



量子物理学・ナノサイエンス第 305 回セミナー

強磁性物質データベースの構築と 磁気特性予測への応用

講師 : 櫻井 誠大 氏
東京大学 物性研究所

日程 : 12月14日(月) 15:30 -

場所 : Zoom*

概要

近年、膨大な量の結晶構造について、第一原理計算を駆使して種々の物性値を計算し、結晶構造とその物性値(計算値)を集約したデータベースを構築する試みが広がっている [1-3]。この背景には、第一原理計算手法とデータ科学的手法の統合による、物質探索・物性予測の効率化への期待感がある。テキサス大学・アイオワ州立大学・ネブラスカ大学の共同研究グループでは、希少元素を含まない高性能永久磁石の効率的探索を目標に定め、強磁性物質に特化したデータベースの構築とその応用研究 [4-6] を、NSF の支援のもとにすすめている。本セミナーでは、まず、永久磁石の特徴と物性を概観し [7]、それらが第一原理計算でどのように得られるかを紹介する。次に、約 4,000 にのぼる強磁性化合物に関する網羅的な第一原理計算をもとに構築された強磁性物質データベース [5, 6] について紹介する。また、このデータベースと機械学習を組み合わせた物質探索・物性予測についても議論する。

[1] AFLOW, afLOWlib.org.

[2] Materials Project, materialsproject.org.

[3] The Open Quantum Materials Database, oqmd.org.

[4] B. Balasubramanian *et al.*, *Mol. Syst. Des. Eng.*, **5**, 1098-1117 (2020).

[5] M. Sakurai *et al.*, *Phys. Rev. Materials* **4**, 114408 (2020).

[6] www.novomag.physics.iastate.edu/structure-database.

[7] 赤井久純, 日本物理学会誌 2016年 71巻 6号 p.377-381.

*本 ZOOM セミナーに参加されます場合には、事前に下記より登録を済ませてください。

<https://zoom.us/meeting/register/tJlqcO6trD4iGNX0XmoO-n3AeGCncuRax1bQ>



ご来聴を歓迎いたします。

連絡教員 齋藤 晋 (内線 2070)