

応用セラミックス研究所 第 313 回 講演会

化学式から安定な結晶構造を計算するソフトウェア USPEX の開発者 Oganov 博士に講演です。ご参集ください。

講演題目: Computational Materials Discovery: USPEX

講演者: Prof. Artem R. Oganov

Skolkovo Institute of Science and Technology, Skolkovo Innovation Center, 3 Nobel St., Moscow 143026, Russia.

日時: 2 月 8 日(月), 10:00-11:30

場所: 元素センター棟 (S8) 1F レクチャーホール

遺伝アルゴリズムを利用した新材料探索手法 (USPEX)により、元素種を指定するだけで任意の条件における安定化合物とその結晶構造を予測することが可能となった。本手法の最近の発展として、多くの計算効率化に加え低次元化合物/分子性決結晶への応用 (例えば、 $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2$ や $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2$)、計算高速化のための機械学習機能、遺伝アルゴリズムとメタダイナミクスの併用、Mendelevian 探索、などを挙げることができる。

本講演内で紹介する事例として、

- 1 : 新規イオン結晶としての γ -B 相と、光学的に透明な Na 絶縁体
- 2 : 高压条件でのみ安定になると予測される新規化合物 (Na_3Cl , NaCl_3 , NaCl_7 , Mg_3O_2 , MgO_3 , SiO , SiO_3)
- 3 : ホウ素の新規低次元相 (表面再構成による半導体/金属状態の出現、ボロフェン、磁性を持つ二次元ボロンシート)
- 4 : 新規誘電性高分子と新規永久磁石材料
- 5 : ウルトラハード材料とダイヤモンドが最も硬い材料であることの計算化学的証明

世話人 細野 (内線 5009)