

**マテリアルズ・インフォマティクスによる
新規光学材料設計・開発の高速化・高度化**
**Faster and Sophisticated Design and Development of
New Photonic Crystals based on Materials Informatics**

東北大未来科学 °川添良幸

Niche, Tohoku Univ. °Yoshiyuki Kawazoe

E-mail: kawazoe@imr.edu

人工知能を活用し、従来の理論設計では困難な新規材料設計・開発を可能とする手法（マテリアルズ・インフォマティクス、MI）が注目されている。我々は、独自開発の全電子混合基底第一原理計算法 TOMBO (Tohoku Mixed-Basis Orbitals *ab initio* simulation package)により、イオン化ポテンシャル、電子親和力、バンドギャップ値の絶対値算定を可能とした。この技法により、MI による新規光学材料設計・開発を行い、実験家に信頼性高く新規材料候補を提案出来る様になった。

密度汎関数理論 DFT によって膨大な数の数値計算を行ってデータベースを構築し、それに基づく MI による新規材料設計が盛んに行われている。半導体のバンドギャップ値に関する数値計算が主体であるが、残念なことに LDA+U や hybrid Exc 等の実験値に合わせるためのパラメータを含む現象論が横行している（DFT は基底状態の理論であり、本来、バンドギャップ値を求めることが出来ない）。これらの計算法では、実験的に知られている、ないしはその近辺の材料のバンドギャップ値の現象論的再現が行われるだけで、従来とは本質的に異なる全くの新規材料に対する信頼性は低い。我々は、実験に依存せずに新規材料を設計するため、各種物理量の絶対値算定を可能とする新規方策である TOMBO を活用し、この問題の抜本的解決を図る。特に、多体効果を取り込んだ GW 近似により、バンドギャップ値の絶対値算定を可能としている。GW 近似は計算量が膨大であるが、実験的に知られていない材料を対象に出来る。

幾ら計算機が速くなっても、周期律表中の原子の組合せと各種結晶構造の全てを計算機シミュレーションによって網羅的に算定することは不可能である。そこで、ある限定的な原子種の組合せと結晶構造を仮定する。十年以上前、VUV 材料探索が始まり、我々はペロブスカイト構造のフッ化物を対象とした網羅的 DFT 計算を実施した。当時実験的に知られていたフッ化物は LiYF_4 のみであった。我々の数値計算結果は、 LiCaF_3 等が候補材料として最適であることを示した。その後、これらの材料は実験的に合成され、実用化に至っている。

我々は、今年度の九州大学情報基盤研究開発センターの特別プロジェクト JHPCN-Q により、膨大な計算量が必要な GW 近似計算に基づく MI 計算を可能とし、実施中である。VUV 材料や 2D ナノ炭素材料等を具体的な対象物としている。講演では、GW 近似計算結果と、それに基づく MI 計算結果を示す。