.*, Phys. Rev. B **99**, 174407 (2019))