

情報科学的手法の物質科学への応用

(九大総理工) 辻 雄太

Application of Informatics Methods to Material Science (*Faculty of Engineering Sciences, Kyushu University*) ○Yuta Tsuji

Trial-and-error experimental methods based on experience and intuition have played a central role in materials development in the chemical field. It has taken a long time and at great cost to discover new materials and put them into practical use. Recently, Materials Informatics, a data-driven science that derives desired structures and candidate materials based on accumulated data and information, has become increasingly important. In this talk, the speaker will introduce topics related to the application of informatics methods to materials science, which he has been working on. Particularly, some of his research results will be introduced, focusing on the search for functional materials by swarm intelligence and the application of graph theory to materials science.

Keywords : *Information Science; Mathematical Science; Computational Science; Mathematical Chemistry*

化学分野の材料開発では、経験と勘に基づく試行錯誤の実験手法が中心的な役割を担ってきた。新しい材料を発見し、実用化するためには、長い時間と多大なコストが必要であった。最近では、蓄積されたデータや情報をもとに、目的の構造や材料候補を導き出すデータ駆動型の科学マテリアルズ・インフォマティクス的重要性が高まっている。本講演では、講演者がこれまで取り組んできた情報科学的手法の物質科学への応用に関する話題を紹介する。特に、群知能による機能性物質材料探索およびグラフ理論の物質科学への応用に焦点を当て、研究成果の一部を紹介する。

本講演の前半では、群知能の一種である粒子群最適化法と密度汎関数計算を用いた手法によるナノクラスター触媒の探索についての研究の成果を紹介する¹⁾。メタンの直接変換のための触媒として、Fe、Co、Ni、Cu、Znのナノクラスターに着目し、それらの金属ナノクラスターが吸着種として安定化する C₁ フラグメント (CH₄、CH₃、CH₂、CH、C) の種類が、金属種によってどのように変化するかを網羅的に検討した結果を紹介する。

本講演の後半では、グラフ理論の物質科学への応用について紹介する²⁾。点とそれを結ぶ線で表される物体をグラフと呼び、グラフの性質を解析する数学の一分野がグラフ理論である。グラフは、道路や電気回路などにも見られ、その応用範囲は広い。物質も原子と結合からなるグラフとみなせるので、グラフ理論の対象である。本講演では、グラフ理論の概念である中心性をキーワードとして、分子軌道理論とグラフ理論の橋渡しをする。さらに、それらの関係性を利用することで、物性予測、特に金属クラスターの束縛エネルギー（結合エネルギー）の予測が可能であることを示す。

1) Hori, M.; Tsuji, Y.; Yoshizawa, K. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 14004-14015.

2) Tsuji, Y.; Yoshizawa, K. *ACS Omega* **2021**, *6*, 1339-1351.