

《研究シーズ概要》

発表者氏名	石谷 善博			
学校名・学部・学科	千葉大学・大学院工学研究院・電気電子工学コース			
職名	教授			
連絡先	TEL	043-290-3330	E-MAIL	Ishitani@faculty.chiba-u.jp

1 発表題目並びに副題

(副題については、一般の方でも分かるように記載してください。)

材料開発および材料評価における AI の活用

2 研究概要

(図、表などを交えて分かり易く説明してください。)

今、様々な元素を組み合わせた材料開発が各分野で行われています。元素の組合せやそこから出る機能性は多種多様であり、ここには以下の難しさがあります。ある機能を得るための材料を開発する場合に、「あたり」をつけ、数多くの実験・理論計算の結果から最適化をして行きますが、その「あたり」つけたところは過去の経験に基づくもので最適解の近傍とは限らず、解は局所的解かもしれない。更に根源的なところで、「ある機能」というのはその機能を用いる目的があるはずですが、もっと別な機能を用いてその目的を達成できるかもしれない、その「別な機能」は未発見のものかもしれません。そして、材料の製造方法においても、いくつもの変数が複雑に絡み合っていてこちらが良ければこちらが立たずといった状況が多くあります。こういった材料開発において一つ一つ人間の手で試行錯誤しているほど人間は忍耐力がなく、複雑な材料開発に AI の力を借りて行う方法が「マテリアルインフォマティクス」と呼ばれています。

私たちは、高機能 LED やトランジスタに用いられる窒化物半導体結晶の研究を行っていますが、単に電子や光の性質を設計するだけでなく、熱の実体である原子の振動を制御するデバイスの創製を目指しています。ここでは、従来の設計に比べて設計変数は多くなり、また電子の性質の最適化と熱的性質の最適化の折り合いが悪いことが多くあります。ここで、AI を用いた最適結晶構造の設計により方向性を得、また私たちが予測しない機能があるかどうかの確認を行うことができる半導体設計システムの構築を目指しています。

また、私たちは光学的結晶評価・解析手法を主に用いています。ラマン分光、赤外～紫外分光、時間分解蛍光寿命解析などを用いていますが、これらのデータに含まれている情報も多岐に及んでいます。当初予測しない情報も含まれており、私たちがそれら情報を漏らさず認識することが望まれます。AI を用いて、このような分光学的データに含まれる情報を認識する技術も目指しています。

3 新規性・優位性の説

現在結晶成長は原料から結晶ができるまでの多くの複雑な化学反応計算と物理学的計算を用いて結晶成長過程と結晶の品質の関係を結び付け予測することが行われていますが、成長条件と結晶機能の端的な関連づけに関する視点に乏しいと思われます。この2要素の間に幾つか必要な考察のステップがあるからです。その要素を特定することが、AI を用いた材料設計の重要な要素になると考えています。

また、分光スペクトル解析は非常に複雑であり、これまでの経験から赤外およびラマン分光スペクトルの超精密フィッティングを AI 機能を用いて行い、またそこからの情報抽出をすることは新たな挑戦であると考えます。

4 特許権の取得の有無

取得済み申請中未申請