



大場・熊谷研究室

計算科学とマテリアルズインフォマティクスに 立脚した新材料開拓

フロンティア材料研究所

<http://www.msl.titech.ac.jp/~oba/>

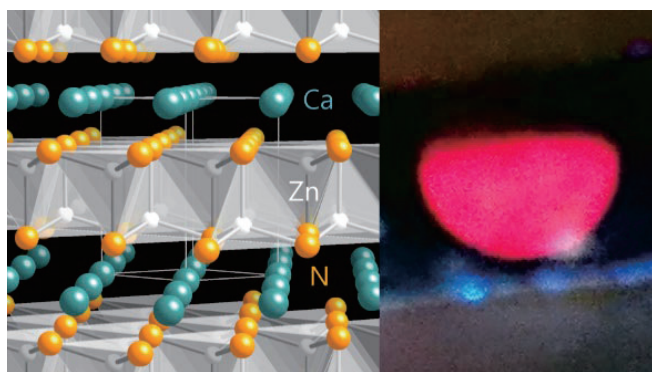
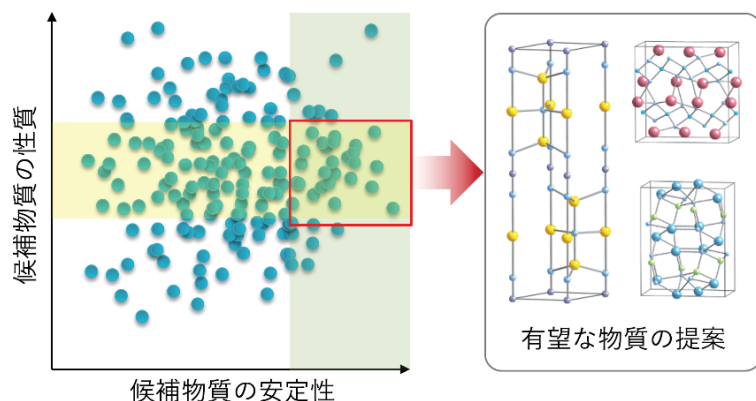
- ・スーパーコンピュータを用いた電子材料の設計と探索
- ・先進計算科学手法を駆使した材料の探究
- ・マテリアルズインフォマティクスによる新材料開拓の加速

昨今の計算科学の進展とスーパーコンピュータの演算能力の向上は目覚ましく、量子力学に基づく第一原理計算により既知の材料を深く理解するだけでなく、全く新しい材料の存在やその機能を高い信頼性で予測することも可能になってきました。当研究室の狙いは、このような「計算材料科学」に立脚して材料を探究すること、そして、これまでにない高機能材料を見出すことです。さらに、計算材料科学とデータ科学を密接に連携させた「マテリアルズインフォマティクス」により、新材料の開拓を加速することを目指しています。



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

- ・膨大な計算データを生成し、蓄積するための手法開発と機械学習による物性予測モデルの構築
- ・有望な物質を効率的・自動的に選び出すハイスループットスクリーニング技術の開発



コンピュータ中でのハイスループットスクリーニングによる新物質探索

- ・第一原理計算や機械学習による予測モデルを用いて候補物質の様々な特性と安定性を評価
- ・特性と安定性の両観点から有望物質を選出し、実験グループに提案することで、新物質探索を加速

コンピュータシミュレーションによる新規半導体の開発の具体例

- ・希少元素を含まず、赤色発光を示す新しい窒化物半導体CaZn₂N₂が存在することを計算により予測
- ・高圧合成・光学物性評価実験により実証（細野・平松研究室）

Hinuma et al., Nat. Commun. 7, 11962 (2016).