2024 年度

創発的研究支援事業　年次報告書【公開版】

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	2024 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日

研究成果の概要

固溶体の第一原理基統計熱力学計算フレームワーク abICS の開発を継続的に進めている。今年度は、最新のグラフニューラルネットワークを用いた機械学習モデルの能動学習に対応した。バージョン 2.2.0 として PyPI に登録し、Python ユーザーが簡便にインストールできる状態にしている。物性研究所スーパーコンピュータを用いたソフトウェア講習会も実施した。

応用計算の成果も挙がっている。酸素還元(ORR)触媒への応用を念頭に、窒素をドープした ZrO_2における表面偏析現象と、それが引き起こす表面での分子吸着の変化について解析を行った[J. Phys. Chem. C 129, 2403 (2025)]。その結果、ドープされた窒素が内部に偏析することで構造が安定化し、酸素空孔が表面に安定に存在することが分かった。酸素空孔には酸素分子は吸着するが、水分子は直接吸着せず、空孔周囲のカチオンに吸着しやすいことが分かった。これによって、水分子に被毒されない ORR 活性中心が形成され、実験で観測される高い活性につながっていると考えられる。このテーマ以外にも、プロトン伝導性酸化物の新規開発、および機能発現メカニズム理解への abICS を含む最新の計算科学の貢献についてのレビュー論文の執筆も行った(Sci. Technol. Adv. Mater. 25, 2416383 (2024))。

以上は固溶体の不規則性の研究であるが、ガラスの不規則構造の研究も進展している。典型的なネットワークガラス物質の 1 つである GeO_2について、機械学習ポテンシャルを用いた溶融急冷シミュレーションにより、実験で得られる回折データを非常に良く再現することに成功した。実験データを用いずとも、不規則なガラスの構造をコンピュータ上で予測することができることが初めて明確になったといえる。得られた構造に対するリング解析やパーシステントホモロジー解析によって、実験データに依拠する逆モンテカルロ法で得られる構造とは本質的に異なる、より中距離秩序が強い構造が「正解」であることも分かった[J. Chem. Phys. 161, 204103 (2024)]。