

大場 史康

東京工業大学科学技術創成研究院
教授

データ駆動型材料探索に立脚した新規半導体・誘電体の加速的開拓

§ 1. 研究実施体制

(1)「材料探索」グループ

- ① 研究代表者:大場 史康 (東京工業大学科学技術創成研究院 教授)
- ② 研究項目
・計算科学・データ科学に立脚したインシリコスクリーニング

(2)「データ科学」グループ

- ① 主たる共同研究者:田村 亮 (物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 研究員)
- ② 研究項目
・材料探索のためのデータ科学手法の開発と応用

(3)「材料創製」グループ

- ① 主たる共同研究者:平松 秀典 (東京工業大学科学技術創成研究院 准教授)
- ② 研究項目
・有望物質の合成・物性評価・モデルデバイス化

(4)「太陽電池」グループ

- ① 主たる共同研究者:野瀬 嘉太郎 (京都大学工学研究科 准教授)
- ② 研究項目
・新規光吸収半導体の創製と太陽電池セル化

(5)「誘電体」グループ

① 主たる共同研究者:谷口 博基 (名古屋大学理学研究科 准教授)

② 研究項目

・新規誘電体材料の創製

§ 2. 研究実施の概要

本研究では、高精度・高速第一原理計算による演繹的アプローチと高信頼性データの機械学習による帰納的アプローチの統合により、信頼性の高い *in silico*(計算機中)ハイスループットスクリーニングを実現すること、そして高度な実験技術を基盤とした合成・評価・デバイス化とのインタープレイにより、新材料開発を加速することを構想している。(図 1)半導体と誘電体のケーススタディを通じて、これをデモンストレーションすることが本研究のねらいである。さらに、得られた大規模データに基づいて物質の再分類、材料設計・探索指針の再構築を行い、材料科学並びに材料研究・開発の発展に広く貢献することを目指す。

具体的なターゲットは、太陽電池光吸収半導体、電子デバイス高移動度半導体、高・低仕事関数透明導電体、大容量コンデンサ強誘電体、*high-k* ゲート絶縁膜誘電体とする。これらの応用において、更なる高性能化や用途多様化へのニーズを満たす既存の候補材料は極めて限定的である。本研究では、上述の *in silico*スクリーニングにより有望物質の選定を的確に行い、合成・評価・デバイス化実験へと展開し、そのフィードバックを受けることで、材料探索を効率的に進める。これにより、新材料の開拓によるブレークスルーを狙う。

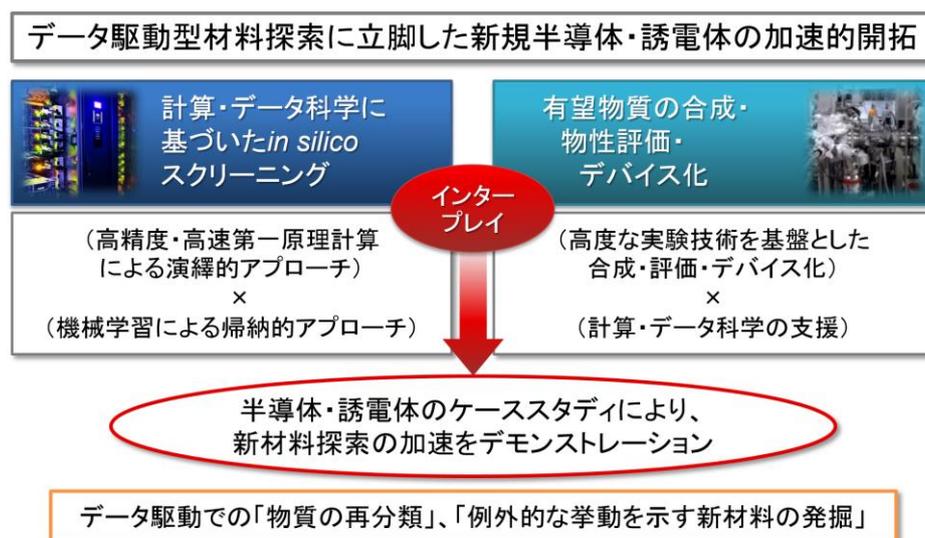


図 1. 本研究の構想

本年度は、計算・データ科学に立脚した半導体・誘電体の物性、安定性、格子欠陥特性の予測手法の開発を進めるとともに、計算・データ科学の支援によるバルク合成・製膜プロセスの効率化を目指した連携研究に着手した。最適な合成・製膜条件の予測のための第一原理計算に基づいた安定性の評価手法並びに機械学習による予測モデルの開発を進めるとともに、材料創製、太陽電池、誘電体グループの具体的なターゲットへの応用を検討した。また、既考察・探索の有望物質の合成手法・条件の検討を進めた。その成果の一例として、太陽電池グループが新規光吸収材料として着目している ZnSnP_2 とその類縁化合物のうち、 CdSnP_2 をリン化法により製膜する技術を確立するとともに、その成長メカニズムを明らかにした。(S. Nakatsuka *et al.*, *ACS Appl. Energy Mater.* 2018)