

講演者：永井佑紀先生（国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 副主任研究員）

講演題目：「近似結晶に対する機械学習分子シミュレーションの現状と異常高温比熱解明への試み」

概要：準結晶及びその近似結晶における高温での異常格子比熱が報告されている。本研究では、Al-Pd-Ru 系準結晶とその近似結晶において高温での比熱の異常が第一原理計算レベルで再現されるかどうかを調べる。第一原理計算での比熱の評価は莫大な計算コストがかかるため、我々が開発した自己学習ハイブリッドモンテカルロ法(SLHMC)を用いて作成した高精度な機械学習ポテンシャルを用いて比熱を評価することとした。異常高温比熱は準結晶及び近似結晶の高次元性に起因するフェイズンフリップによって説明される。我々は、フェイズンフリップのような原子の移動が起きる温度領域では異常高温比熱が高くなることを発見した。現在、様々な近似結晶に対して物質依存性も含めて高温異常比熱を定性的に再現している。本講演では、機械学習分子シミュレーションと SLHMC 法の概要を説明するとともに、異常高温比熱解明の現状について説明する。特に、フェイズンフリップが異常高温比熱の直接的な証拠であることを確定する作業が難航しており、積極的な議論を歓迎する。