

第 12 回ハイパーマテリアルセミナー

日時：2020 年 11 月 26 日 16:00-17:00

(希望があれば 17:00 以降、個別に議論する場を設けます)

講演者：草場 穰 (総合研究大学院大学 複合科学研究科 統計科学専攻)

講演タイトル：構造類似性に基づいた結晶構造予測

概要：

計算機による無機材料探索の問題において前提となる最も基本的なタスクは、特定の化学組成の結晶構造を予測することである。結晶構造予測手法として、遺伝的アルゴリズム、粒子群最適化、ベイズ最適化などを用いた様々な手法が提案されているが、いずれも未知関数であるエネルギーの最小化問題をベースとしているので、数多くの第一原理計算を要求し、非常に多くの計算コストを必要とする。そこで本研究では、ある化学組成が与えられた時の結晶構造の予測問題を、データベース中の既存構造に対する構造類似性予測問題に置き換えることで、計算コストが高いエネルギー最小化問題を回避し、高速かつ実用的な結晶構造予測手法の提案を行う。構造が既知である 40 個の各化合物に対して、本手法によって上位 10 個までの結晶構造を提案した所、32 個の化合物に対して真の構造と類似する構造、12 個の化合物に対して真の構造と同一な構造の提案が確認された。