

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新
2017年度採択研究代表者

2019年度 実績報告書

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. 研究成果の概要

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。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。

本年度は、研究計画に従って、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と、計算・データ科学の支援によるバルク合成・成膜プロセスの効率化を目指した連携研究を継続した。とくに、最適な合成・成膜条件の予測手法の開発と応用を進めるとともに、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材料に関する合成・物性評価実験を行った。その結果、以下のような成果が得られた。

① 第一原理計算とその結果の機械学習による基礎物性、安定性、バンドアライメント等の予測手法の開発と応用を継続し、半導体・誘電体材料の *in silico* ハイスループットスクリーニングおよびデータベース構築へと展開した。

② 本プロジェクトにおいて開発を進めているアクティブラーニングに基づいた相図作成効率化手法に関して、実験研究者が容易に利用できるアプリケーションを開発した。図 1 に示すように、これを太陽電池グループと連携して薄膜成長条件の最適化に応用することで、その有効性をデモンストレーションした¹⁾。

③ 窒化物特有の化学状態・電子状態に着目して、その系統的な理解を目指して 37 種類の 2 元系窒化物の網羅的な合成と評価を行った結果、適切な窒化方法や出発原料の選択、大気不安定性、基礎物性に関する系統的な知見が得られた。

④ 新規リン化物光吸収材料 ZnSnP_2 を用いた太陽電池のデバイス構造最適化について、Cu 裏面電極と ZnSnP_2 光吸収層との間に Cu_3P を挿入することで、エネルギー変換効率を向上できることを見いだした。また、理論計算により予測された新規光吸収材料の合成に成功し、その基礎電子・光学物性を明らかにした。

⑤ 層状ペロブスカイト型の新規強誘電体 $\text{Li}_2\text{SrNb}_2\text{O}_7$ を発見し、その強誘電性の発現メカニズムを明らかにした²⁾。さらに、異種元素置換にも取り組み、置換系の相転移挙動を実験・理論の両面から考察するとともに、本物質系の誘電特性制御に関する知見を得た³⁾。

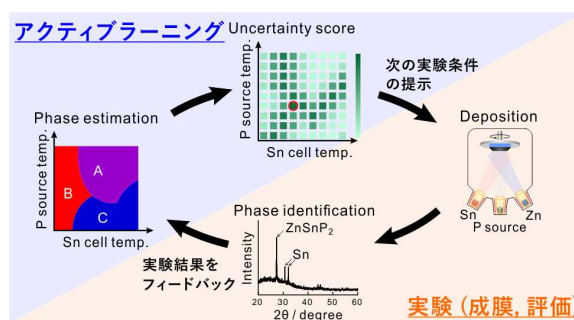


図 1. アクティブラーニングに基づいた薄膜成長条件の効率的な最適化

【代表的な原著論文】

1. Ryoji Katsube, Kei Terayama, Ryo Tamura, and Yoshitaro Nose, “Experimental Establishment of Phase Diagrams Guided by Uncertainty Sampling: An Application to the Deposition of Zn-Sn-P Films by Molecular Beam Epitaxy”, ACS Materials Letters, Vol. 2, No. 6, pp.571–575, 2020
2. Takayuki Nagai, Hirokazu Shirakuni, Akitoshi Nakano, Hiroshi Sawa, Hiroki Moriwake, Ichiro Terasaki, and Hiroki Taniguchi, “Weak Ferroelectricity in $n = 2$ Pseudo Ruddlesden-Popper-Type Niobate $\text{Li}_2\text{SrNb}_2\text{O}_7$ ”, Chemistry of Materials, Vol. 31, No. 16, pp.6257–6261, 2019
3. Takayuki Nagai, Yasuhide Mochizuki, Hirokazu Shirakuni, Akitoshi Nakano, Fumiyasu Oba, Ichiro Terasaki, and Hiroki Taniguchi, “Phase Transition from Weak Ferroelectricity to Incipient Ferroelectricity in $\text{Li}_2\text{Sr}(\text{Nb}_{1-x}\text{Ta}_x)_2\text{O}_7$ ”, Chemistry of Materials, Vol. 32, No. 2, pp.744–750, 2020

§ 2. 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 主任研究員）
- 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（京都大学大学院工学研究科 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（名古屋大学大学院理学研究科 准教授）
- ② 研究項目
 - ・新規誘電体材料の創製