

研究領域「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」
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)

研究の概要

物質の物性を理解するためには、しばしばその物質の有効模型を作成し、そのモデルを使って物質を理解するということが行われる。これは、議論が簡単になるだけでなく、様々な物質の違いを系統的に理解することにも役立つ。近年、この有効模型作成を第一原理計算に基づき定量的に行うことが可能となってきており、物性の定量的かつ系統的な理解が進んできている。一方、データ科学の手法を物性に適用するため、結晶構造のデータベース化やそれに基づく第一原理計算の結果のデータベース化も行われるようになってきている。そこで、本研究では、この結晶構造データベースから有効模型のデータベースを作成することにより、従来の理論的手法とデータ科学的手法の融合した、新しい物質設計の道筋を確立することを目指した。

研究の成果

まず、電子状態を表現する有効模型であるタイトバインディング模型の構築手法を自動化し、データベースを構築した。その際の実装の一部は、wannier90と呼ばれるコードにも取り込まれた[1]。さらに、電子格子相互作用パラメータの計算手法も自動化し[2]、超伝導転移温度の計算データを蓄積した。

一方、強磁性体に対しては、タイトバインディング模型のデータベースからバンドのトポロジカルな性質を計算することにより、異常ホール効果、異常ネルンスト効果のデータを蓄積した。また、タイトバインディング模型からジャロシンスキー守谷相互作用を計算する手法として、スピン流を用いた手法を開発し[3,4]、データベースに適用した。これらの有効模型データベースと計算データベースをもとにデータ科学的手法の適用も進めている。これらの結果は今後の物質設計を進める上で貴重な知見になるだろうと考えている。

参考文献・リンク

- [1] <http://www.wannier.org>
- [2] T. Koretsune and R. Arita, *Comp. Phys. Comm.* **220C** 239 (2017)
- [3] T. Kikuchi, T. Koretsune, R. Arita, G. Tatara, *Phys. Rev. Lett* **116** 247201 (2016)
- [4] T. Koretsune, T. Kikuchi and R. Arita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87** 041011 (2018)

