

# 合田義弘 研究室

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/>



教授  
合田義弘



特任助教  
田中友規

## 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理論が第一原理電子論です。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、磁性材料・構造材料からナノテクノロジーの基礎となる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、また物質探索ではグラフニューラルネットワークや 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などでの国際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. 磁性金属材料

ロボット用モーターや風力発電タービン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指針を得るために、電子論に基づく有限温度磁性の評価手法開発や、高い磁気特性と構造安定性を両立する新物質探索を行なっています。これまで、新手法によってスピンフォノン結合の効果を考慮すると、格子振動により常磁性状態が安定化し(図1)、鉄の理論的な Curie 温度が 500 K 以上変化することを明らかにしました [npj Comput. Mater. 2020]。

現在の磁気デバイスは電流によって磁気状態を制御しており、Joule 熱によるエネルギー散逸による消費電力の増加が問題となっています。一方、マルチフェロイク界面と呼ばれるナノ界面構造では、電流によって磁性を制御することができ、その実用化が期待されています。その様なデバイスの動作効率を最大化するための、材料設計や磁気特性制御機構の解明を行なっています [npj Spintronics 2025]。

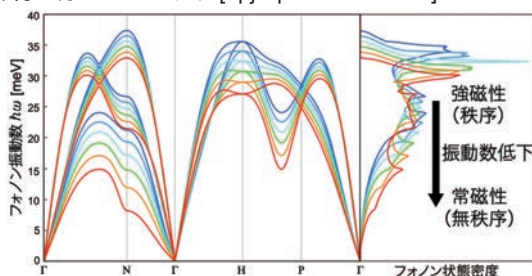


図1：スピンフォノン結合による bcc Fe におけるフォノン振動数の磁気秩序依存性 [npj Comput. Mater. 2020]。

### 2. 自由エネルギー・相平衡と材料組織設計

構造材料と磁性材料では、結晶構造の異なる複数の相から構成される材料組織の効果が非常に重要です。材料組織の設計のためには、材料を構成する相の熱平衡を多元系状態図から理解することが必要ですが、状態図の作成は各相の自由エネルギーを評価することにより可能となります。我々は、Gibbs 自由エネルギーを第一原理電子論により定量化する手法を開発し、航空機のジェットエンジンのタービンで用いられる Ti-Al 基耐熱合金(図2)や希土類永久磁石材料(Nd-Fe-B, Sm-Fe-Cu)など、様々な金属材料に応用しています。特に、電子スピンフォノン結合を取り入れる手法開発に取り組んでいます。

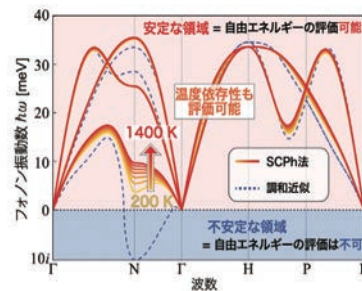


図2：Ti-Al 合金高温相であるβ相 (bcc 不規則相)  $Ti_{0.625}Al_{0.375}$  における調和近似およびセルフコンシステントフォノン (SCPh) 法による有効フォノン分散の温度依存性。

### 3. 表面・界面におけるナノ構造物理

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3)。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。

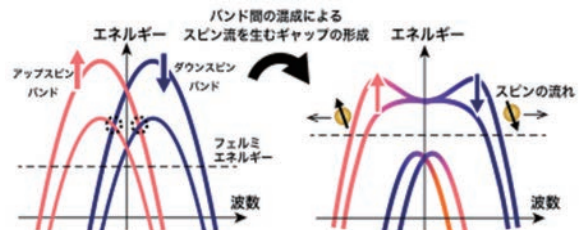


図3：Rashba 効果を活用したスピン流生成原理の概念図 [PRB-Rapid 2018]。

## 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。