

研究領域  
研究題目

③ 付加価値の高い素材の供給基地形成のための研究  
計算機科学を援用した機能性材料探索を可能にする  
新規物質創生の為の基盤研究

研究グループメンバー

宮崎 正範    しくみ解明系領域    助教    (代表)

桃野 直樹    しくみ解明系領域    教授

「北海道MONOづくりビジョン2060」を具体化する研究概要

背景と物質科学における潮流

2011年6月、米国オバマ大統領(当時)は、物質科学とデータサイエンス(ビックデータ)を融合させ、これまでの2倍の速さで**新しい物質・材料**を発見し展開させ、産業に発展させる“**マテリアル・ゲノム・イニシアチブ**”を提唱。**マテリアルズ・インフォマティクス**が注目されるきっかけとなる。

計算機科学を用いた研究

- 計算機科学(情報+理論計算)を融合させた高度な理論解析
- 第1原理計算等を用いた物性の理論予測 (unknow 物性の発見)
- 機械学習、AIを用いた物質探索

これまで報告されている事例(一例):

- ・ 水素の液化, 磁気冷凍材料の探索 (NIMS)  
...実験データ1600物質から性能予測 HoH<sub>2</sub>
- ・ 鉛フリーペロブスカイト型太陽電池 (理研)  
...第1原理計算11025個→51個の候補物質を予測

社会的要請 (環境・社会的情勢の変化)

(例) 2050年カーボンニュートラルに伴うグリーン成長戦略

関連する分野

物質科学での研究対象

自動車等の電化    パワー半導体 (高耐電圧、高周波数、低損失)

発電    太陽電池    →半導体中のバンドギャップ、輸送特性

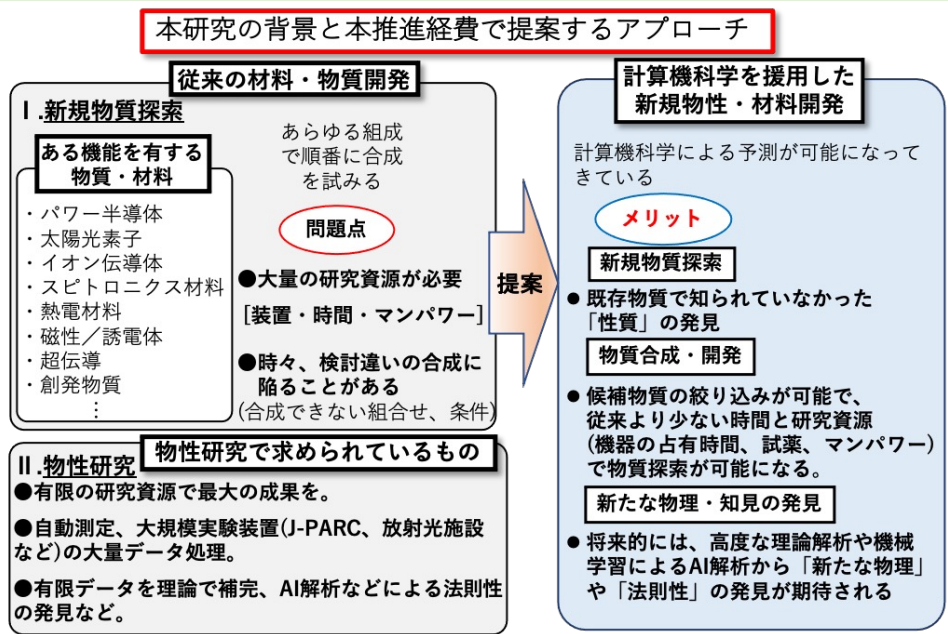
水素関連物質    光触媒    →物質中における水素準位

水素貯蔵物質    →物質中の水素位置、拡散速度

液化    →磁気冷凍材料

その他: 環境非汚染材料 (ex. 鉛フリー)、貴金属元素の低減  
新技術デバイスの開発 (ex. スピトロニクスデバイス)

これまで物質科学分野では、  
物質の基礎的物理特性や物理現象のメカニズムを明らかにし、  
工学分野にフィードバックすることで、物質・材料開発に貢献



本推進経費で目指すビジョン

計算機科学を用いた物質科学研究の基盤を作る!

