

—招待講演—

表面・界面・ナノ構造におけるデータ科学手法の活用

Applications of data-science approaches to surfaces, interfaces and nanostructures

東大院工および物材機構 情報統合型物質・材料研究拠点 渡邊聡

Grad. School of Engineering, The University of Tokyo, and CMI², NIMS, Satoshi Watanabe

「データ駆動科学」と呼ばれる分野が近年急速に発展している。これは、データ科学手法を用いてデータを解析し、その振舞いを支配する重要な要素を抽出したり、要素間の相関や法則性を導出したりすることにより、これを適用した分野の飛躍的な発展を目指すものである。物質科学におけるデータ駆動科学は、「マテリアルズ・インフォマティクス」と呼ばれることも多い。既に、所望の機能を有する材料の探索等で成果を挙げている。

表面・界面・ナノ構造の研究においても、データ駆動科学のアプローチによる新たな発展が期待されている。最先端の実験計測やスパコンを用いた計算では得られるデータ量が膨大になってきているという物質科学全般に当てはまる傾向に加え、バルクに比べて構造等の多様性が一段と大きいことがその理由である。膨大なデータの解析や高度な計測・計算の効率的遂行のためにデータ科学手法を活用することにより、研究を大幅に加速したり、発見的な推論では見落とされてしまう関係性・法則性を見出したりすることが期待される。

本講演では、データ科学手法を表面・界面・ナノ構造の研究にどのように活用できるか、様々な研究例を紹介しつつ私なりに整理し、今後の展望を述べたい。研究例の紹介の中では、我々のグループで行った、アモルファス酸化物中の原子・イオン位置変化に伴うエネルギー変化をニューラルネットワークによって学習し、精度を十分保ちつつ計算コストを削減した研究¹⁾、および金電極間の様々な分子架橋配置に対応する透過係数スペクトルをクラスタ解析によって分類し、分類された各クラスタを分子配置の構造自由度によって特徴づけることを試みた研究²⁾も紹介したい。

なお、紹介する研究の一部は科研費新学術領域「スパースモデリング」、JSTイノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI2I)」、およびJST-CREST「界面超空間制御による超高効率電子デバイスの創製」から支援を受けて行われた。

参考文献

- 1) W. Li, Y. Ando and S. Watanabe, submitted.
- 2) 安藤康伸, 藤掛壮, 渡邊聡, 表面科学 36, 515 (2015).