

界面構造決定 高速化に成功

東大生技研

、東京大学生産技術研
究所は8日、ビックデ
ータを活用して材料の
界面構造の決定スピー
ドを100倍以上高速
化することに成功した
と発表した。界面構造
は電池や触媒などのさ
まざまな機能と密接に
かかわっている。開発
した技術を適用するこ

とで開発スピードを加
速できる可能性がある
。

界面は物質の機能に
決定的な役割を果た
す。これまで、界面の
構造を決定するために
は数千から数万回の構
造緩和計算を行い、そ
の中で最も安定な構造
を探すという作業が必
要だった。1回あたり
数秒から数時間の時間
を要するため、1つの
界面構造を決定するた
けでも膨大な時間と労
力がかかっていた。

東大生研の清原慎太
学院生、溝口照康准教
授らは界面を決定する
計算に、資源探索など
に用いられる「クリギ
ング法」と呼ばれる空
間補間法を初めて適用

した。特定の地点のデ
ータから、その間に存
在する空間のデータを
補間する手法で、より
少ない作業で効率的に
結果を推測できる。

界面の幾何的なデー
タとエネルギーに関す
るデータで構成される
多次元ビックデータに
対してクリギング法を
適用した結果、1000
回程度の計算で構造緩
和計算で界面構造を決
定することに成功。従
来の手法の約246分
の1の計算回数で同じ
構造を得ることができ
た。

今回開発した手法は
汎用性に優れ、いかな
る物質の界面にも適用
できる。ビックデータ
を物質研究に活用した

研究分野は「マテリア
ル・インフォマティク
ス」と呼ばれ、各国で
巨大プロジェクトが進
められている。