

合田義弘 研究室



准教授
合田義弘

計算機実験による物性理論

URL <http://www.cms.materia.titech.ac.jp/>

はじめに

物質・材料の原子配置や特性の多くは、電子の状態によって微視的に決定されています。その様な電子状態を、実験的・経験的パラメーターによらず、量子力学・統計力学の基本原則と素電荷や Planck 定数といった基礎物理定数のみから求める手法が第一原理電子状態理論です。我々の研究室の目指している所は、コンピューターの中で仮想的に物質を作り、その性質を調べる事により、単に実験結果を説明するだけでなく、まだ行われていない実験の結果を予測し、あるいはまだ作られていない未知の物質・材料を理論的にデザインする事です。

研究について

我々の興味の直接の対象は物質・材料中の電子です。当研究室では、永久磁石材料の材料組織界面からナノテクノロジーの基礎となる表面ナノ構造までの多彩な対象をターゲットとして、「京」や TSUBAME 等の学内外のスーパーコンピューターを活用した大規模な第一原理計算を実行しています。電子状態理論の適用限界を広げるための手法開発も行っています。良い研究結果が得られれば、国際的な学術雑誌に結果を公表し、海外での国際学会で成果を発表する事が可能です。

研究テーマについて

1. 永久磁石材料の高性能化に関する基礎研究

風力発電タービンやモーター等の高温環境で用いる永久磁石材料を、希少元素を使わずに開発する事が社会的課題となっています。その開発指針を得るための学理を構築すべく、Nd-Fe-B (図1) や Mn-Bi といった永久磁石材料の第一原理計算を行っています。磁化反転挙動のメカニズムを解明するためには材料組織の効果を考慮する事が必須であるため、スパコンによる材料組織界面の大規模第一原理計算を行い、原子構造探索と磁気状態解析を行っています。磁性金属材料を電子論的に理解する事で新材料設計指針を提示する事を目指しています。

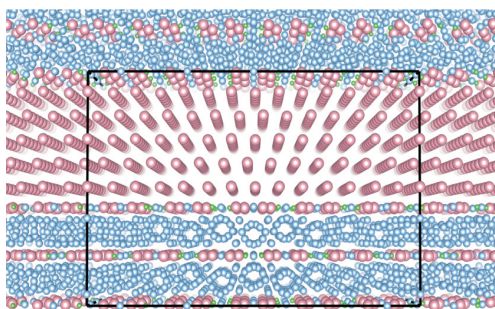


図1: Nd-Fe-B 焼結磁石の材料組織界面 (主相は $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 、副相は dhcp Nd)。この様に原子スケールで平坦な界面が走査型透過電子顕微鏡による観測によっても得られている。

2. ナノ構造におけるスピン物性への重元素効果の解明

電子デバイスにおいて、素子のサイズがナノスケールまで微細化されると、材料内部だけでなく表面・界面の効果や量子効果が無視できなくなってきました。特に、表面・界面では物質内部には無い物性が現れる事があり、例えば AlN は非磁性絶縁体、 MgB_2 は非磁性金属・超伝導体ですが、我々の物性予測によればこれらを接合した界面では2次元強磁性が発現します。また、Bi の様な原子番号の大きい重元素を含むナノ構造では、ポテンシャル勾配と相対論効果が組み合わさる事により、特異なスピン状態を取る事があります。その様な金属ナノ構造に対して、第一原理計算から物理現象の理解を深化させ、その背後にある普遍的な法則を見いだす事を目指しています。例えば、Si(111)-B 基盤上の Bi(110) 超薄膜の原子構造と電子状態の同定を実験と連携して行っています(図2)。

3. 第一原理電子状態理論と格子模型の融合に向けた手法開発

材料組織はマイクロメートルスケールの非常に大きなもので、その理論解析を十分行うためには第一原理計算と現象論的格子模型を組み合わせる事が有効です。また、磁化反転のダイナミクスや温度特性を記述するためにも格子模型は有用です。その様な格子模型と現実の物質を結びつけるために、格子模型でのパラメーターを第一原理計算により求める手法の開発を行っています。これまでは原子サイト毎の磁気異方性定数の計算手法を開発し、局所異方性解析に活用しました [Appl. Phys. Lett. (2014).]。

メッセージ

興味をもたれた方は気軽に合田まで詳細をお問い合わせ下さい。研究室所属の際には基礎的な量子力学・統計力学を習得している事が望ましいですが、プログラミング言語は必要になった時に身につければ良いと思います。

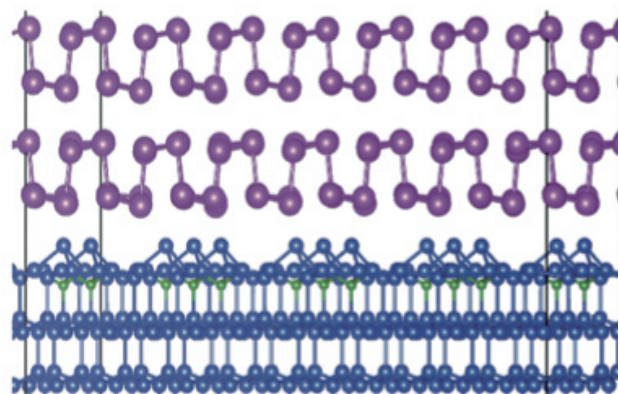


図2: Si(111)-B 基盤上の Bi(110) 超薄膜の原子構造。