

2024 年度年次報告書

トランクスケールな理解で切り拓く革新的マテリアル

2024 年度採択研究代表者

高原 泉

東京大学 大学院工学系研究科

大学院生

マルチスケール物性相関性の深層学習による生成的材料設計

研究成果の概要

本研究の目標は、新規材料探索の効率化や深化に向けて、生成モデルを活用した材料設計手法(生成的材料設計手法)を開発することである。特に、従来手法の逆設計精度の低さや解釈性の低さなどの課題を克服することを目指す。本研究では、材料の機能物性が原子レベルの電子状態や化学結合状態と相關することに着目し、それらのミクロな電子構造の情報を生成的材料設計においてどのように活用できるかを探索する。

2024 年度においては、主に深層学習モデルの構築を行うためのデータの作成に取り組んだ。具体的には、炭素原子のみからなる結晶構造を含む 1 元系データセットや、より多様な結晶構造を含む多元系データセットの構築を目指して、第一原理計算に基づく電子構造計算を実行し、約 3 万構造について計算を終了した。また、生成モデルの開発にも取り組み、原子の部分状態密度を活用した生成モデルの構築に向けて予備的な知見を得た。さらに、解釈性の高い材料設計に向けて、大規模言語モデルと拡散モデル、物性予測モデルを組み合わせたフィードバック駆動型の材料生成フレームワークの開発にも取り組み、逆設計精度と解釈性の向上を確認した。今後は第一原理計算によるデータベースの拡充や生成モデルの開発を通じて生成手法の性能向上を図る。