

第 197回フロンティア材料研究所講演会

講師：大阪大学大学院基礎工学研究科 石渡晋太郎

7月3日(木)14時～15時半 J1棟809号室

演題：計算・情報科学を活用した準安定強相関物質の開拓

高压合成によって得られる準安定な強相関物質は、高温超伝導を示す水銀系銅酸化物やトポロジカルらせん磁性を示すペロブスカイト型鉄酸化物のように、革新的な電子機能を発現します。しかしながら、こうした物質の高压合成は、研究者の経験と直感に頼る非効率なプロセスであり、計算科学や情報科学の活用も進んでいませんでした。この要因としては、準安定な物質の探索空間が広大で合成経路が単純でないために、第一原理計算による網羅的探索が困難であること、また常圧安定相と比べて既知のサンプル数が少なく、データベースに基づく記述子の抽出が困難であることなどが挙げられます。そこで計算・情報科学を活用した効率的な高压合成を進めるには、人間の知見に基づいたモデル化や探索空間の絞込みを行うことが重要になります。

本セミナーでは、はじめに結晶構造や外場の対称性に基づいた従来の機能性物質開拓の例を紹介し、後半に網羅的第一原理計算による新たなペロブスカイト型遷移金属酸化物の開拓や(図1)、機械学習による準安定強相関酸化物の高压合成に関わる記述子の提案について紹介します。

連絡先：東研 東正樹(5315)