

2022 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	笠松秀輔
研究機関名	山形大学
所属部署名	学術研究院(理学部主担当)
役職名	准教授
研究課題名	不規則材料系のマテリアルズインフォマティクスへの展開
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

研究成果の概要

不規則材料系のマテリアルズインフォマティクスへの展開を阻んでいるのは、原子配置の組み合わせ爆発である。これに対応するために、昨年度までに開発してきた、不規則材料系の原子配置の組み合わせ爆発に対応するためのシミュレーション手法の高度化・高速化およびその応用を進めた。不規則材料系の一種であるアモルファス材料については、2 元系までであれば、高精度第一原理計算（ハイブリッド汎関数）を再現しつつ安定に動作する高精度ポテンシャルを生成できるようになった。これを用いた溶融・急冷のシミュレーションによって、 GeO_2 および ZnCl_2 ガラスで、実験で得られる構造因子を非常に良く再現することに成功した。さらに、ガラス転移の物理を司ると考えられている中距離秩序の実空間描像を位相的データ解析によって抽出することを試みており、温度や圧力変化に付随する中距離構造変化を捉えることに成功しつつある。

格子上の原子配置の不規則性を有する固溶体結晶系については、on-lattice 機械学習モデルと第一原理計算データの高速自動生成、および統計熱力学計算（レプリカ交換モンテカルロ法）を組み合わせるオープンソースフレームワーク abICS の高機能化（化学ポテンシャルを規定した計算への対応、化学膨張の予測）、高速化（ファイル I/O を抑制するための工夫、超並列ポピュレーションアニーリング法の実装）をすすめた。また、これを中温動作型燃料電池の電解質材料として有望視されている Sc 添加ジルコン酸バリウムに適用し、当該物質系の発見から 40 年にわたって不明であった、プロトン導入反応を活性化する局所構造を解明し、論文が受理され、cover art にも採択された (Chem. Mater. 35, 2289–2301, (2023))。