

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 沙川研究室

博士課程 2 年 MERIT 10 期生

澤田 太郎

インターンシップ概要

・実施期間

2023年10月23日～2023年11月24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

・研究課題

計算科学とデータ科学を活用した誘電体材料の研究

研究背景・業務内容

近年、機械学習をはじめとしたデータ科学が実社会に応用される事例が増えている。特に物質科学の分野での有用性は目覚ましく、新規物質の探索など、従来は人の手で実験をしながら調べる必要があった部分を代替することが可能になっている。このようにデータ処理をメインとした物質科学の方法論はマテリアルズインフォマティクスとよばれ、新たな時代の潮流となっている。今回の受入れ先である村田製作所もこのマテリアルズインフォマティクスには力を入れており、IT系の他企業と協同して自社のデータサイエンティスト教育プログラムを実施するほどである。

物質探索は古くから研究されてきた課題であり、物質合成によって新たな組成をもつ物質を探す課題もあるが、そもそも既知の物質に対しても、すべての材料物性を実験によって調べることは現実的ではなく、試行錯誤のサイクルが早い数値計算で正確な物性を予言する需要が常にあった。しかし、既存の第一原理計算や、第一原理計算と分子動力学法を組み合わせた固体シミュレーションなどは、正しい計算結果を出力はするが計算コストが重いという欠点があった。この欠点によってセルサイズを大きくできなかった結果、例えば結晶構造の逐次相転移などを正しく予言できないという原理的な問題が発生していた。

本インターンシップでは、VASP とよばれる第一原理計算用のパッケージに近年実装された、第一原理計算の代替手法[1]の有効性や普遍性を検証した。代替手法は、有限温度の固体シミュレーションに対して、小さいセルサイズでの第一原理計算の実行データを機械学習することで、より大きいセルサイズでの第一原理計算をスキップする手法である。この手法を用いることにより、学術

的に興味深い応用例として先行研究がなされていた BaTiO₃ の計算結果を再現できただけでなく、その他応用上の重要性ももつ物質群に対して代替手法が有効であることと、普遍性をもつことの両方を確かめることができた。詳細については割愛させていただく。

所感

これまでの自分の研究はかなり基礎理論に近いものであり、実際の応用とは距離があったため、学部で学んだ物性理論の知識が材料探索に直接応用されている現場を見ることができたのは非常に有意義であった。特に、線形応答理論や相転移付近のシミュレーションなど、学部以来まったく触れていないような分野の知識も総動員しながら新しい分野を吸収する経験は唯一無二であった。また、理論計算が不可能な領域を計算で攻めるといふ分野の特性上、正当性の確認が難しいという特殊事情を身をもって実感できたように思う。その他、様々な社員の方々の研究内容を聞くことで、材料物性探索に関わる専門分野の広さと、それぞれの分野間の違いが明確に意識され、理論物理出身である自分の専門性を改めて認識することができた。

また、本インターンシップを通じ、少なくとも担当いただいた部署での研究の進め方は研究室とさほど変わらないような印象を受けたが、それには企業における研究部門の立ち位置がかなり影響しているという事実が注意された。現在進路の1つとして企業研究職を検討しているので、今後のキャリア選択にも役立つ経験だったと考えている。

謝辞

インターンシップ受け入れを快諾くださった株式会社村田製作所の皆様に心からお礼を申し上げます。特に、受け入れ担当者として、インターン開始前から日程や宿の調整など様々ご協力いただき、開始後もテーマ設定から方向性の適宜修正など、親切にご指導いただいた平井様、計算結果の解釈などについてもっとも時間を割いて密接に議論いただいた金川様、その他多くの助言や議論の時間をいただいた新規技術センター先端技術研究開発部のみなさまに感謝申し上げます。

また、計算物質科学高度人材育成・産学マッチングプログラム (MP-CoMS) の皆様には、インターンシップのマッチングから開催前後の事務手続きに関して多くのご協力をいただきました。この場を借りてお礼を申し上げます。最後に、インターンシップへの参加を快諾くださった指導教員の沙川先生、副指導教員の中辻先生、MERIT 事務局の皆様にも感謝を申し上げます。

[1] R. Jinnouchi, F. Karsai, G. Kresse, Phys. Rev. B **100**, 014105 (2019)