

マテリアルズ・インフォマティクスの現状と将来展望

シミュレーションとデータ科学による これからの物質・材料研究

常行真司（東京大学）

Shinji TSUNEYUKI, The University of Tokyo
計算物質科学イニシアティブ(CMSI) 統括責任者



原子・電子の基礎方程式

◆電子状態方程式

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r, t) \right] \varphi_i(r, t) = \varepsilon_i(t) \varphi_i(r, t)$$

The Nobel Prize in
Chemistry 1998



Walter Kohn

John A. Pople

The Nobel Prize in
Chemistry 2013



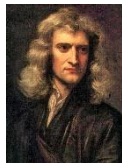
Martin Karplus

Michael Levitt

Arieh Warshel

◆原子の運動方程式

$$M \frac{d^2}{dt^2} R(t) = -\nabla E(R(t))$$

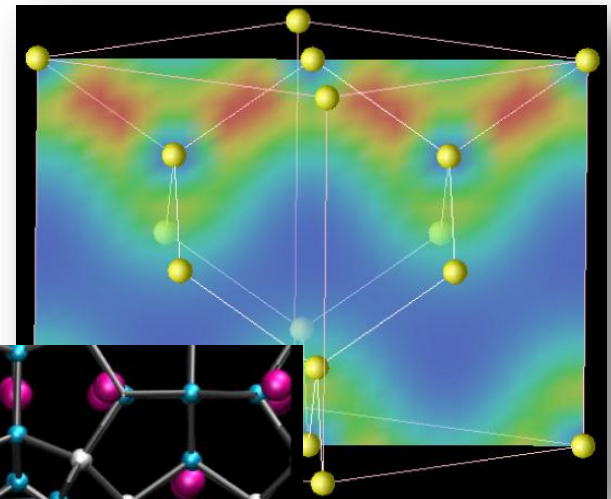


portrait of Newton
by Sir Godfrey Kneller

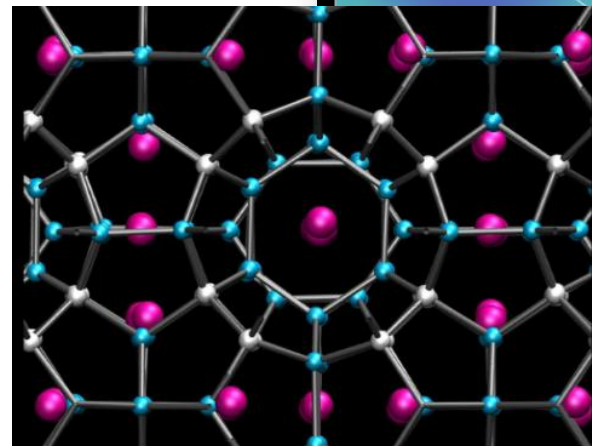
<http://www.newton.cam.ac.uk/art/portrait.html>



物質構造, 電子密度分布
電子状態, 電気的・磁氣的・
光学的性質, 弾性,
熱力学特性などの物性



Si



クラスレート

計算科学は実用材料研究に貢献できるか？

- 物質，材料を「見る」ことによる「気づき」
- アイデアを試す 仮想実験
- 新物質，新材料の特性予測
- 新構造デバイスの特性予測
- 多自由度，マルチスケール，非平衡の壁
- 演繹的な計算機シミュレーションだけでは，欲しい特性をもった新物質，新材料の発見は，困難

- 基礎方程式が不明のとき，入力 X と出力 Y の組からなる多数のデータを使って，帰納的に X, Y の関係を見いだす

$$Y = f(X) + \varepsilon \leftarrow \text{エラー}$$

- 入力パラメータ $X = (X_1, X_2, X_3, \dots)$ の中から，出力を左右する主要なパラメータを決定する
 - （例）TV，ダイレクトメール，新聞広告などのメディアから，効果的なメディアや宣伝費の最適な配分を決める。
 - （例）建物面積，公共施設からの距離，地域の犯罪発生率などから，不動産の適正販売価格を決定する。
 - （例）過去の病歴や遺伝体質から薬の副作用を予測し，安全な薬を選択する。
 - （例）劣化した画像データから，もとの画像を復元する。

物理法則は必ずしも必要ではない

マテリアルズ・インフォマティクス

「**データ科学**、**計算科学**と物質・材料の物理的・化学的性質に関する多様で膨大なデータとを駆使して、物質・材料科学の諸問題を解明するための科学技術的手法」

出典(一部文言修正):

JST 研究開発戦略センター

戦略プロポーザル「データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進(マテリアルズ・インフォマティクス)」

CRDS-FY2013-SP-01

マテリアルズ・インフォマティクスへの期待

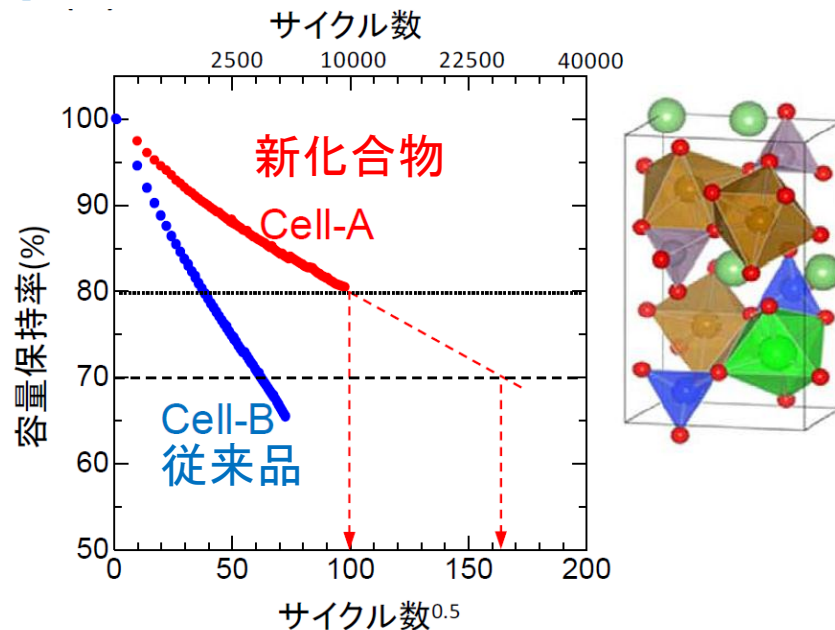
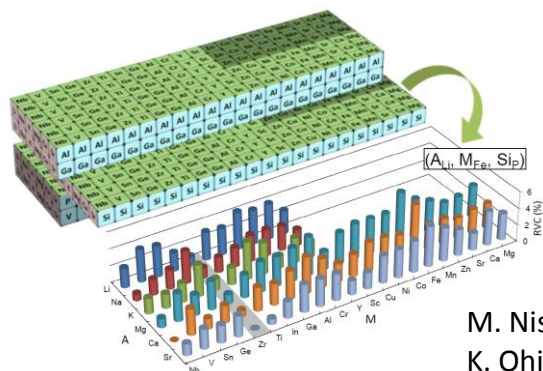
1. 欲しい機能を実現する新物質・新材料の探索
2. 物質構造と物性の直観的説明
 - ✓ 多種多様な物質データを包括的に整理・記述・可視化する新しい物理的概念の発見
 - ✓ 新物質・新材料の設計指針の構築
3. シミュレーションの壁(多自由度, マルチスケール, 非平衡)を超える高精度モデリングと非平衡プロセスへの挑戦
4. データ同化を用いた材料構造解析

1. 新物質・新材料の探索

例：リチウムイオン二次電池の正極材料の開発

京都大学(田中功, 田中勝久、藤田晃司らのグループ)、シャープ株式会社研究開発本部(西島主明らのグループ)による共同研究

- ✓ リチウム鉄リン酸塩 LiFePO_4 に固溶させる元素の数千種類の組み合わせに対して第一原理計算
- ✓ 充放電による結晶体積変化がサイクル寿命の決定因子になるというアイデアに基づき、**ハイスループット・スクリーニング**
- ✓ 計算により物質設計された化合物(6種の元素を含む)を、新合成手法で合成に成功
- ✓ 電池寿命が従来品の6倍に向上



(左) LiFePO_4 の原子の一部を他の元素で置換した場合の体積変化の計算結果の一例。上部の長方体の各面に記載されている原子は、Liの置換元素(赤)、Feの置換元素(緑)、Pの置換元素(水色)を示している

2. 物質構造と物性の直観的説明

- イオン半径 (1920年代)
 - Victor Moritz Goldschmidt
 - Linus Carl Pauling
 - イオン結晶, 鉱物の構造データの整理



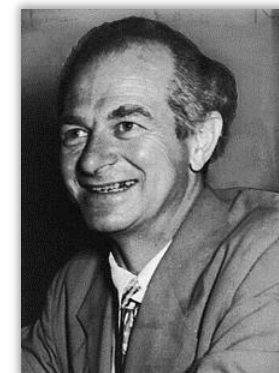
- 電気陰性度 (1930年代)
 - Linus Carl Pauling

$$\Delta E(A - B) = E(A - B) - \frac{1}{2}\{E(A - A) + E(B - B)\}$$

$$\Delta E(A - B) = K(\chi_P^A - \chi_P^B)^2$$

- Robert Sanderson Mulliken

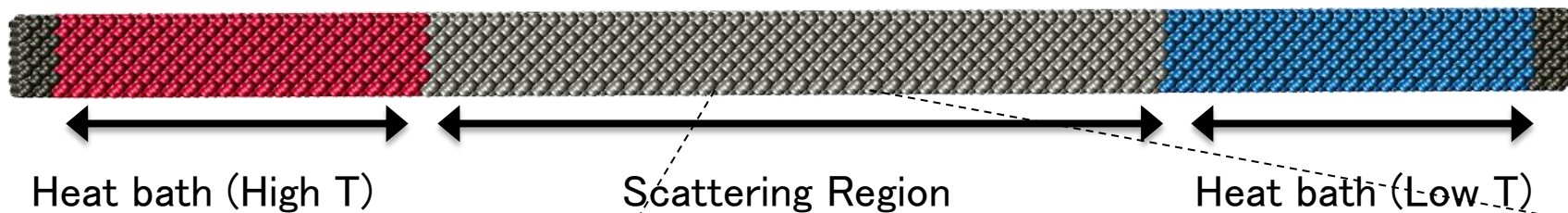
$$\chi_M^A = \frac{1}{2}(I_A + E_A)$$



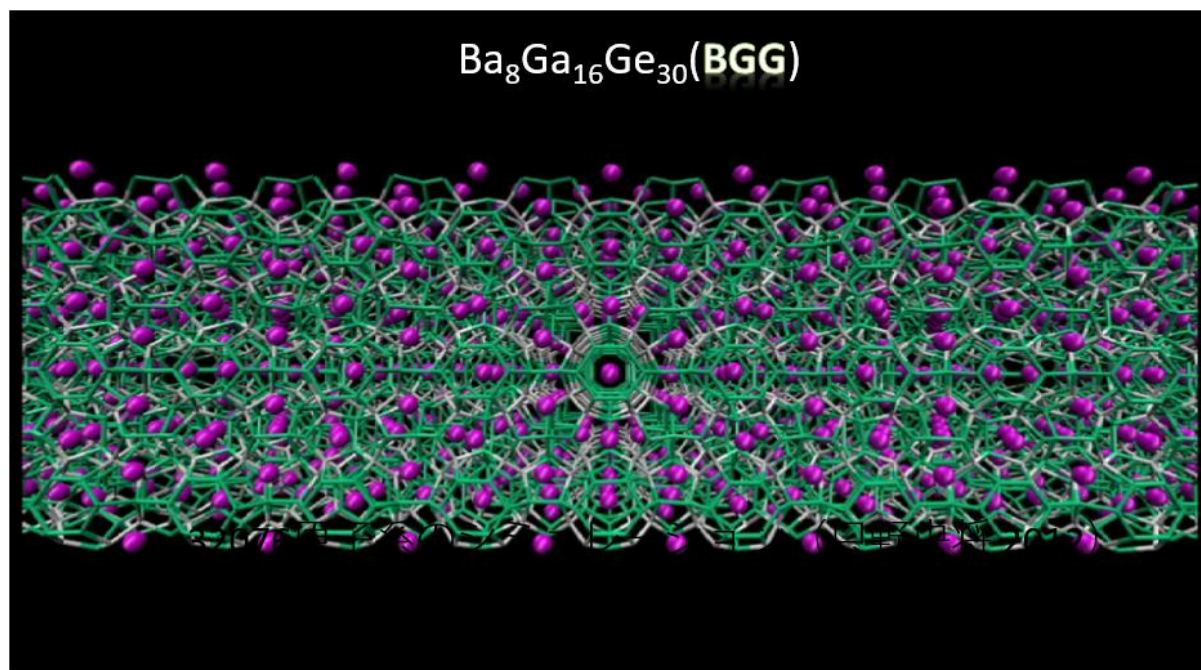
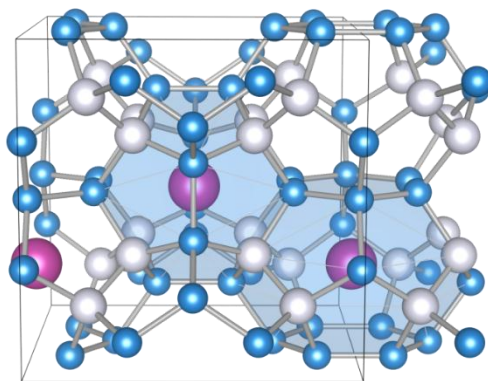
(Wikipediaより)

3. 高精度モデリングと非平衡プロセスへの挑戦

Type-I Clathrate: $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ (BGG)の熱伝導シミュレーション



$$\kappa = -j / \left(\frac{dT}{dz} \right)$$



First-Principles-based MD simulation of 32076 atoms

4. データ同化を用いた材料構造解析

現在の構造解析手法と問題点

- リートベルト法
 - 結晶のみ
 - 良い初期配置が必要
- 逆モンテカルロ法(RMC)
 - ガラス、アモルファス、液体
 - 結合角など局所構造に問題も
- 第一原理MD
 - 自由度が多いと探索困難
 - 緩和が不十分

図： 小原真司、鈴木賢太郎、竹内謙、
放射光 Vol.18, No.6, 341 (2005)より転載.

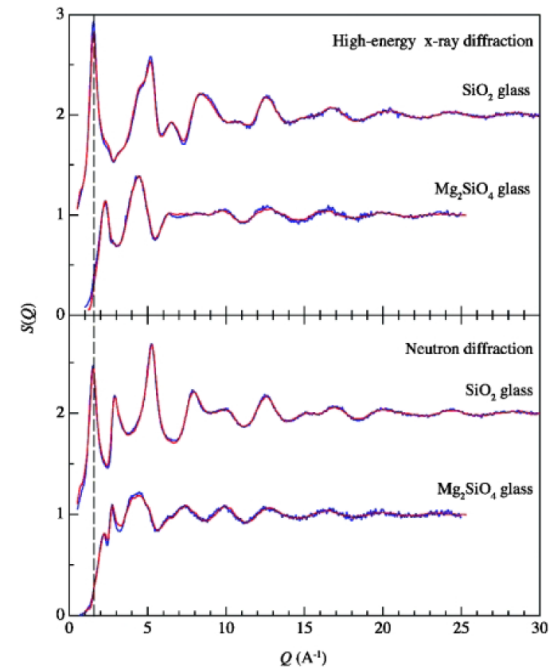


Fig. 2 The structure factors $S(Q)$ of SiO_2 glass⁸⁾ and Mg_2SiO_4 glass⁶⁾. Blue: experimental data, red: RMC model. SiO_2 glass data are displaced upward by one unit for ease of viewing.

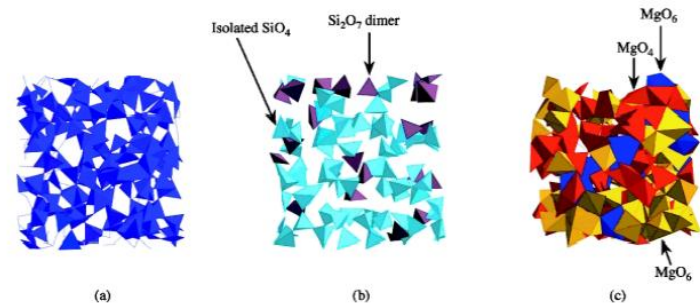


Fig. 5 The 3-dimensional configurations obtained from the RMC model. (a) SiO_2 glass⁸⁾. Each oxygen atom connects together with Si atoms at the corner of SiO_4 tetrahedra. (b) SiO_4 tetrahedra in Mg_2SiO_4 glass⁶⁾. About 33% of the tetrahedra are unconnected each other (purple). The remaining SiO_4 units form dimers (Si_2O_7) by shared oxygen atom (light blue). (c) MgO_x polyhedra; red, $x=4$; yellow, $x=5$; blue, $x=6$. The majority are distorted MgO_3 units.

そのほかMIに期待すること

- 多自由度最適化(構造探査, 組成最適化, モデリング)のブレークスルー
 - 進化的アルゴリズム
 - 粒子群最適化(Particle Swarm Optimization)
 - マルチカノニカル法, レプリカ交換法
 - 古典/量子アニーリング
 - 各種局所探査手法
 - それらの最適な組み合わせ
- データ同化による材料のメゾスケールモデリング
- センサー技術との組み合わせによる結晶成長条件の最適化, 絶縁破壊や疲労破壊の研究進展



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

東京大学大学院理学系研究科 教授

領域アドバイザー

- 青柳岳司 旭化成株式会社 研究・開発本部 基盤技術研究所 特級高度専門職
伊藤 聡 理研 計算科学研究機構 コーディネーター
射場英紀 トヨタ自動車(株)電池研究部 部長
小谷元子 東北大学大学院理学研究科 教授
佐藤寛子 国立情報学研究所 教授
田中 功 京都大学大学院工学研究科 教授
知京豊裕 物質・材料研究機構 MANAナノエレクトロニクス材料ユニット ユニット長
津田宏治 東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授
寺倉清之 物質・材料研究機構 フェロー
中井浩巳 早稲田大学理工学術院 教授
樋口知之 統計数理研究所 所長

(敬称略)

求められる研究

1. 新物質発見の促進、設計指針の構築
2. 大規模データからの相関・法則の帰納的解明
3. 候補物質の高速・大量スクリーニング
4. 物質・材料データの包括的記述
5. データ取得・蓄積・管理手法、計算・解析ツール

必ずしも上記に限定されることはありません。

従来の物質・材料開発に大きなインパクトをもたらす、挑戦的な研究を期待しています。

連携提案について

本研究領域では、単独では難しい異分野融合的な提案が可能になることを期待して、さきがけ研究者として進める「**個人研究**」と、「**提案者同士の共同研究**」を含めた**連携提案**をすることができます。
この場合は、両者が「対等」かつ「さきがけ研究者として相応しい提案」をすることが求められます。

それぞれ個別にさきがけに応募するが、提案書にはコラボレーション内容を含める

情報分野
研究者

物理分野
研究者

