

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

2021 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、そして合成・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、計算・データ科学・実験グループが連携して有望物質の絞り込みを進めた結果、以下のような成果が得られた。

多様な半導体・誘電体候補物質を対象とした第一原理計算データベースを構築するとともに、計算データの機械学習により物性の予測モデルを構築した。また、機械学習に基づいた物性最適化や物質探索において、様々な獲得関数を用いることで目的設定に応じて最適化・探索を効率化するための手法を構築した。本研究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関作成効率化手法に関しては、更なる高度化を進めるとともに、公開を見据えたウェブアプリケーションを作成した。

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、大規模データの解析結果を踏まえて着目した 3 元系窒化物について、独自の 2 段階の処理で単相試料を得ることに成功した。また、3 元系亜鉛リン化合物についてバンドアライメントを明らかにすることで、デバイスシミュレータによるセル構造の検討が可能となった。誘電体に関しては、これまでに見出した擬 Ruddlesden-Popper 型新強誘電体における強誘電性のメカニズム解明に取り組んだ結果、2次 Jahn-Teller 効果と酸素八面体回転効果の競合が主要な役割を担ってい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 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) G. Deffrennes, K. Terayama, T. Abe, and R. Tamura, “A machine learning-based classification approach for phase diagram prediction”, Mater. Des., Vol. 215, pp.110497–1–9, 2022.
- 2) K. Terayama, K. Han, R. Katsube, I. Ohnuma, T. Abe, Y. Nose, and R. Tamura, “Acceleration of phase diagram construction by machine learning incorporating Gibbs’ phase rule”, Scr. Mater., Vol. 208, pp.114335–1–6, 2022.
- 3) A. Takahashi, Y. Kumagai, H. Aoki, R. Tamura, and F. Oba, “Adaptive sampling methods via machine learning for materials screening”, Sci. Tech. Adv. Mater.: Methods, Vol. 2, No. 1, pp.55–66, 2022.

- 4) T. Gake, Y. Kumagai, A. Takahashi, and F. Oba, “Point defects in p -type transparent conductive CuMO_2 ($M = \text{Al, Ga, In}$) from first principles”, *Phys. Rev. Mater.*, Vol. 5, No. 10, pp.104602-1-12, 2021
- 5) A. Nakano, H. Shirakuni, T. Nagai, Y. Mochizuki, F. Oba, H. Yokota, S. Kawaguchi, I. Terasaki, and H. Taniguchi, “Phase variation of ferroelectric $\text{Li}_2\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x(\text{Nb}_{1-x}\text{Ta}_x)_2\text{O}_7$ by selective reinforcement in the (Nb,Ta)-O covalent bonds”, *Phys. Rev. Mater.*, Vol. 6, No. 4, pp.044412-1-7, 2022.