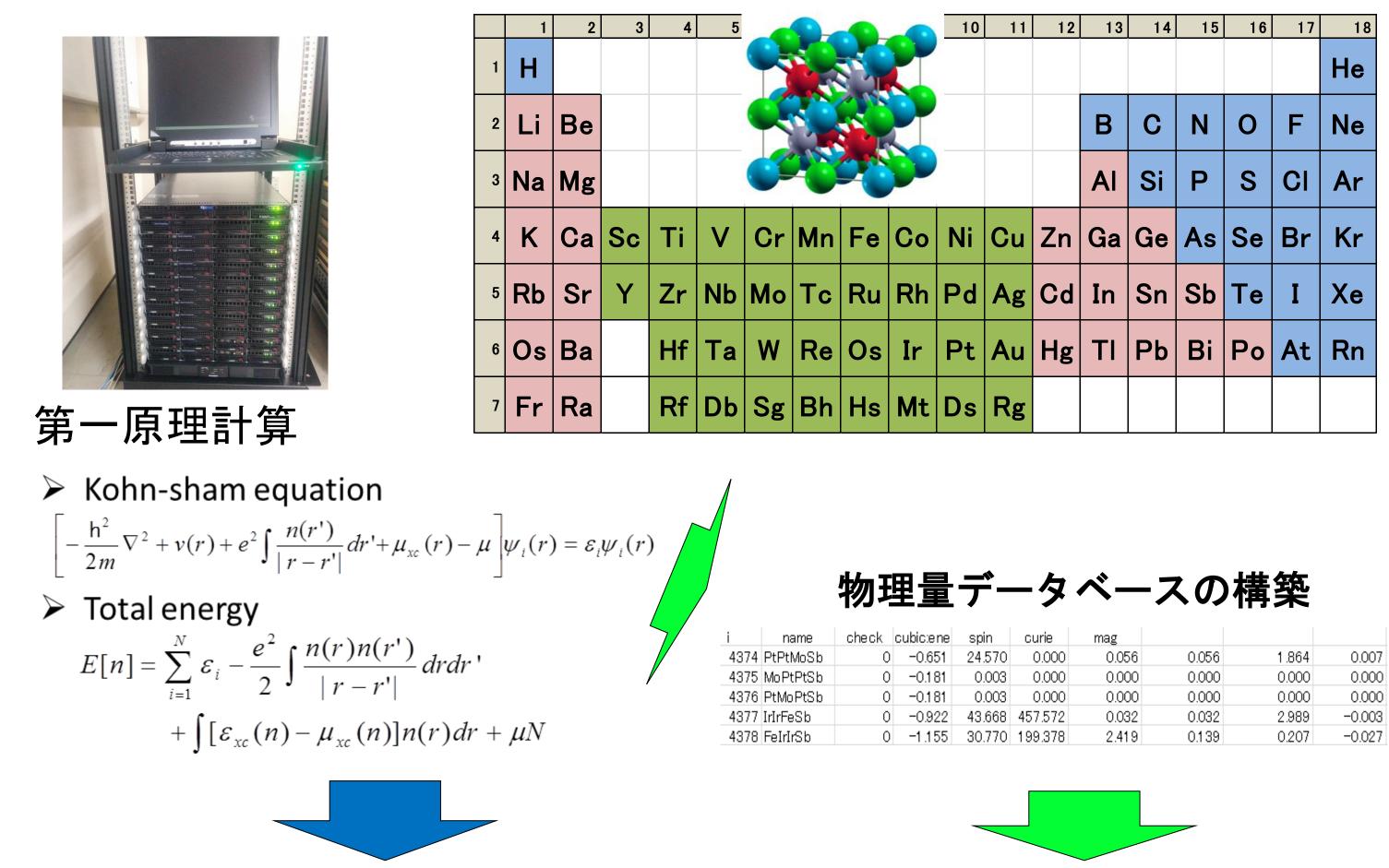
第一原理計算による新機能物質設計

物性機能設計研究室

教授:白井正文、准教授:阿部和多加、助教:辻川雅人、新屋ひかり

研究目的

経験的パラメータを用いずに物質の電 子状態が予測できる、第一原理計算を主 な手法とし、新奇材料開発に取り組んで いる。次世代情報デバイスの基盤となる ナノ構造などで発現する量子物理現象を 理論的に解明し、デバイス性能の向上に つながる新たな材料提案を試みている。 また、この種の研究において基礎的部分 を成す、構造探索手法の開発にも取り組 んでいる。加えて、最近ではマテリアル ズインフォティクスに基づいた材料探 索・設計についても取り組んでいる。



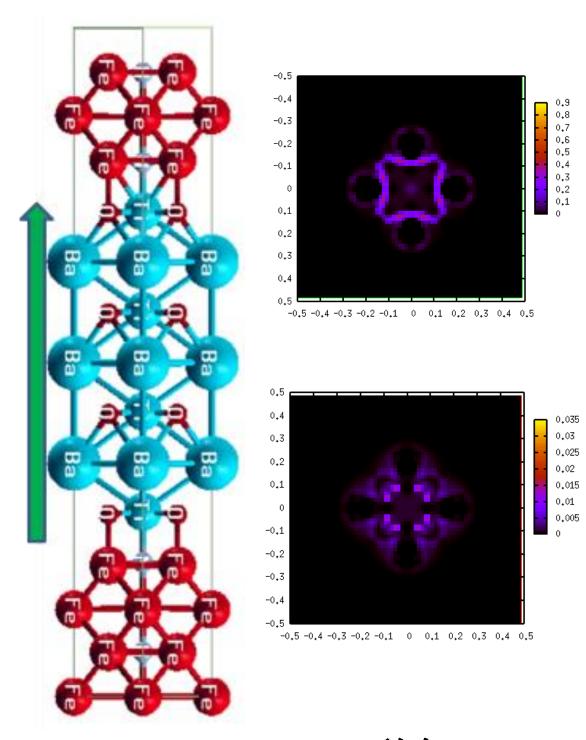
構造、物性、機能 高機能性材料の理論設計

情報科学・機械学習に基づいた 材料の予測・設計

主な研究テーマ

• 磁気抵抗素子

不揮発性磁気メモリに用いられ るトンネル磁気抵抗素子の性能 向上のために、磁性層およびバ リア層材料の設計を行っている。 また、超低消費電力室温動作ス ピントロニクスデバイスの実現に おいてキーテクノロジーと位置づ けられている、金属磁性電界制 御の可能性も探っている。大きな 電界効果が得られる新材料の探 索、並びに磁性が電界制御され る起源の解明を進めている。



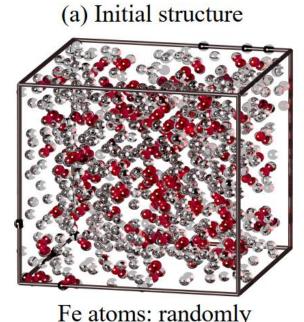
Fe/BaTiO3/Fe磁気ト ンネル接合素子にお けるスピン依存伝導 特性.

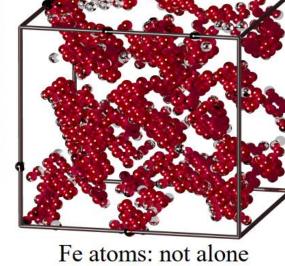
• 強磁性半導

トランジスタの高速動作性と磁性体の不揮発 性を兼ね備える強磁性半導体はムーアの法則の 限界を打破する新技術として期待されている。

マテリアルズデザインにより高いキュリー温 度を持つ物質と、その作製方法を提示すること が可能である。下図は(Ge, Fe)におけるデザインの

例である。600°Cでアニー リングすると大きなFe原 子のクラスター(赤い部分)が形成され、キュリー温 度が劇的に向上すること が示唆された。





Few 1NN bonds

Large cluster by 1NN bond

• 第一原理構造探索

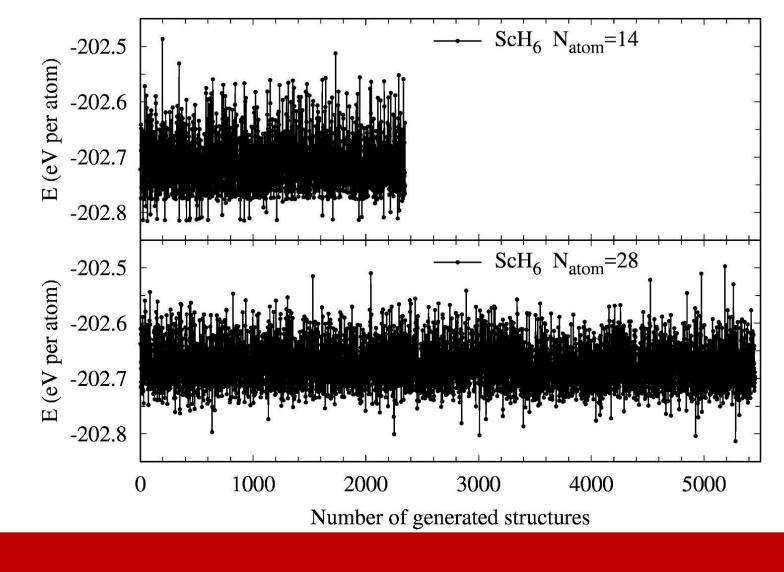
高圧分野では最近、構造探索技術の開発が活発 に行われている。本研究ではランダム構造探索法 の開発を試みている。

下図は、200GPa付近のScH。に対し、ランダムに 生成された構造から構造緩和を実施し、エネルギ ーをプロットしたものである。原子数14個のセル を用いた場合、安定構造は100回に1回程度現れた 。原子数28個のセルでも、安定構造は1000回に1回 程度現れる。本手法では完全な並列処理が可能で あり、今後大規模系に拡張できると期待される。

・機械学習による物性予測

材料探索・設計の高効率化にデータサイエンス の手法を用いるマテリアルズインフォマティクス の研究が世界的に急速に進んでいる。

本研究では第一原理計算を用いた4元ホイスラ 一合金の物性値データベースを作成し、そのデー タベースを用いた機械学習により高効率な材料探 索を試みた。下図はスピン磁気モーメントおよび 形成エネルギーのランダムフォレストによる予測 を行った結果であり、機械学習により高精度な予 測が可能であることが示された。



高圧Sc水素化合物 に対するランダム 構造探索.

