

2019年第66回応用物理学会春季学術講演会  
機能性酸化物研究会企画シンポジウム開催報告

「計算機による物性予測と酸化物機能の開拓」

世話人：上野和紀（東京大）、中川原修（村田製作所）、田中秀和（大阪大）、島久（産総研）、  
組頭広志（東北大）、松野丈夫（大阪大）、木下健太郎（東理大）、高橋竜太（東京大）

酸化物材料は透明導電体から熱電材料を含む半導体材料、それにイオン導電体やリチウム電池などの電極材料まで様々な分野で多様に応用されている。これらの新物質は従来、研究者の勘や経験則に頼って開発されてきた。それに対し、最近の計算機科学の進展により第一原理計算に基づいた計算が誰でも簡単にできるようになってきた。さらに、こうした計算に基づきシミュレーションやベイズ最適化、深層学習など様々な手法を駆使することで電気物性や熱物性などを予測し、物質設計を行うことが現実のものになりつつある。実際、日本ではそれほどではないものの、最近の物質科学の論文では実験結果に物性予測を組み合わせた議論が当たり前のようになりつつある。本シンポジウムは計算機による物性予測にそれほど親しみのない実験家を主たる対象とし、物性予測の基本的な手法の紹介から具体的に研究の中で取り入れていく応用までを紹介することを目的とした。前半では物性計算の計算手法を最前線で研究している物性理論の専門家から、どのような物性がどこまで計算できるのかを紹介していただいた。後半ではまず、若手の実験家が行う比較的小規模なプロジェクトの中でバンド計算や物性計算を取り入れた研究を紹介していただいた。その後、後半は企業やベテランの研究者に、より大きな視点からの研究を紹介していただいた。

最初に小口多美夫先生（大阪大学産業科学研究所）に「第一原理計算と機械学習」と題してバンド計算の歴史から世界的な物質科学でのデータベース公開の進捗状況、さらに機械学習についてご講演いただいた。特に大きなデータベースとして、仮想物質を含めて様々な物質の物性を自動計算して公開する materials project (<https://materialsproject.org/>) と、研究者自身が物質のデータを登録していく NOMAD (<https://nomad-coe.eu/>) が紹介された。また、最近の研究として物質の組成式から結晶構造の推定する手法について紹介された。

続いて是常隆先生（東北大学）からは「第一原理計算によるトポロジカル物性予測」と題し、磁性体や反磁性体、トポロジカル絶縁体などでの物性予測について紹介された。異常ホール伝導度や異常ネルンスト係数などの新しい物性量が物質のバンド構造のトポロジーと密接な関係があり、ベリー曲率から計算可能であることが紹介された。また、これらの物性量の機械学習の研究と、MAGNDATA などいくつかのデータベースが紹介された。

続いて熊谷悠先生（京都大学）からは「酸化物物性の系統的計算」と題して酸化物の中に不可避に含まれ、多様な物性変化をもたらす欠陥の研究について紹介された。特に数万個の桁の物質について欠陥の作る物性量を自動で算出する非常に大規模なシステムの構築やデータベースの最適化など実用的な側面について紹介された。また、研究の例として、非

常に多くの物質で機械学習により誘電率の良い物性値を算出できることを述べられた。

次に後半のセッションでは実験家による研究紹介として、まず平松秀典先生（東京工業大学）から「新半導体物質の探索研究における実験現場での計算科学の活用」と題し、研究者がデスクトップの計算機を用いて第一原理計算を行い、半導体の新物質探索を行ってきた研究について紹介された。BaSiO<sub>3</sub> では候補物質を研究者の勘で絞ったうえでバンド計算により半導体の候補物質となるシリコン系ペロブスカイトを発見されたこと、SrHfS<sub>3</sub> でも同様に発光材料の候補となる直接遷移型半導体を発見されたことを紹介した。

続いて塩見淳一郎先生（東京大学）からは「ナノ界面構造のフォノン輸送物性の予測」と題し、熱伝導率の物性予測と機械学習による最適化について研究紹介がされた。バンド計算とボルツマン方程式を組み合わせて精度の良い熱伝導率計算が実現しつつあること、またベイズ最適化による構造最適化により薄膜超格子における、一見ランダムに見える構造で非常に低い熱伝導度が得られることが紹介された。

続いて企業での研究例として、檜貝信一氏（村田製作所）から「産業分野における計算科学技術を駆使した酸化物材料の機能物性の理解、予測、設計」と題し、実用に非常に近い分野での研究が紹介された。積層コンデンサで使われるセラミクス微粒子の物性や電気化学的な疑似容量を用いたコンデンサ、全固体電池でのイオンの動きなど様々な分野について分子動力学法などを用いた物性の研究が紹介された。

最後に後藤真宏先生（物質材料研究機構）により「マテリアルズインフォマティクスに基づく物質合成」と題し、非常に多くの物質を高速に作成・評価が可能なコンビナトリアルスパッタを用いた新物質開発の研究の紹介がされた。さらに、機械学習による新物質開発の例として非常に低熱伝導度の界面をデータベースをもとに予測し、実験的に実現した研究が紹介された。シンポジウムの聴講者数は120名から150名に及び、しばしば立ち見が出るほど盛況であった。

本シンポジウムを通して、計算機による物性予測が容易に手が届く手法であり、今では機械学習なども用いて非常に広い範囲の物性が予測できるようになっている現状を共有できたと考えている。最後に、シンポジウムで講演をしていただいた先生方、活発な議論をしていただいた聴衆の皆様、ご支援いただいた事務局の皆様に深く感謝いたします。

