

# 合田義弘 研究室



准教授  
こうだ  
合田義弘

第一原理物性理論：計算機の中に物質をつくる

<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。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はなく、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を目指しています。

## 研究について

当研究室では、永久磁石材料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、「富岳」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おり、また物質探索では Bayes 最適化などの機械学習も活用しています。当研究室では、良い研究結果を得た学生は修士1年の段階からアメリカ物理学会で成果を発表し、修士2年次では国際的な学術雑誌に結果を公表しています。

## 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 Sm-Fe 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 [APL(2014); PRApp(2016); PRMater(2018); JCP(2018).]

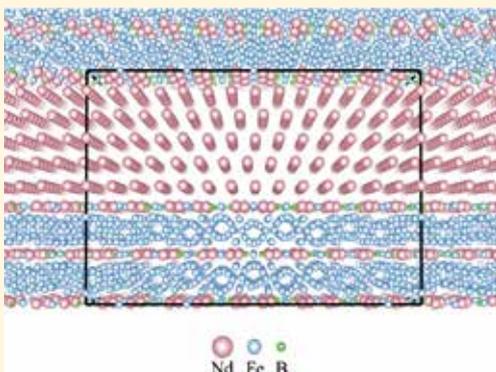


図1：Nd-Fe-B 焼結磁石の材料組織界面（主相は Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B、副相は dhcp Nd）。この様に原子スケールで平坦な界面が走査型透過電子顕微鏡による観測によっても得られている。

### 2. 表面・界面におけるナノ構造の物理

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す。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 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 (図2) [PRB-Rapid(2018)]. あるいは、強磁性体と強誘電体の接合系では電界や応力により磁性を制御することが可能なものがあります (界面マルチフェロイクス) [PRApp(2019); JAP(2019)]. その様な新奇な物理現象に対して、第一原理計算から理解を深化させ、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。

### 3. 第一原理電子論と格子模型の融合に向けた手法開発

磁気的熱揺らぎを考える時、有効1電子状態は必ずしもスピンの固有状態として表現できるとは限らず、これを第一原理電子論で直接扱うのは難しいのが現状です。一方、現在用いられている Heisenberg 模型などの格子スピン模型は、様々な近似により問題を簡略化しすぎており、現実物質の定量的記述には大きな問題があります。我々は、定量的な第一原理電子状態理論と格子模型を融合することにより、磁性材料の Gibbs 自由エネルギーを定量的に評価する手法を開発し、磁気冷凍材料など様々なターゲットに応用しています。

### 4. 耐熱金属の高強度化に向けた基礎研究

高温環境における金属材料の力学特性を向上させる機構のひとつとして、異種原子を添加することによる固溶強化は有効ですが、その根源的な理解は未だ不十分です。我々は、固溶強化において重要となる局所ひずみの理解を通じて、様々な金属材料に対して最適な固溶元素の探索を行なっています。また、実験グループと共同で、材料組織の最適化に必要な多元系状態図を整備しています。

## 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でしょう。

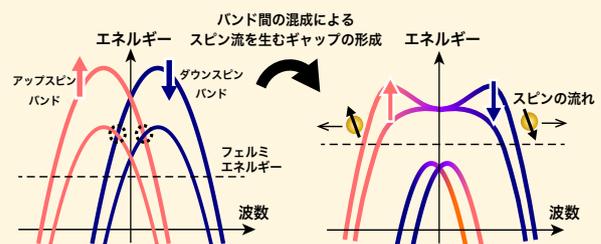


図2：Rashba 効果を活用したスピン流生成原理の概念図。