

第一原理計算・インフォマティクス主導型新物質開拓

大久保勇男（物質・材料研究機構, 機能性材料研究拠点, 主任研究員）

（H29-H32年度）

研究領域「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」
（研究総括：常行真司、H27年度発足）

研究の概要

第一原理計算・インフォマティクスによる「物質設計・物質選択」と、合成パラメータの最適化に機械学習を用いた高効率合成技術を組み合わせて、「未開拓物質群」の新物質開拓を目指した研究を展開しました。第一原理計算とインフォマティクスは、合成と結晶構造の報告はあるものの、物性が未解明な「未開拓物質」の物性予測に効果的です。特に、特異な物性の発現が期待されている「層状窒化物」に着目しています。この層状窒化物は、合成と結晶構造に関してのみ報告されており、物性が未解明な「未開拓物質群」の1つです。この層状窒化物の新物質開拓の研究に、「第一原理計算」・「インフォマティクス」・「機械学習」を導入しました。

研究の成果

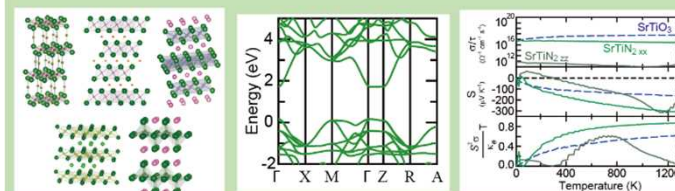
本研究では特に、第一原理計算で選定した候補物質の合成装置の開発と、機械学習を用いた高効率薄膜合成実験の手法の開発を行いました。本研究で得られた研究結果を下記に列挙します。

- ・ 第一原理計算による種々の「層状窒化物」の電子状態・物性予測。
- ・ 候補物質を合成するための新しい薄膜作製手法である新しいタイプの分子線エピタキシー装置の開発。
- ・ 薄膜合成実験に機会学習を取り入れた、高効率薄膜合成実験手法の開発。

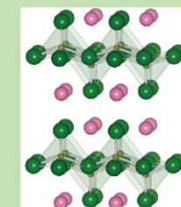
参考文献・リンク

- [1] I. Ohkubo and T. Mori, *APL Mater.* 4, 104808-1~104808-5 (2016).
- [2] I. Ohkubo and T. Mori, *J. Phys. Soc. Jpn.* 86, 074705-1~074705-7 (2017).
- [3] https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohkubo_isao?locale=ja

第一原理計算・インフォマティクス



合成候補物質の
スクリーニング
と選定



新物質合成

機械学習を用いた
合成パラメータ
の高速最適化

