

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

2020 年度 年次報告書
------------------

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・高速第一原理計算と機械学習の統合により信頼性の高いハイスループットスクリーニングを実現すること、合成・評価・デバイス化とのインタープレイにより、新たな半導体及び誘電体の開拓を加速することを構想している。本年度は研究計画に従って半導体・誘電体の物性予測手法の開発やバルク合成・成膜プロセスの効率化を目指した連携研究を継続するとともに、有望物質の絞り込みを進め、以下のような成果を得た。

酸化物を対象に基礎物性の系統的な第一原理計算データを生成するとともに、機械学習による予測モデルを構築した。また、窒化物及びリン化合物について高移動度半導体及び太陽電池光吸収半導体としての特性に関わる基礎物性を系統的に算出し、スクリーニングに活用した。本研究で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は、相律等、相図に関する規則を導入することで更なる効率化・高度化を進めた。また、より手軽に本手法が利用できるように、ウェブアプリケーションのプロトタイプを開発した。

実験グループを主体とした新規半導体の開拓に関しては、37種類の2元系窒化物の網羅的な合成と評価を行うことで得た系統的な知見を基に、新たな3元系窒化物半導体の研究を開始した。また、計算で予測したリン化合物半導体の合成を進めるなかで、類似の新規物質の合成にも成功し、光吸収半導体として適した物性を有することを明らかにした。誘電体の開拓に関しては、本研究において見出した新規層状ペロブスカイト型強誘電体の強誘電性発現機構解明に取り組み、組成制御・構造解析等の系統的な実験と第一原理計算による理論解析を駆使した連携研究によって、酸素八面体回転と二次ヤン・テラー効果が共存することを明らかにした。

## § 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

【代表的な原著論文情報】

[1] A. Takahashi, Y. Kumagai, J. Miyamoto, Y. Mochizuki, and F. Oba, “Machine learning models for predicting the dielectric constants of oxides based on high-throughput first-principles calculations”, *Physical Review Materials*, Vol. 4, No. 10, pp. 103801-1-13, 2020.

[2] H. J. Sung, Y. Mochizuki, and F. Oba, “Surface reconstruction and band alignment of nonmetallic A(II)B(IV)O<sub>3</sub> perovskites”, *Physical Review Materials*, Vol. 4, No. 4, pp. 044606-1-13, 2020.

[3] Y. Mochizuki, T. Nagai, H. Shirakuni, A. Nakano, F. Oba, I. Terasaki, and H. Taniguchi “Coexisting mechanisms for the ferroelectric phase transition in Li<sub>2</sub>SrNb<sub>2</sub>O<sub>7</sub>”, *Chem. Mater.* Vol. 33, No. 4, 1257-1264, 2021.