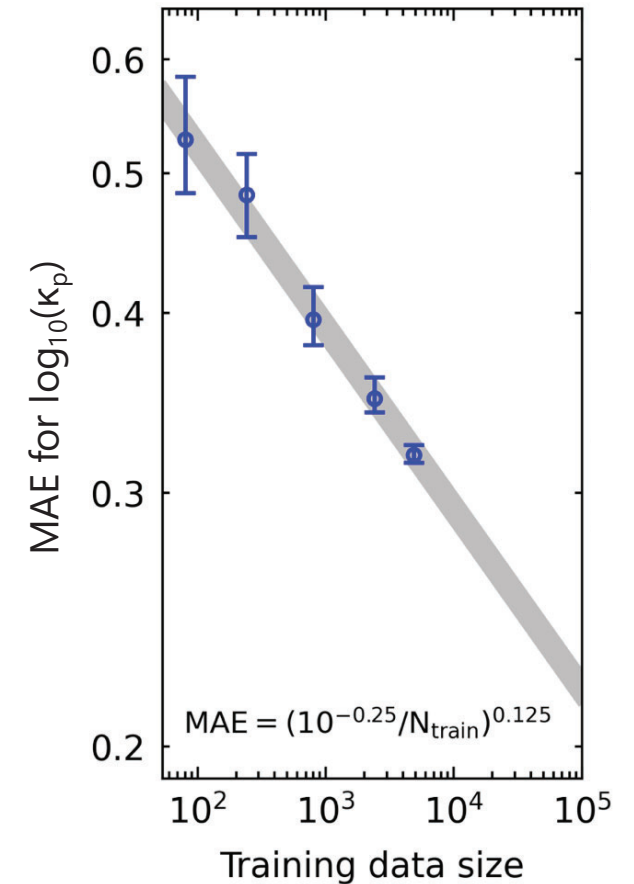


第一原理計算を用いた非調和フォノン特性データベースの構築

統計数理研究所 先端データサイエンス研究系 大西正人

近年、データ駆動学材料開発が急速に進んでいるが、無機材料に関しては Materials Projectなどの従来のデータベースに加え、DeepMind GNoME (2023), META OMat24 (2024), Microsoft MatterK (2025) など巨大かつ新しいデータベース公開も続いている。しかし、これらのデータベースは熱物性データが不足、あるいは材料空間が制限されている。また熱物性は不純物、キャリア密度などにより大きく変化するため、条件が明確な理論計算による熱物性データベース構築が望まれていた。そこで、本研究では第一原理計算に基づく非調和フォノン特性データベースを構築した。さらにデータベースを用いたスケーリング則の実証（右図）やスクリーニングによる高熱・低熱伝導材料の探索を行った。



図：熱伝導率 (κ_p) 予測の深層学習スケーリング則

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群	
	ノード時間	650,000 時間
	使用メモリ	100 GB
	並列化	1ノード 並列