

計算シミュレーションと情報技術を活用した材料機能解析と材料探索

Function Analysis and Exploration of Materials By Computer Simulations and Informatics

キーワード：電子状態、計算シミュレーション、インフォマティクス / key words: Electronic Structure, Computer Simulation, Informatics

杉本 学 准教授 博士 (工学) / Manabu SUGIMOTO Assoc. Prof., D. Eng.

環境科学部門 環境・生命化学分野 / Research Field of Environmental and Biochemical Technology

E-mail : sugimoto@※ Tel : 096-342-3650 URL : http://www.chem.kumamoto-u.ac.jp/~kucc/

●電子状態シミュレーションによる材料機能解析

第一原理計算などの計算手法を用いて、計算機上で材料をモデリングし、電子状態に関する計算シミュレーション（「電子状態シミュレーション」）を行う。それを通じて材料の構造物性相関を調べて材料機能の発現メカニズム解析（化学原理）を解明し、材料設計の指導原理を確立する。研究対象は、

- (1) 触媒反応解析（錯体触媒、担持金属触媒）
- (2) 太陽電池（色素増感太陽電池、ペロブスカイト太陽電池）
- (3) 有機EL素子（発光材料、ホール輸送材料）
- (4) 生体イメージング用蛍光色素（有機系分子材料）

●電子状態インフォマティクスによる材料探索

電子状態計算によって分子の特徴を数値化し、それをデータベース化して統計解析や機械学習（「電子状態インフォマティクス」）を行う。この研究を通じて、有望な材料の探索と材料機能の最適化を目指す。特に、天然に存在する分子性物質から、有望な（1）医薬品、（2）農薬、（2）電子材料、の発見を目指した研究に挑戦している。

Materials Function Analysis by “Electronic-Structure Simulation”:

Computer modeling and simulations are applied to reveal chemical principles and controlling factors of practically important properties of materials and their hybrid devices. Our goal is to suggest useful “materials-design principles”.

Materials Exploration by “Electronic-Structure Informatics”:

Statistical-analysis and machine-learning algorithms are developed and applied to discover promising materials for medicinal drugs, agrochemicals, and electronic materials. The electronic-structure calculation provides numerical description of materials by which molecular search can be performed.

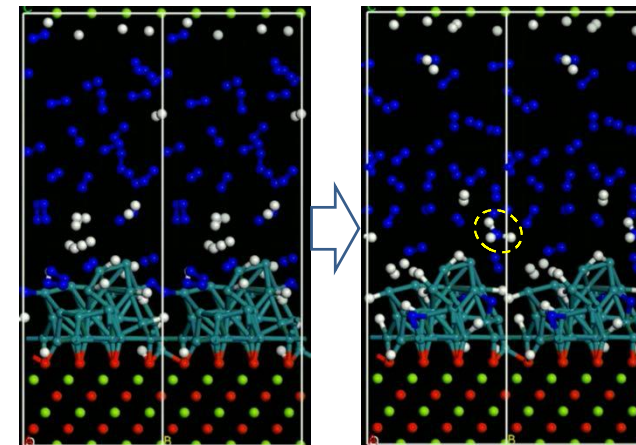


Figure 1 First-principles molecular dynamics simulation on the NH_3 formation of Ru/MgO

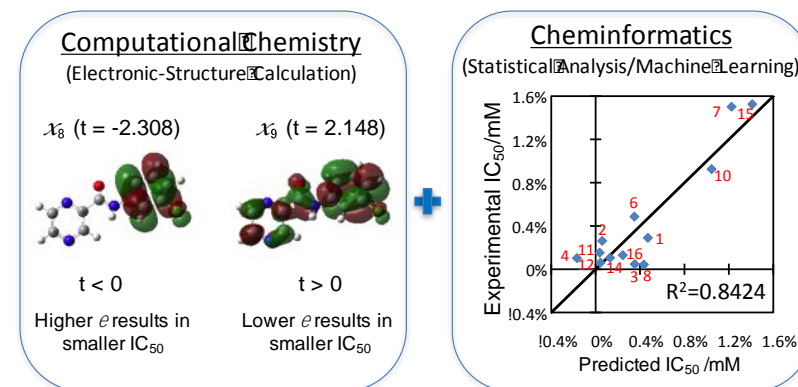


Figure 2 An example of the “electronic-structure informatics” study