

MERIT インターンシップ報告書

新領域創成科学研究科 物質系専攻
博士課程 2年/MERIT8 期生
三澤 龍介

実施期間

2021年12月6日～2022年2月9日

受け入れ先

株式会社村田製作所 技術・事業開発本部 新規技術センター 先端技術研究開発部

テーマ

対称性を活用した ferroaxial 物質のスクリーニングに関する研究

背景

物質の有する対称性は、その物質の示す様々な物性を支配している。私の博士課程では、物質内の主に磁気構造の有する対称性に着目して、共鳴 X 線回折を用いた観測を行ってきた。近年、ferroaxial と呼ばれる対称性が着目されている。この対称性は、主軸を含む鏡映面、および主軸に直交する二回軸が破れた構造が有するものであり、実際の結晶構造においては、基準となる構造に対して一部分が主軸回りに回転することで実現する。この対称性を有する物質は、electrogyration と呼ばれる印加電場の一次に比例した旋光性を示す。この時旋光角は印加電場の方向、ferroaxial ドメインの符号によって異なることが知られている。この性質を用いて、弊研究室では微小な旋光角を二次元的に測定する技術を活用して物質内の ferroaxial ドメインを観測することに成功している¹。このように、対称性に立脚した新たな新規物性を開拓することを目的として、弊研究室では村田製作所との共同研究を行っている。そこで、新規物性の探索および製品への実装の過程を学ぶ機会として、株式会社村田製作所における MERIT インターンシップを企画・実施した。本インターンシップでは、ハイスループットスクリーニングを活用した物質探索の方法や、計算科学を活用した物性の評価や、材料合成、試験的なデバイスへの実装の過程を学ぶことを目的とした。

¹ Hayashida, T. “Visualization of Ferroaxial Domains in an Order-Disorder Type Ferroaxial Crystal.” *Nature Communications*, 11, 4582 (2020).

活動内容

物質・材料データベースに登録されている約250,000件の物質の中から、electrogyrationを示し得る物質のスクリーニング探索を行うシステムの構築を行った。まずferroaxialな対称性を有する物質を対称性判定によって抽出し、結果として約200件の候補物質を得た。これらの候補物質を第一原理計算および目視確認によって評価し、これまでの経験的事実と照らし合わせることで抽出条件を定め、最終的に約50件の有望な候補物質へと絞り込んだ。こうして得られた候補物質の中には、electrogyration発現の鍵となるferroaxial-nonferroaxial相転移が既に報告されている物質も多数含まれており、本スクリーニング手法の妥当性を示唆する結果となった。中には、これまでelectrogyration材料としては着目されていなかった物質も含まれており、これらの物質を新たに見出すことができたことは、今回のインターンシップの大きな成果の1つである。最終的には単結晶合成の可否、光学測定の実現性について過去の文献をもとに検討を行い、幾つかの実験すべき有望な候補物質を得ることができた。今後は実際の材料合成や光学評価を行い、探索手法へのフィードバックを行うことで、より大きな光学効果を示すelectrogyration材料の探索や、材料設計指針の構築につながることを期待される。

所感

本インターンシップにおいては、これまでの研究活動においてはイメージしていなかった企業での研究開発の現場に一定期間身を置いて、物質探索や計算科学など比較的経験の浅い分野での研究を集中的に行えたことで、普段の研究活動においても大変刺激となる内容であった。また、企業での研究環境や設備を実際に見学させていただき、大学での生活とは大きく異なる規模や、就業時の日常生活に驚かされるが多かった。一方で研究の現場の雰囲気は私の所属する研究室に近く、オープンなデスクの周りで気軽に議論を行う環境は大変印象的であった。

謝辞

コロナ禍において、現地事業所でのインターンシップをセッティングしてくださった株式会社村田製作所の廣瀬様に感謝申し上げます。また現地で直接指導してくださった村田様、平井様をはじめ、配属部署の皆様にご多大のお世話になりました。感謝申し上げます。最後に指導教員の木村先生、副指導教員の勝本先生には、インターンシップの機会を与えていただきましたことに感謝申し上げます。