

## 研究分野

Department

ナノ機能予測  
Theoretical Nanotechnology

## 研究者

Researcher

白井光雲 舛田浩義  
K. Shirai H. Momida

## キーワード

Keyword

機械学習、物質探索、物質設計、物性最適化、構造予測  
Machine learning, Materials exploration, Materials design, Property optimization, Structure prediction

## 応用分野

Application

材料の結晶構造探索、固体物性の解析  
Theoretical analysis and prediction for material properties

## 研究開発段階

基礎

実用化準備

応用化

## 背景

実験・理論・計算・データサイエンスの手法を組み合わせることによって、望ましい機能をもつ新物質開発の効率化が求められています。

## 概要・特徴

機械学習の手法を用いて、与えられた元素組成から安定な結晶構造を予測するツールや物質機能の特徴付けを記述子を同定するツールの開発を行っています。

## 技術内容

- 計算科学手法による結晶構造探索：与えられた元素組成に対して、構造生成手法と構造最適化計算を組み合わせることで安定な結晶構造の理論予測を行います。ベイズ最適化の手法を用いることで高効率な探索が可能です。
- 線型独立記述子生成法：物性と強い相関をもつ記述子（説明変数）を生成することにより、効率的な物性予測・材料設計を行うことが可能です。

## CrySPY

## ▶ 結晶構造探索ツール

<https://tomoki-yamashita.github.io/index.html>

## LIDG

## ▶ 線型独立記述子生成ツール

<https://github.com/Hitoshi-FUJII/LIDG>

## 社会への影響・期待される効果

新材料設計のためのデータサイエンス手法の開発・公開を進めています。材料の安定結晶構造および物性を理論予測する研究を行っています。磁石材料の探索や電池材料の開発など、効率的な材料開発への応用展開が期待されます。

## 【論文 Paper】

- [1] Electrochimica Acta 195, 1 (2016). [4] npj Computational Materials 4, 32 (2018).  
 [2] Phys. Rev. Materials 2, 013803 (2018). [5] Sci. Tech. Adv. Mater. 20, 1178 (2019).  
 [3] Appl. Phys. Express 11, 041201 (2018).

