

MERIT インターンシップ（国内）報告書

工学系研究科 物理工学専攻

MERIT 4 期生

杉田悠介

【実施期間】

2018年6月25日～7月27日

【受け入れ先】

産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター

【概要】

茨城県つくば市に拠点をおく産業技術総合研究所機能材料コンピューショナルデザイン研究センターに技術研修生として滞在させていただいた。同センターの三宅隆主任研究員のグループでは、近年、機械学習と第一原理計算にもとづいた物性の理論研究に取り組まれており、本インターンシップではそうした手法によって遷移金属化合物の磁性に注目した理論研究に取り組んだ。

【研究内容】

磁性材料は電動モータやストレージデバイスなどの様々な電子機器で利用されているため、飽和磁化やキュリー温度などの磁気特性を微視的理論から正確に予測することは非常に重要な課題である。それは、一方で、磁性材料が多数の電子からなる量子多体系であるために困難な問題でもある。過去の研究は、深い洞察にもとづいて、特定の物質群の磁性に関する規則を定性的な議論から導き出してきた。例えば、結晶構造と電子数から超交換相互作用の符号や大体の大きさを予測する金森-Goodenough則はその典型例である。さらに、近年では計算機やアルゴリズムの発展にともない、第一原理計算による電子状態のシミュレーションや機械学習による大規模な実験・計算データの解析が可能となった。そこで、本研究の目的はそうした計算科学の手法を用いて、過去に提案された規則の定量的な検証やより一般的なものへの拡張を試みることである。

インターンシップの期間には、第一原理計算によって磁気相互作用を見積もる方法と機械学習ライブラリを利用したデータ解析について学んだ。そして実際に、ペロブスカイト構造をもつ種々の物質で磁気相互作用の大きさを見積もり、その振る舞いの系統性

について解析を行った。今後はこの研究を継続して、他の物質群に対しても解析を進めることで、結晶構造や構成元素などから遷移金属化合物の磁気相互作用の振る舞いを定量的に導く予測機の構築を目指したい。

【謝辞】

1ヶ月間の受け入れを承諾してくださった産業技術総合研究所に深くお礼申し上げます。特に、受入研究者として事務的な手続きから研究に関するご指導まで様々なことでお世話してくださった三宅隆様、第一原理計算に関して多くのことを教えてくださった深田太郎様、滞在手続きでご支援くださった原田久美様、そして、充実した研究環境に私を迎え入れてくれた機能材料コンピューショナルデザイン研究センターの皆様には大変感謝しております。また、本インターンシップの実施を快諾してくださった指導教員の求幸年教授と副指導教員の岩佐義宏教授、そして、このような貴重な機会を提供してくださったMERITプログラムに深く感謝いたします。