マテリアルズ・インフォマティクスによる新超伝導物質の発見

NIMSと愛媛大学の研究チームは、データ科学で新物質を探索するマテリアルズ・インフォマティクス (MI) の手法を用いて、圧力下で発現する新しい超伝導物質を発見することに成功しました。本発見は、マテリアルズ・インフォマティクスを活用して、効率よく新超伝導物質を発見できることを実験的に示したもので、この取り組みは超伝導物質に限らず、さまざまな機能性物質の開発に応用可能な手法であると期待されます。

これまで、新超伝導物質をはじめ新物質の探索は、論文に掲載された結晶構造や原子価数などの情報をもとに、研究者の経験と直感によって進められてきました。そのため、関連した物質を絨毯爆撃のように網羅的に合成しなければならず、時間もコストもかかる大変困難な作業でした。そこで、より効率よく新物質を発見する新しい手法の開発が求められていました。

本研究では 10 万個以上の無機物質の結晶構造データが蓄積されている AtomWork に着眼しました。まず、現実的に電子状態を計算可能な約 1500 個の候補物質群に絞り込み、さらにそれらの電子状態の計算を行うことによって超伝導に好ましい物質を 27 個選定しました。この 27 個のうち、実際に合成しやすい物質を研究者が選び、SnBi2Se4, PbBi2Te4 という 2 つの物質に到達しました。

これら 2 つの物質を合成し、これまで開発してきた高圧力下の電気抵抗測定装置を用いることによって超伝導の発現に成功しました。さらにこの超伝導転移温度は圧力上昇に伴いより高くなることも発見しました。データ科学が主導となって固定概念にとらわれることなく超伝導が発現する物質を探索し、それをピンポイントで効率よく具現化できることを示した極めて新しい取り組みです。

本研究で発見した 2 つの物質は、新超伝導であるだけでなく、新しい熱電物質の候補ともなりえることが実験的に明らかになりました。本研究の手法を用いることで、超伝導のみならず様々な機能性物質の開発に応用できる可能性があります。今後は、対象物質の範囲を広げ物性発現に必要となるパラメータをより精密に導入し、例えば室温超伝導物質などの革新的な機能性物質の発見を目指します。

本研究成果は、応用物理学会の国際誌 Applied Physics Express (2018 年 9 月 号) に掲載が 決定し、Spotlight 論文としてウェブ上に先行掲載されました。

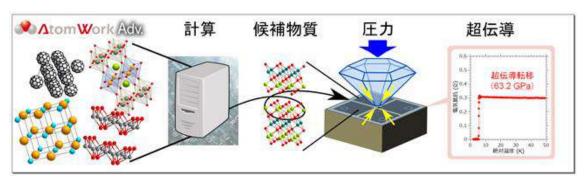


図 1: データーベースから計算により候補物質を選定し、高圧力を加え超伝導を発見するコンセプト

日文发布全文 http://www.nims.go.jp/news/press/2018/08/201808280.html