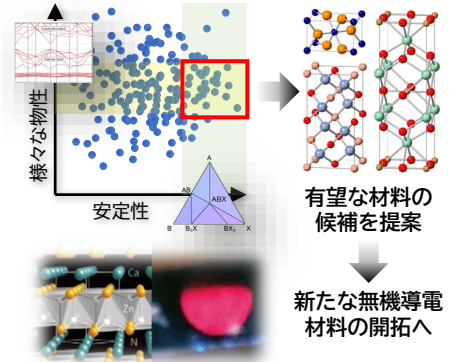


### 研究課題の目的：計算・データ科学手法を駆使して新材料の開拓を飛躍的に効率化

昨今のエネルギー・資源情勢や環境問題を背景に、卓越した機能はもちろんのこと、豊富に存在する元素から構成され無毒で環境調和性が高いことなど、新材料開発における要望は厳しくなっています。このような多様なニーズを満たす新材料を見出すには、的確な材料設計・探索の指針に基づいて、可能な限り広い探索範囲から有望な材料の候補を効率的に絞り込む必要があります。

本研究では計算・データ科学に立脚してインシリコ（計算機中）で無機導電材料の設計・探索を行うための基盤技術を開発し、一般に難題である新材料の開拓を飛躍的に効率化することを目指します。パワーデバイスや薄膜太陽電池等の高性能化をもたらす新たな無機導電材料の提案と計算・データ科学の支援による材料開発の効率化を通じて、脱炭素・省エネルギー社会の実現に貢献します。

### 理論計算と機械学習による材料設計・探索



### 研究成果

#### 高・低仕事関数の電極・キャリア輸送層材料の探索

- 無機及び有機電子・光電子デバイスの設計自由度拡大のニーズ
- ワイドギャップ系において特に問題

#### 表面構造・バンド位置の予測

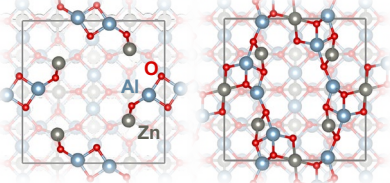
- 複雑な表面再構成構造の予測手法の開発と応用
- 表面バンド位置の予測手法の開発と応用

#### 高精度と高速の両立によるハイスループット 第一原理計算の実現と計算データの機械学習

#### 第一原理計算+バイズ最適化+進化的アルゴリズム により複雑な表面再構成構造を網羅的に予測：

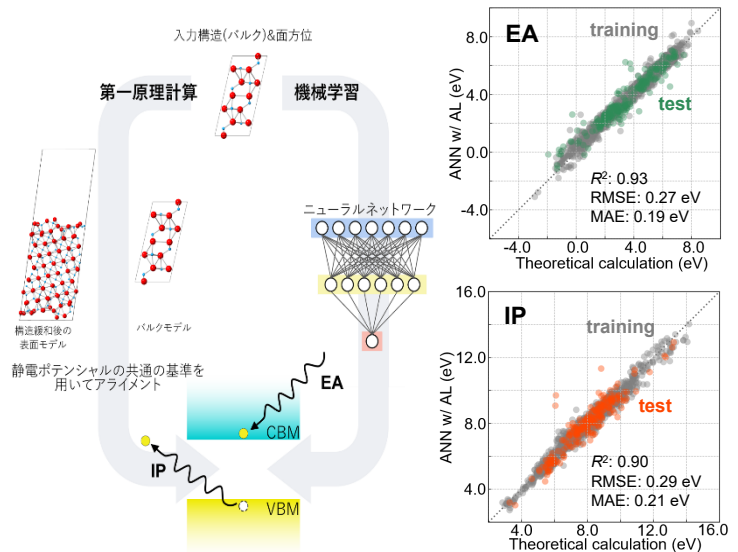
#### スピネル酸化物 (100)表面の例

Wang et al., *Acta Mater.*  
293, 121034 (2025).



#### 約3000種類の酸化物表面のバンド位置（IP、EA）の網羅的な第一原理計算とそのデータの機械学習による 予測モデル構築

Kiyohara et al., *JACS* 146, 9697 (2024).



### 研究成果の特徴と優位性：材料開発の効率化

- 最先端の計算科学・データ科学手法を駆使することで、膨大な数の物質の中から有望な候補を効率的に選出
- 大規模な理論計算データの俯瞰的な解析により、従来と異なる視点で材料設計・探索の指針を提案

### 今後の展開：有望材料の提案と実験による実証

- これまでに予測された電極・輸送層材料の候補を実験グループとの連携により実証（進行中）
- 無機導電材料の設計・探索のための理論計算・機械学習手法を高度化し、その応用により更に有望材料を提案