

第2回マテリアルズ・インフォマティクス基礎研究会報告

テーマ: 電子デバイス・材料探索のための種々な算法

日時: 2018年3月16日(金) 9:30-12:00

場所: 中央大学駿河台記念館

*参加者: 21名

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)と呼ばれる分野は、発展した経緯の異なる複数の算法により支えられている。今回は、最適化問題、量子化学、統計電磁気学の基盤をもち、各分野で活躍されている研究者3名をお招きし、講演いただいた。大学、企業、研究機関から多数の方々に来場いただき、活発な議論がなされた。招待講演3件、一般講演2件の後に、材料研究を担う行政や企業におけるインフォマティクスへの期待を海住英生氏より紹介いただいた。

1. 趣旨説明

神原陽一 (慶應義塾大学)

研究会の趣旨を、J. B. Goodenough (University of Texas at Austin, USA)のリチウムイオン二次電池の実用化に対する寄与と、それに関連したMIの現状が紹介された。関連する話題として1964年に発刊された材料科学(日本材料科学会誌)1巻より甘利俊一博士による「強磁性物質の塑性構造のフィンスラー幾何学による解明」が紹介された。

2. (招待) 「人工知能」の本質と可能性

相吉 英太郎 (統計数理研究所)

近年話題になっている「人工知能」の基盤として1990年代頃に「人工神経回路(ニューラルネットワーク)」と称されていた分野での成果が紹介された。現代のビッグデータと呼ばれる問題は、物理モデルに対して従属的となる、データ依存型の技術であると示された。初学者にとって、有用な学習問題の解説を予稿原稿に含めていただいた。

3. (招待) 第一原理計算による半導体物性の高精度予測と新物質探索

大場史康 (東京工業大学, 物質・材料研究機構)

密度汎関数理論、および多体摂動論に基づいた現在の第一原理計算の信頼性が、様々な半導体の仕事関数、光学禁制帯(optical band gap)の理論と実験値の比較により定量的に示された。荷電欠陥-補償や格子振動に関する安定性の評価方法とともに、新材料予測の成功例としてCaZn₂N₂の赤色発光の実証が紹介された。

4. (招待) スピンデバイスにおける磁気誘電効果の理論とその実証

海住英生 (北海道大学)

スピントロニクス分野で長年、ホットな話題となっている磁気トンネル接合(MTJ)に焦点を当て、特に MTJ における磁気誘電(Magneto-capacitance: MC)効果を中心に概説していただいた。MC 効果における物理機構の解釈として有力である統計電磁気学模型 デバイ-フレリッヒ(Debye Frohlich)モデルの適用が示され、デバイス設計の進展に対する定量的な予想と、その機能実証が紹介された。

5. (一般) メタマテリアルを利用した新規光学応答

渡邊良祐 (弘前大学)

Veselago により 1960 年代に提案された負の誘電率と透磁率を示す物質、現在では"メタマテリアル"の代表となった材料に関する背景が紹介された。いわゆる左手系と呼ばれる負屈折率媒質の実現の例として均一な媒質中において単調な反射強度を示す s 偏光においても、反射強度が 0 となりうるブリュースター角を金属誘電体多層膜メタマテリアルにおいて実現した成果と、その設計に用いた電磁場シミュレーション結果について紹介された。

6. (一般) ペロブスカイト関連混合アニオン化合物の新機能

神原陽一 (慶應義塾大学)

CaTiO_3 (Perovskite)型酸化物は、 AT_mO_3 (A: アルカリ土類, 希土類, Pb, など, T_m : 遷移金属など)で表される化学組成の天然/人工鉱物である。その機能性、すなわち電気伝導性、誘電性、及び磁性は、化学種のイオン半径と磁性、及び、それらの混合価数状態により系統的に変化することが知られている。Perovskite 型酸化物層を単位格子に含む混合アニオン層状化合物の、高温超伝導をはじめとした機能性が、2009 年より報告されており、その内の $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$ の電子磁気状態相図と、電子状態の系統変化について報告された。

7. 総括

海住英生 (北海道大学)

3 件の招待講演と、2 件の一般講演に関する概要を総括し、MI に対する行政や企業の期待について紹介された。現在の電池材料や磁気材料の開発については、MI は強力な計算手法の一つとなっていることが確認された。

文責: 神原陽一

2018 年 5 月 18 日