第一原理的な”デバイス機能”の理論予測とその材料設計への応用
～非平衡輸送特性を中心に～

First principles theoretical prediction of device function and its application to the material design ― Some examples of non-equilibrium transport properties ―

浅井 美博（産総研 機能材料コンピュレーショナルデザイン研究センター）

Yoshihiro Asai (CD-FMat / AIST)

E-mail: yo-asai@aist.go.jp

表題中の「(計算）材料設計」は以前から標榜されてきた言葉・概念であり、いささか新鮮味に欠ける印象を持たれるかもしれないが、最近の機械学習・深層学習などの人工知能関連技術の進展に伴い事情は大きく変化しつつある。人工知能関連技術を用いて機能からそれを与える材料を予測する「逆問題」を原理的には解ける見込みがでてきた為である。物質・材料分野では、材料が与えられた時に計算シミュレーションを用いてその物性・機能を予測する「順問題」解法がそれなりに発達しており、計算シミュレーションで得られる「順問題」解を用いて機能→材料の「逆問題」予測を行える可能性が高まっている。実験データベースが充分には期待できないナノ構造・非平衡材料等や、良く制御された条件での実験が難しい多くに機能材料の場合には、この方向の研究は大変重要になってくるであろう。「順問題」研究の発達が充分ではない医薬・バイオとは事情が大きく異なる。

そうはいいつつも、合金等の熱力学的性質の第一原理計算を用いた予測等の例を除き、物質・材料系でも機能・物性を直接かつ精密に予測出来る例は未だ限られている。現状のマテリアルズ・インフォマテイクス研究ではその代わりに、機能・物性と相関の強い他の計算予測が容易な量をその指標として代用した上で、その「順問題」を多数解いた結果を「学習」する事により、所望の物性・機能を有する未知の材料を予測するといった「逆問題」が解かれている。例えば、熱電性能の優劣を表すためにバンドギャップを指標とし、従来の第一原理計算を用いた高性能熱電材料の探索マイニングが試みられている。

合金系の熱力学特性以外に計算シミュレーションで得られたデータを実験データ代わりのように用いて材料データマイニングを行える例はないのであろうか？本講演ではナノエレクトロニクス分野で台頭しつつある非平衡グリンーン関数法（Non-equilibrium Green Function: NEGF）に基づく第一原理デバイスシミュレーションを例に挙げ、機能記述を強化したマルチスケール計算シミュレーションとインフォマテイクス技術の協働による新たな材料探索スキーム（材料データマイニングスキーム）とその可能性[1]について議論する。

文献）

1. http://www.aist.go.jp/aist_j/news/announce/pr20151101.html

© 2016年 応用物理学会