

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2016年度採択研究者

2018年度 実績報告書

溝口 照康

東京大学生産技術研究所
教授

情報科学手法を利用した界面の構造機能相関の解明

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、界面における構造と機能の相関性を理解し、さらにその機能を決定づける因子・物理を明らかにすることを目的としている。界面の研究においては計算的手法と計測的手法の両方がこれまで利用されてきた。本研究でも「界面」に注目し、計算と計測の両手法に対して情報科学手法を活用した研究を進める。まず、計算に関して、界面固有の構造理論計算により高速に決定する手法を開発するとともに、同手法により構築された界面構造データベースを活用し、同データベースの界面構造の物性も系統的に計算する。また、計測に関しては界面から取得されるスペクトルを高速かつ高精度に計算する手法の開発と、スペクトルから物性を直接決定する手法の開発を行う。

3年目となる 2018 年度においては、1)機械学習による構造機能相関の解明と、2)界面スペクトル解析のための手法開発を実施した。各項目の研究成果として、1)界面における空孔偏析挙動と局所構造との相関性の解明、2)スペクトル解釈および物性予測法の開発を得ることができた。

§ 2. 研究実施体制

- ① 研究者:溝口 照康(東京大学生産技術研究所 教授)
- ② 研究項目
 - 1)界面固有の構造に関する説明変数のデータベース構築
 - 2)界面固有の物性に関する目的変数のデータベース構築
 - 3)機械学習による構造機能相関の解明
 - 4)界面スペクトル解析のための手法開発