

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 多極子理論とデータ科学の融合による物質設計

2. 個人研究者名

鈴木 通人（東北大学金属材料研究所 准教授）

3. 事後評価結果

磁気構造の解析手法であるクラスター多極子法を一般化することで、結晶構造に対称性の観点から適合する磁気構造を自動生成する理論を発展させ、この磁気構造生成手法と第一原理計算の全エネルギー評価による安定磁気構造のスクリーニングを活用し、実験的に磁気構造が確定しないアンチペロブスカイトマンガン窒化物の反強磁性相を解析し、これらの化合物において異常ホール伝導度を増強する要因を明らかにした。また、中性子散乱実験によって同定された磁気構造と第一原理計算によって得られる安定・準安定磁気構造を系統的に比較解析することで、第一原理計算の基本近似に基づく磁気構造スクリーニングのベンチマーク計算を実施し、磁気構造の予測性能を議論した。磁気構造データベースの構築手法として、ハイスループット第一原理計算システムを開発した。

物質の磁気構造は異常ホール効果やスピン熱電特性などにとって重要で、近年改めて注目されており、新材料の磁気構造が予測できれば、目的に合わせた材料探索のために非常に有用である。ところが複雑な磁気構造の場合は実験だけで決定することが困難で、理論計算・解析も非常に手間がかかる。本研究で開発された解析手法および準備中の磁気構造データベースは、そのような研究を加速させるものであり、他に類例のないオリジナリティの高い成果である。